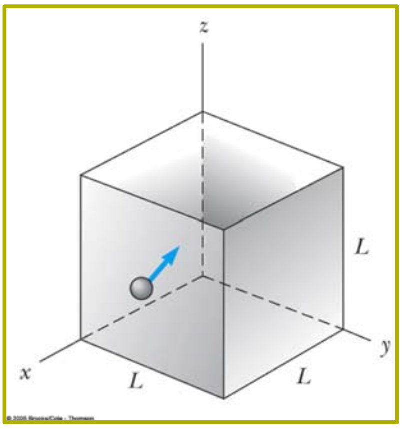
8장 3차원에서의 양자역학

양자역학의 3차원적 기술 : 원자, 고체상태 및 핵물리학에 적용. 수소원자

선명한 관측량(sharp observable)

고전물리학의 보존되는 물리량

양자화가 가능한 관측량



8.1 3차원 상자 안의 입자

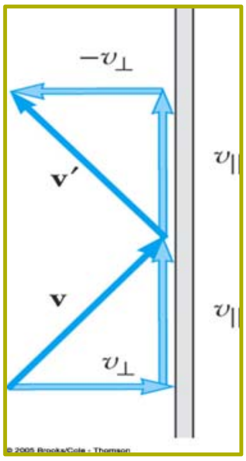
정육면체 상자에 갇혀있는 하나의 입자

$0 \leqq x,y,z \leqq L$

충돌과정에서 벽에서 탄성충돌 : 운동량중 벽과 수직한 성분은 방향이 바뀌고(부호가 바뀐다) 다른 두 성분은 영향을 받지 않는다.

$|P_x|, |P_y|, |P_z|, E$:

☞ 보존량, 선명한 관측량, 양자화 되는 량



$P(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2$

☞ $|\psi(\vec{r},t)|^2 dv$: dv에서 입자를 발견할 확률

상자 밖의 입자

$\Psi = 0$: $x,y,z \geq L$ $\quad x,y,z \leq 0$ 상자 밖

상자 내부의 입자

$0 \leq x,y,z \leq L$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U(\vec{r})\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad (8.1)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad : \quad Laplacian \qquad (8.2)$$

$$U(\vec{r}) = U(x,y,z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \qquad (8.3)$$
$$= [K_x] + [K_y] + [K_z]$$

Shroedinger 방정식의 해 : 정상상태(stationary state)

$U(\vec{r}) = U(x,y,z)$; 시간의 함수가 아닌 경우

$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-i\omega t} \qquad (8.4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad (8.5)$$

☞ $E = \hbar\omega$

☞ 시간에 무관한 Schroedinger Equation

상자내부 : $0 \leq x,y,z \leq L$ $\quad U = 0$ **상자내부의 potential 은 zero**

$$\psi(\vec{r}) = \psi(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) \qquad (8.6)$$

(8.6)를 (8.5)에 대입하고 각항을 $\psi(x,y,z)$로 나누면 $[U(r) = 0$ 에서$]$

$$-\frac{\hbar^2}{2m\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dy^2} - \frac{\hbar^2}{2m\psi_3}\frac{d^2\psi_3}{dz^2} = E$$

상자 안의 모든 곳에서 방정식을 만족하기 위해서는 이 항들은 각각 상수이어야 한다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}=E_1$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dy^2}=E_2 \qquad (8.7)$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m\psi_3}\frac{d^2\psi_3}{dz^2}=E_3$$
$$E_1+E_2+E_3=E$$

(8.7)은 1차원 무한 직사각형 우물의 경우와 동일하므로 가능한 해는

$$\sin k_1 x,\quad \cos k_1 x,\quad k_1=\sqrt{2mE_1/\hbar^2}$$

$\psi_1(x)=0 \;\; at \;\; x=0$ 이므로

$$\sin k_1 x$$

만이 해로서 만족한다.

$$\sin k_1 L=0$$
$$k_1 L=n_1\pi, \quad \text{or} \quad k_1=n_1\frac{\pi}{L}$$
$$|p_x|=\hbar k_1=n_1\frac{\pi\hbar}{L} \qquad n_1=1,2,3\cdots$$
$$|p_y|=\hbar k_2=n_2\frac{\pi\hbar}{L} \qquad n_2=1,2,3\cdots \qquad (8.8)$$
$$|p_z|=\hbar k_3=n_3\frac{\pi\hbar}{L} \qquad n_3=1,2,3\cdots$$

상자안의 한 입자에 대해 허용된 불연속적인 에너지

$$E=E_1+E_2+E_3=\frac{1}{2m}(|p_x|^2+|p_y|^2+|p_z|^2) \qquad (8.9)$$
$$=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2)$$

▶ 운동량(8.8), 에너지(8.9)가 양자화 된다.

▶ 공간에 있는 입자 : 3개의 자유도 → 3 개의 양자수

따라서 시간의존 파동함수는

$$\Psi(x,y,z,t)=A\,\sin k_1 x\,\sin k_2 y\,\sin k_3 z\,e^{-i\omega t} \;\; (0\le x,y,z\le L) \qquad (8.10)$$
$$=0 \qquad \text{(그밖의 영역일 때, 상자외부)}$$

☞ $A=\left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}$: 규격화 상수

(예제8.1) 상자내의 입자의 파동함수 규격화

가장 낮은 에너지 상태에서 식(8.10)의 규격화 상수 A를 구하라.

$$n_1=n_2=n_3=1,\quad k_1=k_2=k_3=\frac{\pi}{L}$$
$$1=\int_0^L dx\int_0^L dy\int_0^L dz\,|\psi(x,y,z)|^2 \qquad \text{: 규격화 조건}$$
$$=A^2\int_0^L \sin^2\frac{\pi x}{L}dx\int_0^L \sin^2\frac{\pi y}{L}dy\int_0^L \sin^2\frac{\pi z}{L}dz$$
$$\int_0^L \sin^2\frac{\pi x}{L}dx=\frac{L}{2}-\frac{L}{4\pi}\sin(2\pi x/L)\Big|_0^L=\frac{L}{2}$$
$$1=A^2\left(\frac{L}{2}\right)^3 \qquad A=\left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}$$

연습문제 1 $0 < x, y, z < \frac{L}{4}$ **에서 발견할 확률은?**

답 0.040(4%)

연습문제 2 결정내의 결함($L = 5\,\text{Å}$인 삼차원 상자)

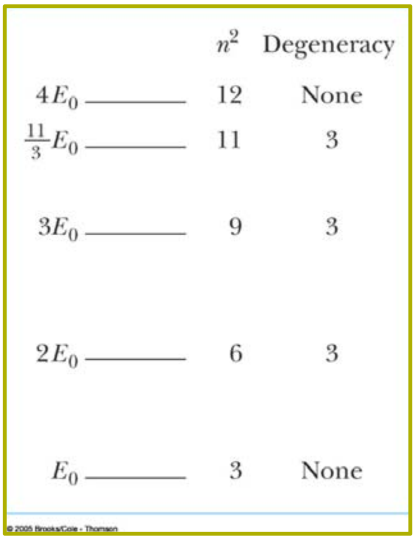
결함에 갇힌 바닥상태 전자의 운동량과 에너지 값은?

답 $|p_x| = |p_y| = |p_z| = 1.24\,\text{keV/c}\,;\ E = 4.51\,\text{eV}$

바닥상태

$$n_1 = n_2 = n_3 = 1$$

$$E_{1,1,1} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$



첫 번째 들뜬 상태

$$E_{2,1,1} = E_{1,2,1} = E_{1,1,2} = \frac{6\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

축퇴(degeneracy), 겹침 : 서로 다른 상태가 같은 에너지를 가질 때 이 상태들은 축퇴되었다고 한다.

degenerate level(겹침 준위)

threefold degenerate, triply degenerate, 3중 축퇴

Table 8.1 Quantum Numbers and Degeneracies of the Energy Levels for a Particle Confined to a Cubic Box*

n_1	n_2	n_3	n^2	Degeneracy
1	1	1	3	None
1	1	2	6	Threefold
1	2	1	6	
2	1	1	6	
1	2	2	9	Threefold
2	1	2	9	
2	2	1	9	
1	1	3	11	Threefold
1	3	1	11	
3	1	1	11	
2	2	2	12	None

*Note: $n^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$.

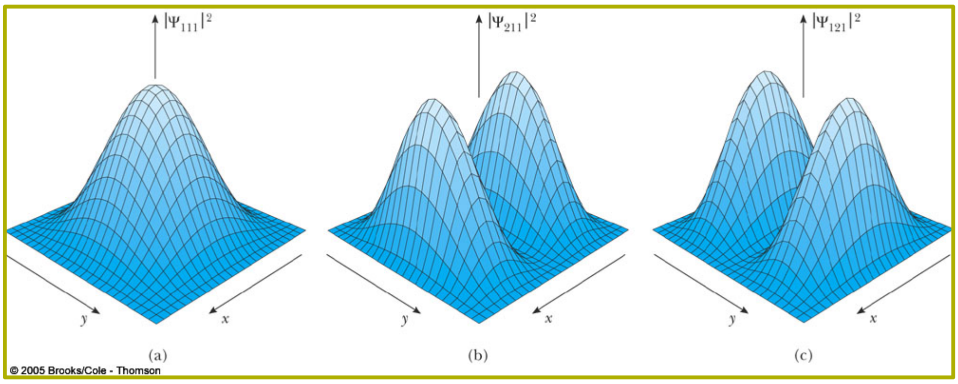


그림 8.4 규격화되지 않은 상자 안 입자에 대한 확률 밀도

예제 8.2 두 번째 들뜬 상태

$n_1 = 2,\ n_2 = 2,\ n_3 = 1$ and $n_1 = 2,\ n_2 = 1,\ n_3 = 2$
and $n_1 = 1,\ n_2 = 2,\ n_3 = 2$

파동함수는

$$\Psi_{2,2,1} = A\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{2\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)e^{-iE_{2,2,1}t/\hbar}$$

$$\Psi_{2,1,2} = A\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{2\pi z}{L}\right)e^{-iE_{2,1,2}t/\hbar}$$

$$\Psi_{1,2,2} = A\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{2\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{2\pi z}{L}\right)e^{-iE_{1,2,2}t/\hbar}$$

3-fold degenerate

$$E_{2,2,1} = E_{2,1,2} = E_{1,2,2} = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

예제 8.3 직육면체 상자 안에서의 양자화

$L_1,\ L_2,\ L_3$인 직육면체 상자 안에 있는 하나의 입자에 허용된 에너지 식을 구하라.

$$|p_x| = \hbar k_1 = n_1\frac{\pi\hbar}{L_1} \qquad n_1 = 1,2,3,\cdots$$

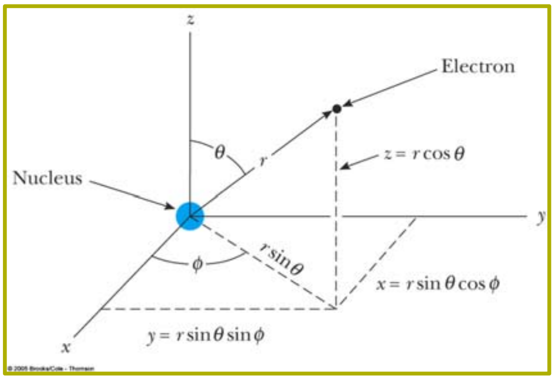
$$|p_y| = \hbar k_2 = n_2\frac{\pi\hbar}{L_2} \qquad n_2 = 1,2,3,\cdots$$

$$|p_z| = \hbar k_3 = n_3\frac{\pi\hbar}{L_3} \qquad n_3 = 1,2,3,\cdots$$

$$E = (|p_x|^2 + |p_y|^2 + |p_z|^2)/2m$$
$$= \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{n_1}{L_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{L_2}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{L_3}\right)^2\right\}$$

축퇴 : 대칭성이 높을수록 더 많은 겹칩을 가지게 된다.

7.2 중심력과 각운동량



중심력장에서의 양자화

구면극좌표(spherical polar coordinates)

$x = r\sin\theta\cos\phi,\ \ y = r\sin\theta\sin\phi$

$z = r\cos\theta$

에너지의 양자화, 에너지의 선명한 값

$\psi(r)e^{-i\omega t},\ \ E = \hbar\omega$

중심력장

1. E의 보존 → 에너지의 양자화
2. 각운동량의 보존 → 각운동량의 양자화

각운동량의 모든 성분을 동시에 알 수 없다

구조화 함수(spherical harmonics) : $|\vec{L}|$ 및 L_z가 모두 선명한 관측량이 되기 위한 파동함수

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \qquad (8.11)$$

구면 극좌표에서의 Laplacian은

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\frac{2}{r}\right)\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \csc^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

$U = U(r)$: 중심력의 퍼텐셜 에너지

(식 8.5)의 각 항을 $R\Theta\Phi$로 나누면

$$\frac{-\hbar^2}{2mR}\left[\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right]-\frac{\hbar^2}{2m\Theta}\frac{1}{r^2}\left[\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right]$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m\Phi}\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+U(r)=E$$

ϕ에 대한 식을 분리시키면

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=-\sin^2\theta\left\{\frac{r^2}{R}\left[\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right]+\frac{1}{\Theta}\left[\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right]+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-U(r)]\right\} \quad (8.12)$$

좌변은 ϕ만의 함수, 우변은 r,θ만의 함수 → 좌변과 우변이 같기 위해서는 양변이 상수이어야!

분리상수 : $-m_l^2$, m_l : 자기 양자수(magnetic quantum number)

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=-m_l^2\Phi(\phi) \quad (8.13)$$

위 식의 해는

$$\Phi(\phi)=\exp(im_l\phi)$$

$\Phi(\phi+2\pi)=\Phi(\phi)$; 2π의 주기성 → m_l: 정수

분리상수 : $-m_l^2$ 를 우변에 적용시켜 정리하면

$$\frac{r^2}{R}\left[\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right]+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-U(r)]=-\frac{1}{\Theta}\left[\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right]+\frac{m_l^2}{\sin^2\theta} \quad (8.14)$$

좌변은 r만의 함수, 우변은 θ만의 함수

분리상수 : $l(l+1)$를 적용하여 정리하면

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{d\Theta}{d\theta}-m_l^2\csc^2\theta\Theta(\theta)=-l(l+1)\Theta(\theta) \quad (8.15)$$

l : 궤도 양자수(orbital quantum number), 0을 포함하는 양의 정수만 허용된다.

$l=0,1,2,3,\cdots$ $|m_l| \leq l$

$\Theta(\theta)$: associated Legendre polynomials(버금 르장드르 다항식)

Table 8.2 Some Associated Legendre Polynomials $P_\ell^{m_\ell}(\cos\theta)$

$P_0^0 = 1$
$P_1^0 = 2\cos\theta$
$P_1^1 = \sin\theta$
$P_2^0 = 4(3\cos^2\theta - 1)$
$P_2^1 = 4\sin\theta\cos\theta$
$P_2^2 = \sin^2\theta$
$P_3^0 = 24(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$
$P_3^1 = 6\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)$
$P_3^2 = 6\sin^2\theta\cos\theta$
$P_3^3 = \sin^3\theta$

$\Theta(\theta)\Phi(\phi) = Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$: spherical harmonics(구면 조화 함수)

Table 8.3 The Spherical Harmonics $Y_\ell^{m_\ell}(\theta, \phi)$

$$Y_0^0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$Y_1^0 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}} \cdot \cos\theta$$

$$Y_1^{\pm1} = \mp\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot \sin\theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0 = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}} \cdot (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_2^{\pm1} = \mp\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \sin\theta \cdot \cos\theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^{\pm2} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \sin^2\theta \cdot e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_3^0 = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}} \cdot (5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$$

$$Y_3^{\pm1} = \mp\frac{1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}} \cdot \sin\theta \cdot (5\cos^2\theta - 1) \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_3^{\pm2} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cdot \sin^2\theta \cdot \cos\theta \cdot e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_3^{\pm3} = \mp\frac{1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}} \cdot \sin^3\theta \cdot e^{\pm 3i\phi}$$

중심력에 대한 선명한 관측량 $|\vec{L}|$, L_z

$$|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar \qquad l = 0, 1, 2, \ldots \qquad (8.16)$$
$$L_z = m_l\hbar \qquad m_l = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l$$

☞ l : 궤도양자수(orbital quantum number)

☞ m_l : 자기양자수(magnetic quantum number)

L_z는 벡터 $|\vec{L}|$의 크기보다 절대로 클 수 없다.

지름 파동방정식(radial wave equation)

지름 파동함수는 퍼텐셜 에너지 함수 $U(r)$에 의존한다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2R}{dr^2} + \left(\frac{2}{r}\right)\frac{dR}{dr}\right] + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}R(r) + U(r)R(r) = ER(r) \qquad (8.17)$$

고정된 l에 대해, 입자의 에너지 E는 m_l과는 무관하고, 따라서 $(2l+1)$겹 축퇴를 갖는다.

예제 8.4 돌멩이 하나의 궤도 양자수

$m = 1\text{kg}$, $R = 1\text{m}$, $T = 1\text{s}$일 때의 궤도양자수 $l = ?$

(풀이)

$$v = \frac{2\pi R}{T} = \frac{2\pi(1\text{m})}{1\text{s}} = 6.28\text{m/s}$$

$$|\vec{L}| = mvR = (1\text{kg})(6.28\text{m/s})(1\text{m}) = 6.28\ \text{kg}\cdot\text{m}^2/\text{s}$$

$|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar \simeq l\hbar$ 이므로

$$l = \frac{|\vec{L}|}{\hbar} = \frac{6.28\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^2/\mathrm{s}}{1.055\times10^{-34}\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^2/\mathrm{s}} = 5.96\times10^{34}$$

→양자화(불연속성)을 볼 수 없다.

$l = 5.96\times10^{34}$ 과 $l+1 = 5.96\times10^{34}+1$ 은 구분(양자화)되지 않는다.

예제 8.5 Bohr 원자 재고찰

Bohr의 가정 : 각운동량의 양자화

$|\vec{L}| = mvr = n\hbar \qquad n = 1, 2, 3, \cdots$: Bohr의 가정

그러나 양자역학에서의 각운동량은

$|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar \qquad l = 0,1,2,\cdots$

$L_z = m\hbar \qquad m_l = 0 \pm 1 \pm 2 \cdots \pm l$

$|\vec{L}| = 0,\ \sqrt{2}\hbar,\ \sqrt{6}\hbar,\ \cdots$이어서 $\hbar$의 정수배가 아니다.

- ▶Bohr의 모형은 $|\vec{L}|$의 양자화와 좌표축에 따른 그 성분의 양자화(L_z)를 구분하지 않는다.
- ▶고전 물리적 관점에서는 항상 $\vec{L}$의 방향과 나란하도록 좌표축을 취할 수 있다. 그러나 이럴 경우 불확정성 원리에 위배된다.

7.3 공간 양자화

$L = |\vec{L}|,\ L_z$: 선명한 관측 량, 양자화 되는 물리량

공간양자화 : $\vec{L}$의 방향이 임의의 축(z-축, 자장($\vec{B}$)의 방향)에 대해 양자화 되어야 한다.

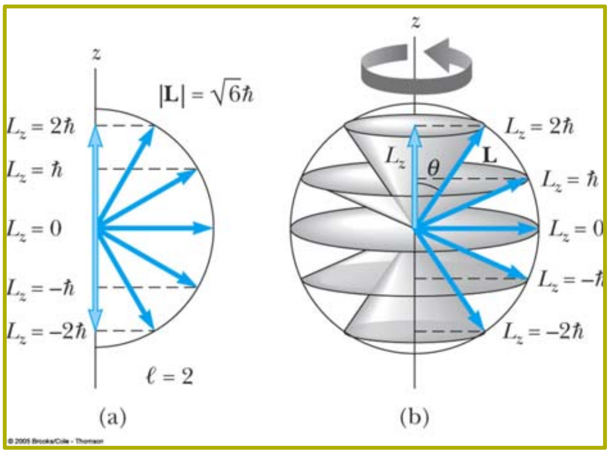
$|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar \qquad l = 0,1,2,\cdots$

$L_z = m\hbar \qquad m_l = 0 \pm 1 \pm 2 \cdots \pm l$

$l = 0$ $L = 0$	$m_l = 0$ $L_z = 0$
$l = 1$ $L = \sqrt{2}\hbar$	$m_l = -1,\ 0,\ +1$ $L_z = -\hbar,\ 0,\ +\hbar$
$l = 2$ $L = \sqrt{6}\hbar$	$m_l = -2,\ -1,\ 0,\ +1,\ +2$ $L_z = -2\hbar,\ -\hbar,\ 0,\ +\hbar,\ +2\hbar$

▶L_z는 전체 각운동량 $\vec{L}$보다 작아야 하기 때문에 $\vec{L}$은 z-축과 나란할 수 없다.

- ▶이때 z-축의 방향은 공간양자화를 일으키는 원인(자장)의 방향으로 보아야 한다.
- ▶전자가 각운동량을 가지면 magnetic moment $\vec{\mu}$를 가지게 되고 이는 자장 $\vec{B}$에서 potential energy 를 가지므로 자장이 양자화의 원인이 되고 이 자장의 방향을 관습적으로 z-축으로 취한다.



$U = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$

$\vec{\tau} = \vec{\mu}\times\vec{B}$

$$\cos\theta = \frac{L_z}{|\vec{L}|} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

(8.18)

(8.18)의 규칙은 힘의 법칙에서 나온 것이 아니라 공간 그 자체의 구조에 의한 것이므로 공간 양자화라고 한다.

▶ $\vec{L}$ 이 특정한 방향을 가지면 → 각운동량의 3개의 성분 L_x, L_y, L_z를 모두 정확히 알 수 있게 되어 불확정성 원리에 위배된다.

⇒L_z를 알면 L_x, L_y는 알 수 없다. 정해지지 않는다.

⇒$\vec{L}$은 z-축을 중심으로 공간에서 원추를 이루는 형태로 세차운동한다.

예제 8.6 원자내의 전자에 대한 공간의 양자화

$l=3$인 경우 $|\vec{L}|$, L_z 및 θ의 허용 값을 구하라.

(풀이) $l=3$인 경우

$$|\vec{L}| = \sqrt{3(3+1)}\,\hbar = 2\sqrt{3}\,\hbar$$

$$L_z = -3\hbar,\ -2\hbar,\ -\hbar,\ 0,\ \hbar,\ 2\hbar,\ 3\hbar$$

$$\cos\theta = \frac{L_z}{|\vec{L}|} = \frac{m_l}{2\sqrt{3}}$$

$$\cos\theta = \pm 0.866,\ \pm 0.577,\quad \pm 0.289,\ 0 \qquad \text{or}$$
$$\theta = \pm 30^\circ,\quad \pm 54.8^\circ,\ \pm 73.2^\circ,\ 90^\circ$$

연습문제 3. 예제 8.6의 전자 및 예제 8.4의 1.00kg 돌맹이에 대하여 $\vec{L}$ 와 z-축 사이의 최소각을 비교하여라.

답 전자의 경우 30도, 돌맹이의 경우 2.3×10^{-16}도

8.4 각운동량과 에너지의 양자화

중심력에 대한 슈뢰딩거 방정정식의 해를 얻는 데 있어서 각운동량에 대한 고려

계의 관측 가능량=선명한 측정 값 ⟷ 고유값 방정식

선명한 관측 가능량들은 고전적인 운동 상수들이다.

$$[Q]\Psi = q\Psi \tag{8.19}$$

입자의 에너지의 보존 = 선명한 관측량

$$[E]\Psi = E\Psi$$

중심력장에서 각운동량은 보존된다.

$$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$$

$$L_z = (\vec{r}\times\vec{p})_z = xp_y - yp_x$$

각운동량 연산자

$$[L_z] = [x][p_y] - [y][p_x] = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{8.20}$$

$$[L_x] = [y][p_z] - [z][p_y] = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$[L_y] = [z][p_x] - [x][p_z] = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

각운동량 연산자를 구면좌표로 표현한다.

구면 좌표를 직교 좌표로 변환시키는 식

$$z = r\cos\theta,\quad x = r\sin\theta\cos\phi,\quad y = r\sin\theta\sin\phi \tag{8.21}$$

역변환 식

$$r = (x^2+y^2+z^2)^{1/2}$$

$$\cos\theta = \frac{z}{r} = z(x^2+y^2+z^2)^{-1/2} \qquad (8.22)$$

$$\tan\phi = \frac{y}{x}$$

구면좌표 각운동량 연산자

연쇄법칙(chain rule)

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial z}\frac{\partial f}{\partial \phi}$$

좌변 : x,y,z 함수로 f를 표현, 우변 : f를 r,θ,ϕ로 표현

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{1}{2}(x^2+y^2+z^2)^{-1/2}(2z) = \frac{z}{r} = \cos\theta$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r}$$

☞ $$\left(\begin{array}{l} -\sin\theta\dfrac{\partial\theta}{\partial z} = z(-\dfrac{1}{2})(x^2+y^2+z^2)^{-3/2}(2z) + (x^2+y^2+z^2)^{-1/2} \\ -\sin\theta\dfrac{\partial\theta}{\partial z} = -\dfrac{(r\cos\theta)^2}{r^3} + \dfrac{1}{r} = \dfrac{1-\cos^2\theta}{r} = \dfrac{\sin^2\theta}{r} \end{array}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}$$

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi, \quad \frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}, \quad \frac{\partial\phi}{\partial x} = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi, \quad \frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}, \quad \frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

각운동량 연산자

$$[L_x] = i\hbar\left\{\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}$$

$$[L_y] = -i\hbar\left\{\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right\} \qquad (8.23)$$

$$[L_z] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

1) 각운동량에 대한 연산자의 구면좌표 형태는 좌표 r을 포함하지 않는다.

2) 중심력에 대해 자세히 알지 못하더라도 θ와 ϕ에 대한 파동함수의 의존성을 알 수 있다.

L_z는 선명히 관측된다. : 자기양자수

파동함수가 L_z의 고유함수↔L_z가 선명하게 관측

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\phi}=L_z\psi \qquad (8.24)$$

$$\psi(\vec{r})=C(r,\theta)e^{iL_z\phi/\hbar} \qquad (8.25)$$

ϕ의 주기성에 의해

$$\psi(\phi+2\pi)=\psi(\phi)$$

$$L_z=m_l\hbar \quad m_l : \text{integer}$$

각운동량의 두 개 이상의 성분을 동시에 선명히 관측할 수 있는 파동 함수는 존재하지 않는다.

L_x의 고유값 방정식

$$i\hbar\left\{\sin\phi\frac{\partial\psi}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\phi\frac{\partial\psi}{\partial\phi}\right\}=L_x\psi$$

θ와 ϕ의 모든 값에 대하여 성립. $\phi=0$일 때 위 식은

$$i\hbar\cot\theta\frac{\partial\psi}{\partial\phi}=L_x\psi$$

(8.25)에 의해

$$(-L_z\cot\theta)\psi=L_x\psi$$

위 식은 $L_x=L_z=0$이거나 ψ가 동시에 사라질 경우에만 모든 θ값에 대해서 만족한다.

▶각운동량이 정확히 영이 아닌 이상, 두 개 이상의 성분을 동시에 선명히 관측할 수 있는 파동 함수는 존재하지 않는다.

$|\vec{L}|$는 선명히 관측된다. : 궤도 양자 수

$$L^2=\vec{L}\cdot\vec{L}$$

L^2에 대한 연산자

$$[L]^2=[L_x]^2+[L_y]^2+[L_z]^2$$

$$[L^2]=-\hbar^2\left\{\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\csc^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\} \qquad (8.26)$$

L^2에 대한 고유값 방정식

$$-\hbar^2\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}+\csc^2\theta\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right\}=|\vec{L}|^2\psi$$

ψ의 ϕ 의존성에의해

$$-\hbar^2\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}-m_l^2\csc^2\theta\,\psi\right\}=|\vec{L}|^2\psi \qquad (8.27)$$

물리적으로 가능한 해는 $L=\sqrt{l(l+1)}\hbar$ 일 때

$l=0,1,2,\ldots,(n-1)$: 궤도 양자수

$|m_l|\le l$: 자기 양자수

$P_l^{m_l}(\cos\theta)$: (8.27)의 해. 버금 르장드르 다항식.

$$Y_l^{m_l}(\theta,\phi) = C\,P_l^{m_l}(\cos\theta)\exp(im_l\phi)$$: 구면 조화함수

E는 선명히 관측된다: 지름 파동 방정식

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-i\omega t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U(\vec{r})\psi = E\psi \qquad (8.28)$$

$$[K] = \frac{\{[p_x]^2 + [p_y]^2 + [p_z]^2\}}{2m}$$

$$= \frac{(\hbar/i)^2\{(\partial/\partial x)^2 + (\partial/\partial y)^2 + (\partial/\partial z)^2\}}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

$[K]$를 구면좌표 형태로 나타내면

$$[K] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \csc^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\right\}$$

위 연산자는 두 개의 항으로 나눌 수 있다.

$$[K] = [K_{\rm rad}] + [K_{\rm orb}] = [K_{\rm rad}] + \frac{1}{2mr^2}[L^2] \qquad (8.29)$$

$$[K_{\rm rad}] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right\} \qquad (8.30)$$

운동의 지름성분(동경성분)과 궤도성분이 분리되어 운동 에너지에 기여한다.

물리적으로 가능한 해

$$|\vec{L}|^2 = l(l+1)\hbar^2$$

(8.28)은

$$[K_{\rm rad}]\psi(\vec{r}) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\psi(\vec{r}) + U(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad (8.31)$$

위 방정식은 r에 대한 연산만을 하고 있다.

$$\psi(\vec{r}) = R(r)\,Y_l^{m_l}(\theta,\phi) \qquad (8.32)$$

지름파동함수 : $R(r)$

8.5 수소원자와 수소꼴 이온

H(hydrogen) : 전자$(m, -e)$가 핵$(M, +Ze)$에 구속되어 있다.

He^+, Li^{2+} : hydrogen-like ion

$M \gg m$

핵은 전자의 운동에 의해 움직이지 않고 근사적으로 정지해 있다고 가정한다.

$$U = \frac{k(+Ze)(-e)}{r} = -\frac{kZe^2}{r} \qquad (8.33)$$

☞ $k = \dfrac{1}{4\pi\epsilon_0}$: Coulomb 상수

중심력 에 대한 정상상태(얌전한 해)의 파동함수

$$\Psi(r,\theta,\phi,t) = R(r)\,Y_l^{m_l}(\theta,\phi)e^{-i\omega t} \qquad (8.34)$$

→수소원자에 대한 정상상태의 파동함수

$Y_l^{m_l}(\theta,\phi)$: spherical harmonics(구 조화함수)

$R(r)$: radial wave function(지름 파동함수)

지름 파동함수는 (8.17)로부터 구한다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2R}{dr^2}+\left(\frac{2}{r}\right)\frac{dR}{dr}\right]+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}R(r)+U(r)R(r)=ER(r) \tag{8.17}$$

중심력장에서의 입자의 에너지

$$E=\frac{p^2}{2m}+U(r)$$

$$p^2=p_r^2+p_\perp^2=p_r^2+\frac{L^2}{r^2}$$

☞ $L=mv_\perp r=p_\perp r$

$$E=\frac{p_r^2}{2m}+\frac{L^2}{2mr^2}+U(r)$$

(8.17)의 두 번째 항은

$$K_{orb}=\frac{m}{2}\left(\frac{|\vec{L}|}{mr}\right)^2=\frac{|\vec{L}|^2}{2mr^2} \tag{8.35}$$

☞ →궤도운동에 의한 운동에너지

(8.17)의 첫 번째 항은

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2R}{dr^2}+\left(\frac{2}{r}\right)\frac{dR}{dr}\right]$$

☞ →핵을 향하거나 핵으로부터 멀어지는 전자의 운동에너지

$$\frac{d^2(rR)}{dr^2}=r\left[\frac{d^2R}{dr^2}+\left(\frac{2}{r}\right)\frac{dR}{dr}\right]$$

$g(r)=rR(r)$: 준 파동함수(pseudo-wave function)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{d^2g}{dr^2}+U_{eff}(r)g(r)=Eg(r) \tag{8.36}$$

$$U_{eff}=\frac{|\vec{L}|^2}{2mr^2}+U(r)=\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}+U(r) \tag{8.37}$$

☞ 유효 퍼텐셜 에너지

수소원자(hydrogen atom)

$U(r)=-\frac{kZe^2}{r}$: 수소원자의 퍼텐셜 에너지

해를 구하는 것은 생략

🌼 Energy의 양자화 : 얌전한 해가 가지는 에너지, 허용되는 에너지

$$E_n=-\frac{ke^2}{2a_0}\left\{\frac{Z^2}{n^2}\right\} \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{8.38}$$

$a_0=\frac{\hbar^2}{m_eke^2}=0.529\,\text{Å}$: Bohr의 반지름

$E_0=-\frac{ke^2}{2a_0}=-13.6\text{ eV}$: 수소원자 바닥상태의 에너지

→수소원자의 이온화 에너지 = 13.6eV

🌼 ▶수소 원자에 대한 양자수

n : 주양자수(principal quantum number)

$l=0,1,2,\cdots,(n-1)$: 궤도 양자수(orbital quantum number)

$m_l=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l$: 자기 양자수(magnetic quantum number)

표 8.4 $n=1,2,3$**에 대한 수소꼴 원자의 지름파동함수** $R_{n,l}(r)$

n	l	$R(r)$
1	0	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}$
2	0	$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$
2	1	$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{\sqrt{3}\,a_0}e^{-Zr/2a_0}$
3	0	$\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}2\left[1-\frac{2Zr}{3a_0}+\frac{2}{27}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right]e^{-Zr/3a_0}$
3	1	$\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\frac{4\sqrt{2}}{3}\frac{Zr}{a_0}\left(1-\frac{Zr}{6a_0}\right)e^{-Zr/3a_0}$
3	2	$\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$

표 8.5 원자껍질 및 버금껍질에 대한 분광학적 기호

n	Shell Symbol	l	Subshell Symbol
1	K	1	s
2	L	2	p
3	M	3	d
4	N	4	f
5	O	5	g
6	P	6	h
…		…	

수소원자

$$\begin{array}{ccc} n & l & m_l \\ \Updownarrow & \Updownarrow & \Updownarrow \\ E & |\vec{L}| & l_z \end{array}$$

수소원자의 E는 l이나 m_l에 상관이 없다.

→그러나 무거운 원자에는 성립하지 않는다.

광학전이(optical transition)

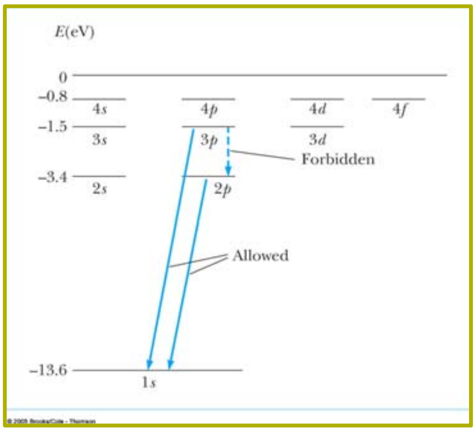
각운동량의 보존(원자+광자)을 만족시키는 선택률이 존재

$$|l_f - l_i| = 1 \quad \text{or} \quad \Delta l = \pm l \qquad (8.40)$$

→선택규칙(selection rule)

$(3p,\ 2p) \rightarrow 1s$: 허용

$3p \rightarrow 2p$ $(\Delta l = 0)$: 금지



예제 8.7 수소의 n=2 준위

n=2의 수소원자의 상태

(풀이)

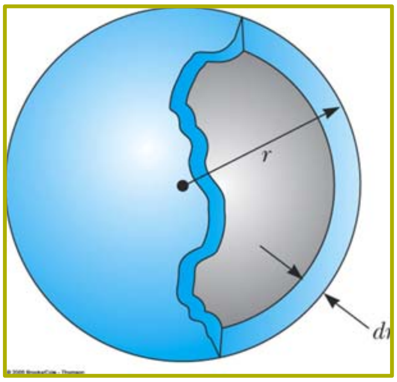
$2s$	$n=2,$	$l=0,$	$m_l=0$
$2p$	$n=2,$	$l=1,$	$m_l=-1$
		$l=1,$	$m_l=\ \ 0$
		$l=1,$	$m_l=+1$

$E=-(13.6\mathrm{eV})(1^2/2^2)=-3.4\mathrm{eV}$

연습문제 3 n=3, n=4인 수소의 경우 가능한 상태의 수는 몇 개인가?

수소유사 원자-바닥상태(hydrogenic atoms - ground state)

$Z,\ n=1,\ l=0,\ m_l=0$: 하나의 전자를 가진 원자 혹은 이온의 바닥상태



$$E_1=-(13.6\mathrm{eV})Z^2 \qquad (8.41)$$

♣ 1 eV 의 의미는?

$$\psi_{1,0,0}=R_{1,0}(r)Y_0^0=\pi^{-1/2}(Z/a_0)^{3/2}e^{-Zr/a_0} \qquad (8.42)$$

☞ 1. θ에 무관

☞ 2. s-상태파($l=0$)는 구 대칭

단위 체적당의 확률

$$|\psi_{1,0,0}|^2=\frac{Z^3}{\pi a_0^3}e^{-2Zr/a_0}$$

지름확률분포(radial probability distribution)

$P(r)dr$: $r\sim r+dr$ 인 구 껍질에서 전자를 발견할 확률

$$P(r)dr=|\psi|^2 4\pi r^2 dr$$

$$P_{1s}(r)=\frac{4Z^3}{a_0^3}r^2e^{-2Zr/a_0} \qquad (8.43)$$

$$P(r)=|g(r)|^2=r^2|R(r)|^2 \qquad (844)$$

지름확률분포

1s 상태의 지름분포함수와 구형 전자구름

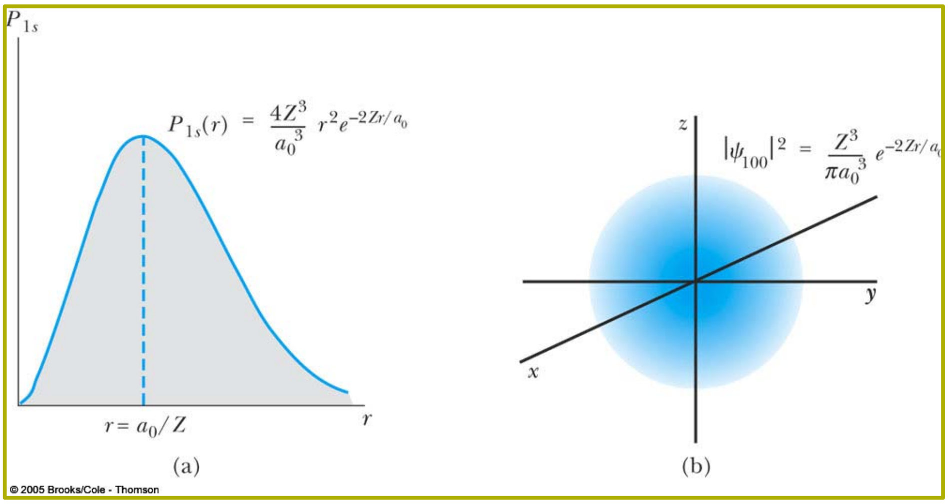


그림 8.10 수소꼴 원자의 1s 상태에서 지름분포함수와 구형 전자구름

규격화 조건

$$1=\int_0^\infty P(r)dr \qquad (8.45)$$

$$<r>=\int_0^\infty rP(r)dr \qquad (8.46)$$

☞ 핵과 전자사이의 평균거리

$$<f>=\int_0^\infty f(r)P(r)dr \qquad (8.47)$$

임의의 거리함수 f의 평균은 규격화된 확률분포를 가중치로 적분한 값이다.

예제 8.8 수소내의 전자의 확률

수소의 바닥상태에 있는 전자가 첫 번째 Bohr 반경 밖에서 발견될 확률을 구하라.

(풀이)

$$P=\int_{a_0}^\infty P_{1s}(r)dr$$

$$=\frac{4}{a_0^3}\int_{a_0}^\infty r^2e^{-2r/a_0}dr$$

변수변환 $z=\frac{2r}{a_0}$: 차원이 없는 변수로 변환하면

$r=a_0$ 이면 $z=2$ 그리고 $dr=\frac{a_0}{2}dz$ 이므로

$$P=\frac{1}{2}\int_2^\infty z^2e^{-z}dz=-\frac{1}{2}(z^2+2z+2)e^{-z}\Big|_2^\infty$$

$$=5e^{-2}\fallingdotseq 0.677$$

예제 8.9 수소에서의 전자-양성자 간격

수소의 바닥상태에서 전자가 가장 높은 확률로 위치해 있는 핵으로부터의 거리를 계산하고 이를 평균거리와 비교하여라.

(풀이)

$\frac{dP}{dr}=0$인 r : 확률이 가장 높은 핵으로부터의 거리

$$0=\left(\frac{4}{a_0^3}\right)\frac{d}{dr}(r^2e^{-2r/a_0})$$

$$=\left(\frac{4}{a_0^3}\right)e^{-2r/a_0}\left\{-\frac{2r^2}{a_0}+2r\right\}$$

$r=0,\quad r=a_0$ 에서 $\frac{dP}{dr}=0$

$\therefore r=a_0$: 최대 확률 지점

평균거리

$$<r>=\int_0^\infty rP(r)dr$$

$$=\frac{4}{a_0^3}\int_0^\infty r^3e^{-2r/a_0}dr$$

$z=2r/a_0$ 로 변환하여

$$<r>=\frac{a_0}{4}\int_0^\infty z^ne^{-z}dz$$

$$\int_0^{\infty} z^n e^{-z} dz = n!$$

$$\therefore < r > = \frac{a_0}{4}(3!) = \frac{3}{2}a_0$$

평균 거리와 가장 확률이 높은 거리는 같지 않다.

수소꼴 원자의 들뜬 상태(Hydrogenic Atoms-Excited State)

첫 번째 들뜬 준위

$\psi_{2,0,0}\ \psi_{2,1,0}\ \psi_{2,1,1}\ \psi_{2,1,-1}$: 4-fold degenerate(4중 축퇴)

$$E_2 = -(13.6\text{eV})\frac{Z^2}{2^2}$$

1) $\psi_{2,0,0}$: 구대칭 분포, 2s상태

☞ $P(r)$: 2 개의 peak

☞ $\sim \frac{5a_0}{Z}$: 가장 확률이 큰 거리

☞ 1s상태보다 핵으로부터 훨씬 먼 거리에 위치

2) $\psi_{2,1,0}\ \psi_{2,1,1}\ \psi_{2,1,-1}$: 2p의 부껍질

☞ 구대칭이 아니다

☞ θ와 ϕ의 의존성이 다르다.

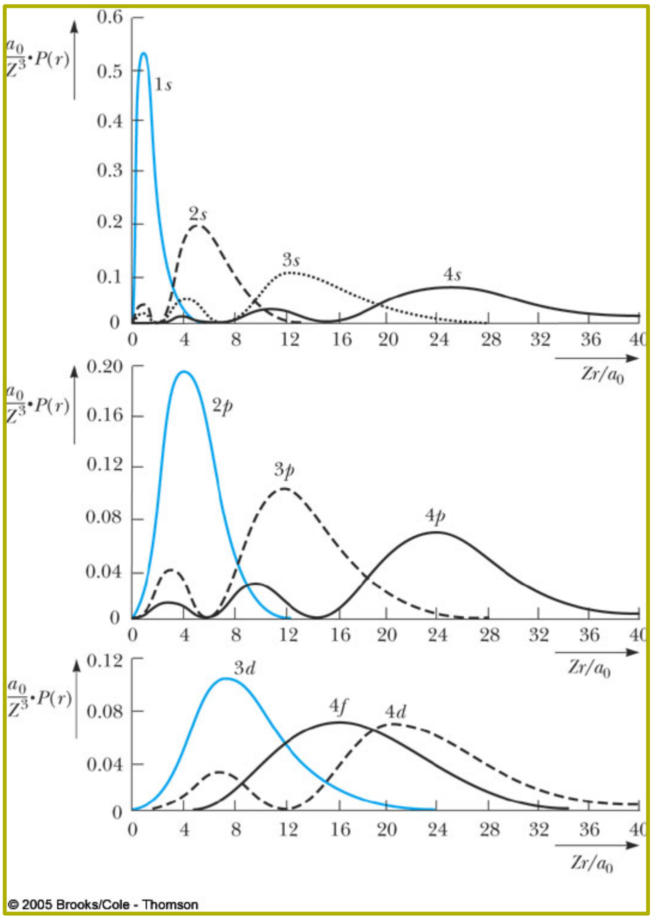


그림8.11 수소꼴 원자의 여러 상태에 대한 지름확률밀도

$$\psi_{2,1,1} = R_{2,1}(r)\,Y_1^1 = \pi^{-1/2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{8a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}\sin\theta\ e^{i\phi} \qquad (8.48)$$

☞ $|\psi_{2,1,1}|^2$는 ϕ에 무관하고 z축에 대칭 ; 그림 8.12

☞ 모든 수소원자의 파동함수 ψ_{n,l,m_l}도 마찬가지

☞ $|e^{im_l\phi}|^2 = 1$; z-축에 대해 대칭

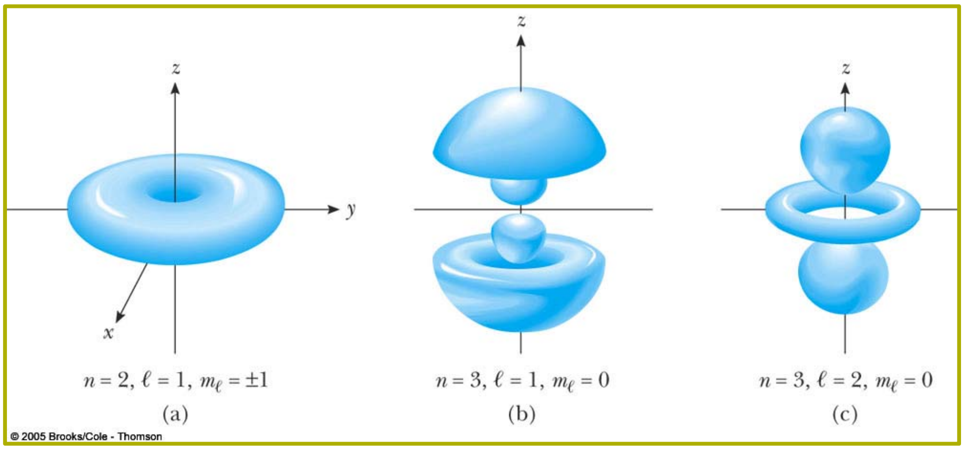


그림 8.12 $(a)\,|\psi_{2,1,\pm1}|^2$ $(b)\,|\psi_{3,1,0}|^2$ $(c)\,|\psi_{3,2,0}|^2$

$$\psi_{2,1,1} = R_{2,1}(r)\,Y_1^1 = \pi^{-1/2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{8a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}\sin\theta e^{i\phi} \tag{8.48}$$

$$\psi_{2,1,0} = R_{2,1}(r)\,Y_1^0 = \pi^{-1/2}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{2a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}\cos\theta \tag{8.49}$$

$|\psi_{2,1,0}|^2$ **은 Z-축상에 확률을 가져 뚜렷한 방향성을 가진다.(그림8.13),** $2p_Z$

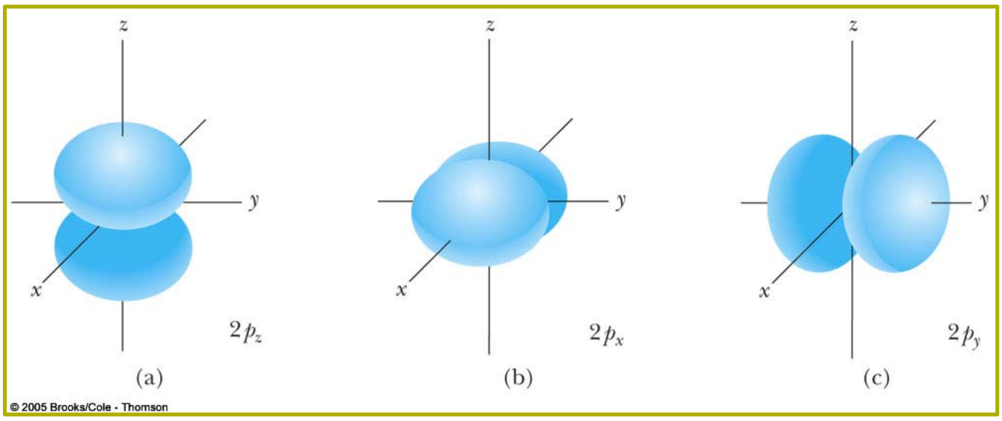


그림 8.13 (a)$n=2,\ l=1,\ m_l=0$ **양자상태의 전자의 확률분포**$(a)[\psi_{2p}]_z$ $(b)[\psi_{2p}]_x$ $(c)[\psi_{2p}]_y$

$$\begin{aligned}[\psi_{2p}]_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_{2,1,1}+\psi_{2,1,-1}\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\pi^{-1/2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{8a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}\sin\theta(e^{i\phi}+e^{-i\phi}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\pi^{-1/2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{8a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}\sin\theta(2\cos\phi)\end{aligned} \tag{8.50a}$$

$$\begin{aligned}[\psi_{2p}]_y &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_{2,1,1}-\psi_{2,1,-1}\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\pi^{-1/2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{8a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}\sin\theta(e^{i\phi}-e^{-i\phi}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\pi^{-1/2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{8a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}\sin\theta(2i\sin\phi)\end{aligned} \tag{8.50b}$$

☞ 높은 방향성을 가지는 파동함수 : 화학결합, 분자의 형성, 및 화학적 성질 등에서 중요한 역할

두 번째 들뜬 상태 ; E_3

$3s, 3p, 3d$ 부 껍질에 각각 1개, 3개, 5개의 상태가 존재
지름함수 부분의 마디(node) 수가 증가해서 두 번째 껍질의 경우보다 더 복잡해진다.

n 번째 껍질이 가지는 에너지는

$$E_n = -(13.6\mathrm{eV})\frac{Z^2}{n^2}$$

n개 $(l = 0, 1, 2, \cdots, n-1)$의 부껍질
l 번째의 부껍질에는 $2l+1$ 개의 궤도
n^2 개의 상태가 존재한다. (spin을 고려하면 2배를 해야한다)

8.6 반수소(antihydrogen)

반입자(antiparticle)

반전자(anti-electron, 양전자) 1932년 Carl Anderson이 발견
반양성자(anti-proton) 1955sus 발견

반원자

반수소(antihydrogen) : 반양성자에 전기적으로 속박된 양전자.

Na^{22}의 방사성 붕괴로 양전자의 생성 + Be의 표적에 양성자를 충돌시켜 반양성자를 생성 → 급속한 감속으로 반수소의 생성 (CERN;150만개의 반양성자 중 50,000개의 반수소 원자의 생성)

반수소의 검출 : 붕괴 과정에서 생성되는 입자(파이온)을 검출함으로서 확인된다.

쌍소멸(pair annihilation) : 서너 개의 파이온을 생성

http://k.daum.net/qna/openknowledge/view.html?qid=2byap

PET의 원리와 응용 스크랩 0
추천 0 | 조회 1254 카페로 스크랩
블로그로 스크랩
메일로 스크랩
개요

PET(Positron Emission Tomography , 양전자방사단층촬영법)은 방사능의 존재위치를 측정하는 핵의학 검사법의 하나이다. X선 CT가 방사선원을 피검체(인체)의 외부에 두고 방사선의 투과를 측정하는 것에 비해, 핵의학 검사법에서는 방사성약제의 투여에 의하여 인체내부의 특정 장기에 분포한 방사성동위원소의 위치를 체외에서 방출되는 방사선에 의해 측정한다. PET는 양전자(포지트론)를 방출하는 방사성동위원소로 표지된 방사성약제를 방사선원으로 하고 있다. 양전자는 가까이 있는 전자와 결합해서 소멸하며, 대신에 투과력이 강한 감마선이 두 줄 그 장소로부터 서로 반대되는 방향으로 튀어나간다. 이 한 쌍의 방사선을 인체주위에 배치한 검출기로 동시에 계수할 수 있기 때문에 방사선원이 있었던 방향과 위치를 알 수 있다. PET는 동시에 계수한 데이터로부터 X선 CT와 유사한 계산에 의하여 방사선원의 체내 집적도를 3차원적으로 재구성하는 기술이다. 양전자방출 방사성약제로서는 물이나 포도당, 아미노산 등 다수가 있다. 이것들을 체내에 극미량 투여하고, PET장치에 의한 방사능을 측정하면 체내의 국소방사능이 변화하는 모양을 관찰할 수 있으며, 뇌와 심장 등 장기의 기능을 평가할 수 있기 때문에 암을 조기에 발견할 수 있는 등의 특징이 있다.

본문

1. PET의 원리
(1) 역사적 배경
양전자방출 방사성약제를 인체에 투여하고, 그것의 체내 분포를 측정하는 시도는 1950년대에 시작됐으며, 단층상으로 재구성하기 위한 노력이 1960년대부터 시작되어 왔다. 그러나 핵의학검사에 따르는 복잡성 때문에 화상재구성법의 진보에는 시간이 걸렸으며, X선 진단쪽이 먼저 단층촬영법을 개발하였으며, 1972년에는 X선 CT장치로서 임상에 이용됐다. X선 CT기술에서 생겨난 화상재구성법을 도입해서, 1975년에 PET장치가 처음으로 개발되어 핵의학검사에 사용할 수 있게 되었다. 그러나 단지 X선 CT기술을 전용하는 것만으로는 PET가 가지는 잠재적 능력을 충분히 끌어낼 수는 없었다. 1980년대 후반부터는 화상의 정량성을 높여 화질을 향상시키기 위해 PET가 가지는 본래의 특징을 활용하는 독자적 화상재구성법 및 장치의 연구개발이 추진되었다.
(2) 양전자방출 방사성동위원소
양전자방출 방사성동위원소인 F-18, O-15, C-11, N-13은 양성자와 중양자를 10MeV～20 MeV로 가속하는 소형 사이클로트론으로 제조한다. 불소, 산소, 탄소, 질소 등은 생체를 구성하는 원소이며, 생체활성물질 등에 표지하는 일이 용이하다. 이들은 수분에서 수

시간만에 붕괴하는 단수명의 방사성동위원소이기 때문에 방사성약제를 단시간에 제조하는 자동합성장치가 필요하다. 표-1에 주요 양전자방출 방사성동위원소와 그 반감기 및 방사성약제를 보여 준다.

(3) 소멸방사선

양전자는 체내에서 곧바로 정지해 버려 직접 검출하는 일은 어렵지만 가까이 있는 전자와 결합해서 소멸할 때에, 전자의 정지질량분의 에너지(511 keV)에 상당하는 극히 짧은 파장(2.43 pm)의 전자파(광자)를 두 개 방출한다. 에너지가 큰 이 광자는 소멸방사선이라고 불려지며, 양전자 소멸 뒤 서로 반대방향(180도)으로 날아가 버리기 때문에 서로 마주보는 두 개의 감마선검출기(NaI(Tl), $Bi_4Ge_3O_{12}$(BGO), Lu_2SiO_5(LSO) 등을 신틸레이터로 한다)에 의해 한 쌍의 소멸방사선을 동시에 검출하면 소멸한 양전자는 감마선검출기를 연결하는 선(동시계수선)상에 있었다는 것을 동정(同定)할 수 있다. X선 진단에서 보통 사용되는 광자와 비교해서 소멸방사선의 에너지는 5～10배 높기 때문에 투과력이 크다. 예를 들면 체표면으로부터 14 cm의 깊이에 선원이 있는 경우에 흡수도 산란도 되지 않고 몸으로부터 직진해서 검출기를 향하는 광자의 비율은 진단용 X선에서는 약 4 %로 낮은데 비해 소멸방사선에서는 25 %로 높다. 다만 검출하는 측에서 보면 투과력이 높은 광자일수록 고감도검출기를 실현하는 일은 어렵게 된다.

(4) X선 CT와 다른 방사선측정의 조건

에너지 이외에 X선 진단과 PET검사가 본질적으로 다른 첫째 점은 구하고자 하는 미지량의 수에 나타난다. X선 CT는 투과한 X선량의 비율에서 체내흡수계수의 분포를 그려내는 것으로 미지량은 한 종류이다 (그림-1A). 한편 PET에서는 체내방사능농도분포와 흡수계수분포의 두 종류가 된다 (그림-1B). 서로 다른 두 번째 점은 방사선조사의 방향이 제어가능한가의 여부이다. X선 진단에서는 선원을 생체의 외부로부터 조사하고 맞은편 위치에 검출기를 배치하는데, PET검사에서는 방사성약제를 생체에 투여하기 때문에 방사선원이 생체내에 있으며, 방사선이 방출되는 방향을 제어할 수는 없다. 서로 다른 세 번째 점은 전류계측인지 펄스계측인지의 차이이다. PET에서는 동시계수를 해야 할 필요 때문에 소멸방사선을 펄스계측한다. 한 쌍의 검출기로부터 출력하는 두 개의 펄스신호가 어느 시간폭내에 도달했다는 것으로 동시계수가 이루어지는데, 독립된 양전자 소멸현상에 의한 신호가 우연히 그 시간폭 안에 날아 들어올 가능성이 있다(그림-2). 이것은 우발동시계수라고 불려지며, 진짜 동시계수에 노이즈로서 추가된다. 우발동시계수를 저감하기 위해 검출기에 높은 시간분해능을 가지도록 하는 것이 요구된다. 시간분해능 및 검출효율이 높은 검출기를 실현하기 위해 PET용 검출기는 특유의 발전을 이룩해 왔다.

PET가 펄스계측을 바탕으로 하고 있기 때문에 계측데이터 자체에 확률적 요소가 내재해 있으며, 그 통계노이즈에 PET화상이 좌우된다는 점도 PET의 큰 특징이다. 최근에는 X선 CT와는 다른 방사선측정 조건을 고려한 PET 특유의 화상재구성법이 개발되었기 때문에 재구성화상의 질이 향상되어 왔다.

(5) SPECT와의 차이

핵의학검사에 널리 이용되는 방사성동위원소 Tc-99m 등은 단일감마선을 방출하기 때문에 그 방향을 알기 위해서는 감마선검출기의 앞에 콜리메이터를 설치한다. 이것을 인체에 따라 주사(走査)하여 방사성동위원소의 체내분포를 재구성하는 것이 SPECT(Single Photon Emission Computed Tomography, 단일광자방사 단층촬영법)이다 (그림-1C). SPECT에서는 감도와 해상도를 동시에 향상시키는 일은 곤란하다. 예를 들면 콜리메이터의 구멍을 작게 하면 해상도는 향상되지만 감도는 저하된다. 한편 PET에서는 동시계수

법이라는 전기적인 콜리메이터의 채용으로 기하학적인 콜리메이터를 사용하는 SPECT에 비해 해상도가 높고 대폭적으로 감도를 높일 수가 있다. 감도와 해상도를 함께 향상시킬 수 있다는 것은 PET가 가지는 우수한 점의 하나이다.

동시계수가 손상되는 흡수보정인자는 그림-3에서 보여 주는 바와 같이 체내에서의 점 S에서 발생한 한 쌍의 소멸방사선이 검출기 쌍 A, B에서 검출되는 각각의 흡수보정인자를 곱한 것으로 표시되기 때문에, 선원의 위치에 의존하지 않고 검출기 사이의 예상하는 흡수체의 조성, 형상만으로 결정된다. 이 때문에 PET 같으면 외부선원에 의하여 X선 CT와 같은 원리로 흡수보정인자를 바르게 측정할 수 있으나, 동시계수를 하지 않는 SPECT에서는 불가능하다. 두 종류의 미지량 가운데 흡수계수분포만을 따로 떼어 측정할 수 있기 때문에 흡수를 받지 않는 방사능의 투영데이터가 산출가능하며, 화상재구성 문제를 방사능농도분포라는 한 종류의 미지량에 관한 문제로서 처리할 수 있다. 그림-4에 일반적인 PET화상재구성처리 절차의 개략을 보여 준다. 투영데이터를 보정하기 위해 보통은 방사데이터뿐만 아니라 피검사체가 없는 공데이터 및 외부선원에 의한 투과데이터를 별도 수집한다. 전처리가 끝난 투영데이터를 바탕으로 화상재구성을 한다.

(6) 2D모드 PET

2D모드 PET란 X선 CT의 방법을 적용한 방법이며, 체축에 직교하는 방사선만을 검출하여 슬라이스화상을 얻는 평면계측법이다(그림-5A). 몸을 둘러싸는 다각형 또는 원형을 따라 검출기를 조밀하게 배열한 검출기링이 일반적으로 사용된다. 검출기링내의 검출소자간에 동시계수데이터를 수집하여 투영데이터의 계수를 얻는다. 검출기링을 다층으로 포개는 것으로 동시에 연속된 슬라이스의 투영데이터가 얻어지기 때문에 슬라이스마다에 2차원 화상재구성을 해서 3차원 재구성화상을 얻을 수가 있다. 다만 체축과 직교하지 않는 대부분(99 % 이상)의 방사선이 검출되지 않는다는 점은 다층 검출기링에서도 마찬가지이다. 검출기링 사이에 원환상(圓環狀)의 납판(셉터)을 삽입하는 이유는 각 슬라이스마다에 선원의 검출영역을 제한해서 우발동시계수를 저감시키기 위한 것이다.

(7) 3D모드 PET

3D모드 PET란 어떤 방향의 방사선이라도 검출하도록 하겠다는 PET독자의 입체계측법이다(그림-5B). PET의 원리로 되돌아가 X선 CT방법과는 다른 3차원화상재구성법이 연구개발되었기 때문에 이용가능하게 되었다. 데이터수집과 처리법 등에 극복해야 할 새로운 문제들이 있지만 서서히 해결되어 가고 있다. 원리적으로는 2D모드의 100배의 감도를 달성할 수 있지만 기술적으로 미해결점이 몇 가지 있기 때문에 현재는 2D모드의 7배 정도의 감도까지만 실용화되어 있다. 또 3D모드의 처리기술은 발전도상에 있으며, 입체계측형 PET는 완성된 것이 아니다. 그러나 기본이 되는 개념과 이론의 구성은 거의 확립되었다고 현재는 생각할 수 있다. 입체계측형 PET의 화상재구성은 2차원의 단순한 확장이 아니고, 화상재구성이 가능한 알고리즘도 유일한 것은 아니다. 현재의 입체계측형 PET는 화상재구성에서는 자질구레한 입체계측데이터의 계수를 모두 활용하면서 평행한 다단층 투영데이터로 옮겨 정리하고, 다음에 차츰 근사형 화상재구성법을 각층마다 적용하는 방법이 사용되고 있다. 이 방법에 의하여 계산의 고도화와 동시에 화상노이즈의 억제를 도모한다.

(8) 차세대 PET

차세대 입체계측형 PET는 소멸방사선을 3차원 방사선위치검출기를 이용하여 동시계수함으로써 종래의 2차원방사선위치검출기를 이용한 PET에 비해 해상도와 감도를 대폭으로 향상시키는 일이 가능하게 될 것이다(그림-6). 감도와 해상도를 동시에 향상시킬 수 있다

는 것은 PET가 본래 가지고 있는 장점이지만 아직 충분히 활용되고 있는 것은 아니었다. 보통의 PET장치에서는 511 keV라는 비교적 높은 에너지의 소멸방사선을 빠짐없이 검출하기 위해 체축을 중심으로 한 원통표면에 검출소자를 조밀하게 배열한다. 이와 같은 검출기계통에서는 감도를 손상하는 일 없이 해상도를 높이기 위해서는 검출소자의 두께를 30 mm 정도로 유지하면서 폭을 4 mm 이하로 좁힐 필요가 있다. 그러나 3D모드에서는 검출소자를 비스듬하게 들어오는 방사선을 검출하기 위해 검출소자의 두께에 따라 해상도가 저하한다. 그 정도는 입체계측을 넓힐수록 크게 되기 때문에 감도를 향상시킬수록 해상도가 저하한다. 이 문제를 극복하기 위해서는 검출소자의 깊이 방향의 어느 지점에서 방사선이 흡수되었는가를 판별하는 일이 필요하다. 차세대 PET장치는 이 요청에 부응한 것으로서 고해상도와 고감도가 다같이 달성가능하게 된다.

2. 해상도와 감도

실제로는 동시계수한 검출기를 연결하는 선상에 양전자방출 방사성동위원소가 존재하는 것은 아니다. 양전자의 비정과 소멸방사선의 각도요동이 그 원인이다 (그림-7). 양전자가 방사성동위원소로부터 방출되어 정지할 때까지의 거리를 비정이라 한다. 또 양전자가 정지한 장소에서 원자의 궤도전자와 결합해서 생성하는 한 쌍의 소멸방사선은 궤도전자가 가지고 있던 운동에너지 때문에 완전한 반대방향으로의 비행이 되지 않고 180도보다 벗어난다. 이것을 쌍소멸방사선의 각도요동이라고 한다. PET화상의 해상도는 이 양전자의 비정과 쌍소멸방사선의 각도요동 때문에 1 mm보다 작게 한다는 것은 곤란하며 특히 검출기간 거리가 크면 각도요동의 영향은 그 거리에 비례해서 크게 된다. 작은 동물용 PET장치에서는 2 mm 이하의 해상도도 가능하지만 현재의 임상용 PET장치에서는 5 mm의 해상도가 일반적이다. 해상도가 향상되어도 통계노이즈가 크기 때문에 결국은 화면의 평활화(平滑化)를 하게 된다. 보다 더 한층 감도의 향상이 요망되고 있는 이유의 일단이 여기에 있다.

물질량 1몰당의 방사능을 비방사능(Bq/mol)이라고 부른다. 예를 들면 C-11의 경우 반감기가 20.4분이니까 3.41×1020(Bq/mol)이다. 거꾸로 이 값에서 C-11에 관한 10,000Bq의 방사능은 2.93×10-17몰의 분자량에 상당하며, 방사능측정에 의하여 물질량을 알 수 있다. C-11이 방출하는 소멸방사선을 체외로부터 검출하는 비율이 가령 1000분의 1이라고 가정해 보자. 이 경우에도 1 피코몰(11pg)의 물질량만으로 1초간에 3.41×105카운트(34.1만 카운트/초)의 계수를 얻기 때문에 매우 감도가 높은 계측법이라는 것을 알 수 있다.

3. PET의 응용

피의 흐름이나 에너지대사는 세포의 활동이 왕성한 부위에서 높고, 쇠퇴해 있는 부위에서는 낮게 된다. 방사성인 O-15와 물, 포도당의 유사체인 방사성의 F-18플로로 디옥시글루코스(FDG) 등을 투여해서 PET 검사를 하면 산소와 포도당의 국소적인 대사활성을 화상으로 볼 수가 있다. (그림-8). 이와 같이 뇌와 심장 등의 국소기능을 PET화상으로 관찰해서 정상화상과 비교하면 질환에 따르는 이상을 찾아볼 수가 있다. 특히 암세포는 정상세포보다 왕성하게 분열을 일으켜 포도당대사가 왕성하기 때문에 FDG는 암의 병소에 많이 집적하고, 따라서 암의 부위를 알 수 있을 뿐만 아니라 병소의 크기와 진행정도 등을 알 수 있어 치료법을 결정하거나 치료효과의 판정에 위력을 발휘한다. 또 양전자방출 방사성원소로 신경전달물질의 유사체 등에 표지를 해서 투여하면 신경수용체의 상태 등도 볼 수 있다(그림-9). 최근 분자이미징이라고 하며 DNA, 단백질 등 분자의 변화에서 세포레벨에서의 이상을 조직장기레벨에서의 이상에 앞서서 조기에 검출하기 위해 PET검

사를 활용하는 연구가 예방의학의 관점에서 추진되고 있다. 1999년 현재 일본의 PET시설은 30개소에 달하며, 미국 다음가는 시설수를 가지고 있다.

4. PET에 의한 피폭선량

PET검사에서는 양전자방출 방사성동위원소를 표지한 약제를 정맥주사 또는 호흡에 의해 체내로 흡입하기 때문에 소량이긴 하지만 피폭이 있다. 예를 들면 1회의 FDG투여에 의한 2D모드 PET검사에서는 2.2 mSv 정도이며, X선 CT와 비교하면 낮은 피폭선량이다. 피폭선량은 3D모드 PET와 같이 고감도로 됨에 따라 더욱더 저감화하는 경향에 있다. 특히 암의 전이를 검사하는 등의 전신 PET검사는 외부로부터 조사하는 X선 CT와는 달리 피폭선량이 증가하는 일은 없으므로 그 이점을 최대한으로 살릴 수 있는 검사라고 할 수 있다.

출처 : 원자력 백과사전