16. 빛의세기해석

화공과 김영훈 교수

korea1@kw.ac.kr

보어의 빛의 세기 해석

- 고전론
  - 빛의 세기는 |진폭|^{2}에 비례
- (보어)양자론
  - 파동이 아니므로, 진폭 구하지 못함
  - I는 전이횟수에 비례, 많이 전이할 수록 세기 증가
  - 전이 기작은 모르나, 전이확률에 비례할 것임
- 대응원리 이용
  - n이 클때, QM의 CM화
  - I=전이확률=|어떤양|^2

전자위치에 관한 파동의 합

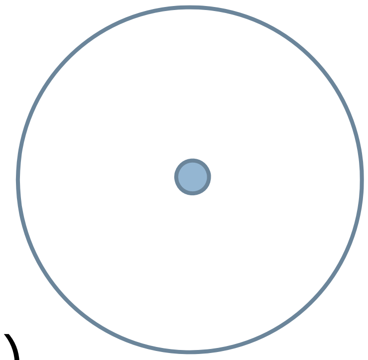
- QM의 CM화 이용
  - 전자의 위치, $q = \sum Q(n,\tau) e^{i2\pi\nu(n,\tau)t}$
    - Euler function: $e^{ix} = \cos x + i \sin x$
  - 고전론(연속)+양자조건(불연속)=양자론(불연속)

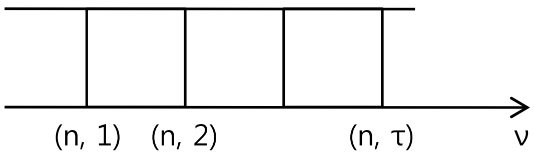
$$F = mq'' = m\frac{d^2 q}{dt^2} \qquad \oint p\,dq = nh$$

- 양자론의 퓨리에 방정식
  - 전이성분, $q = \sum Q(n, n-\tau) e^{i2\pi\nu(n,n-\tau)t}$
  - 전자의 위치 성분인가?

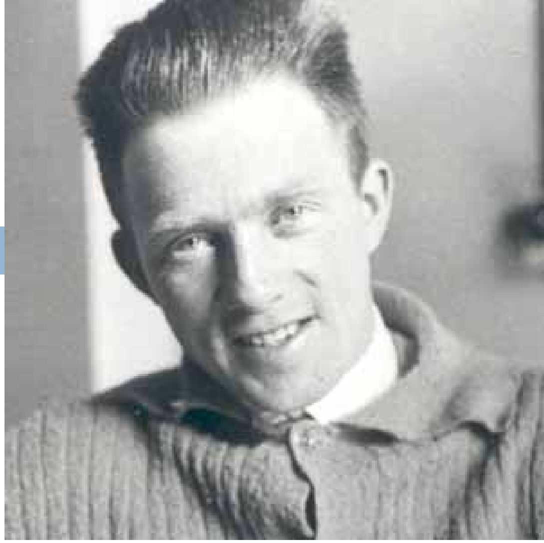
대응원리: n이 클때

- 대응원리에 의한 CM화
  - 큰 n 궤도에서, 최외각 전자 회전
  - → 전자 회전하면서 빛 방출하는 것처럼 보임 (13.2 eV)
- n이 작을 때는?
  - 대응원리로 빛 세기 해석 불가능
- 보어 해석의 문제점
  - 전자전이 과정 설명 불가(순간이동?)
  - 스펙트럼 강도 설명 불가





하이젠베르그의 등장



- Wemer Heisenberg
  - n 작을 때의 스펙트럼 세기 연구
  - 악성 건초열병으로 Heligoland 섬에서 2주 요양
  - 추후, 불확실성의 원리 도출
- I=|Q|²=|(전이횟수)x(광자에너지, hν)|
- 조화진동에 대한 풀이법
  - 뉴턴 운동방정식 + 전자위치 함수 → 적분

$$\frac{d^2q}{dt^2}+\frac{k}{m}q=0 \qquad q=\sum Q(n,\tau)e^{i2\pi\nu(n,\tau)t} \qquad \oint pdq=nh$$

CM과 QM의 진동수, 진폭 가정 차이

- CM
  - 진동수: ν(n, τ)
    - n궤도에서 τ주기 갖는 단순파동에 의한 빛의 진동수
  - 진폭: Q(n, τ)
  - 전자위치
    - 전자회전시 시간에 따른 전자위치 변화

$$q = \sum Q(n,\tau)e^{i2\pi\nu(n,\tau)t}$$

- QM
  - 진동수: ν(n, n-τ)
    - n궤도에서 n-τ궤도로 전이시 방출하는 빛의 진동수
  - 진폭: Q(n, n-τ)
  - 전이성분
    - 전자는 어떤 경로로 전이 되는지 모름

$$q = \sum Q(n,n-\tau)e^{i2\pi\nu(n,n-\tau)t}$$

과감한 돌파

- 위치성분이 아닌 전이성분을 위치로 간주

$$\frac{d^2q}{dt^2}+\frac{k}{m}q=0 \quad \leftarrow \quad \begin{aligned} q &= \sum Q(n,n-\tau)e^{i2\pi\nu(n,n-\tau)t} \\ q' &= \sum i2\pi\nu(n,n-\tau)Q(n,n-\tau)e^{i2\pi\nu(n,n-\tau)t} \\ q'' &= \sum -4\pi^2\nu(n,n-\tau)^2Q(n,n-\tau)e^{i2\pi\nu(n,n-\tau)t} \end{aligned}$$

- 최종 잔류성분: $4\pi^2\left[\nu^2-\nu(n,n-\tau)^2\right]Q(n,n-\tau)=0$
  - 리드버그 식: 진동수 변경법칙 찾기

$$\nu(n,n-\tau)=\frac{Rc}{(n-\tau)^2}-\frac{Rc}{n^2}$$

$$-\nu(n,n-\tau)=-\left[\frac{Rc}{(n-\tau)^2}-\frac{Rc}{n^2}\right]=\frac{Rc}{n^2}-\frac{Rc}{(n-\tau)^2}=\nu(n-\tau,n)$$

전류성분 0이 되는 조건

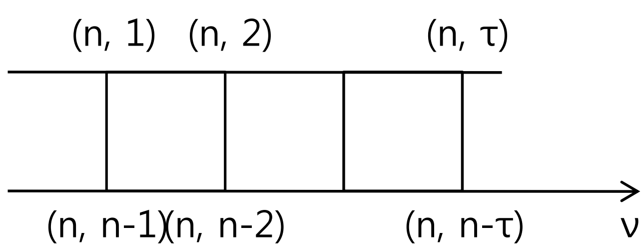
- 진폭 term이 0이 아닐때

$$\nu(n,n-1)=\nu \qquad Q(n,n-1)\neq 0$$

$$\nu(n-1,n)=-\nu \qquad Q(n,n+1)=Q(n-1,n)\neq 0$$

- 진폭 term이 0일때

$$Q(n,n-1)=0 \quad @\tau\neq\pm 1$$



보어 양자조건에 대입

- 양자조건 변형

$$\oint pdq = \oint mvdq = \oint mv^2 dt = \int_0^{\frac{1}{\nu}} m(q')^2 dt = nh$$

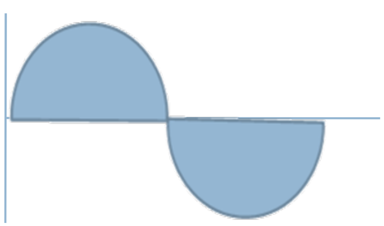
$$q = \sum Q(n, n-\tau) e^{i2\pi\nu(n,n-\tau)t}$$

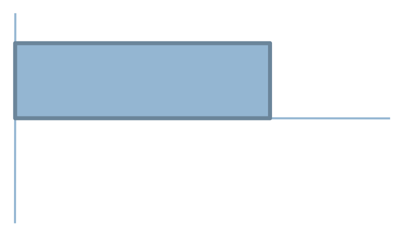
$$= Q(n, n-1) e^{i2\pi\nu(n,n-1)t} + Q(n, n+1) e^{i2\pi\nu(n,n+1)t} + 0$$

$$= Q(n, n-1) e^{i2\pi\nu t} + Q(n, n+1) e^{-i2\pi\nu t}$$

$$q' = i2\pi\nu Q(n, n-1) e^{i2\pi\nu t} - i2\pi\nu Q(n, n+1) e^{-i2\pi\nu t}$$

$$\int -4m\pi^2\nu^2 \left[Q(n, n-1)^2 \underline{e^{i4\pi\nu t}} + Q(n, n+1)^2 \underline{e^{-i4\pi\nu t}} - 2Q(n, n-1) Q(n, n+1) \underline{e^{i4\pi\nu t - i4\pi\nu t}} \right] dt = nh$$





$$\int e^{i4\pi\nu t} dt = \int e^{-i4\pi\nu t} dt = 0$$

$$\int 1 dt = \frac{1}{\nu}$$

하이젠베르그의 정리(n 작을때)

- 보어-하이젠베르그 정리

$$-4m\pi^2\nu^2\left[-2Q(n,n-1)Q(n,n+1)\frac{1}{\nu}\right]=nh$$

$$Q(n,n-1)Q(n,n+1)=|Q(n,n-1)|^2=\frac{h}{8m\pi^2\nu}n$$

  - n 크기에 무관하게, $I=|Q|^2$ 도출

- 하이젠베르그: 불확실성의 원리으로 재등장

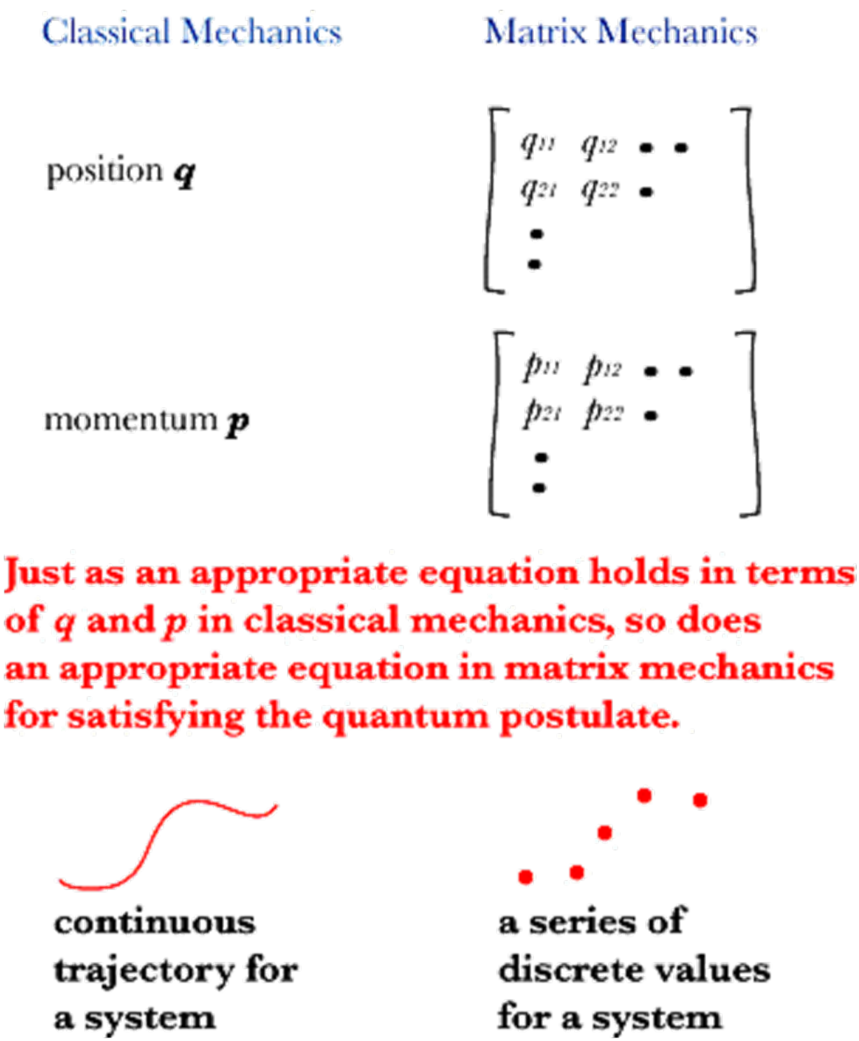
행렬역학으로 본 전이성분

- Matrix mechanics
  - Heisenberg, Born, Jordan, and Pauli
  - 전이성분을 양자의 위치 행렬로 간주

$$q = \sum Q(n, n-\tau) e^{i 2\pi \nu (n, n-\tau) t}$$

  - 정준교환 원리 도출

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i}$$



임의의 f(p, q)에 대한 방정식 유도

- 임의 f(p, q) 함수에 대한 정준 교환 관계 도출

$$f(p,q) = 2p + 3q^2 + pq$$

- 미분항: $\dfrac{\partial f(p,q)}{\partial q} = 6q + p$ 정준교환식: $pf - fp = \dfrac{h}{2\pi i}(6q + p)$

$$\frac{\partial f(p,q)}{\partial q} = \frac{2\pi i}{h}(pf - fp) \qquad \frac{\partial f(p,q)}{\partial p} = -\frac{2\pi i}{h}(qf - fq)$$

헤밀톤+하이젠베르그

- Hamiltonian equation of motion

$$\left.\begin{aligned}\frac{dq}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p}\\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial q}\end{aligned}\right\} \quad H(p,q) = E_k + E_p = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{k}{2}q^2 \quad \left\{\begin{aligned}\frac{dq}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p} = -\frac{2\pi i}{h}(qH - Hq)\\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{2\pi i}{h}(pH - Hp)\end{aligned}\right.$$

- Heisenberg equation of motion

$$\frac{dG}{dt} = -\frac{2\pi i}{h}(GH - HG)$$