수소원자의 미세구조
Fine structure of energy level of hydrogen atom

강대현 (姜大鉉)
Daehyeon KANG
samplemoon@korea.kr
Jinangun,jeonlabukdo, Korea

요약
Abstract

특수상대성이론과 양자이론에 의해 수소원자의 에너지준위가 정확하게 얻어져야 섭동항에 의한 연구가 의미가 있다고 믿어진다. 보통 수소원자의 전자운동만을 고려해서 연구를 하는 것으로 보여지는데, 이 논문에서 전자와 원자핵의 운동을 같이 포함하는 수소원자의 에너지 준위를 조사해보았다.

It is believed that the study by the perturbation term is meaningful if the energy level of the hydrogen atom is correctly obtained by special theory of relativity and quantum theory. In this paper, we have investigated the energy levels of hydrogen atoms, including electron and atomic nucleus movements.

1. 들어가는 말

수소원자 에너지준위를 정확하게 찾으려면 전기포텐셜, 전자와 원자핵의 운동에너지를 같이 다뤄야한다고 본다.

$$H = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} + \sqrt{p^2c^2 + M^2c^4} - \frac{e^2}{r} \tag{1}$$

여기서 m, M은 각각 전자,원자핵의 질량, e, 전하량이다.
그런데 아무래도 다루기 어려워서 아래와 같이 전자의 운동에너지만 넣어 다루는 것으로 여겨진다.

$$H = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - \frac{e^2}{r} \tag{2}$$

그렇다면 (2)식을 아무리 잘해도 상대성이론이 가리키는 수소의 에너지 준위는 아닐 것이다. 큰 차이는 없겠지만 말이다.
특수상대성이론이 정확한 이론이므로 수소원자의 정확한 에너지 준위를 구하는데 이용하고 그 다음에 섭동항 등에 대한 논의가 의미가 있을 것으로 보여진다.
따라서 방정식을 풀어나가는 과정에 난점이 있더라도 (1)식을 가지고 수소원자의 에너지 준위를 조사해 보고자 한다.

2. 방정식 풀이

수소원자의 에너지 준위를 구하려면 먼저 (1)식을 정리해야한다.

$$\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} + \sqrt{p^2c^2 + M^2c^4} = \frac{e^2}{r} + H$$

위식의 양변을 제곱한다.

$$2p^2c^2 + (m^2c^4 + M^2c^4) + 2\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}\ \sqrt{p^2c^2 + M^2c^4} = \left(\frac{e^2}{r} + H\right)^2 \tag{3}$$

이렇게 하고 이번에는 다음과 같이 한다.

$$[(\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} + \sqrt{p^2c^2 + M^2c^4})(\sqrt{p^2c^2 + M^2c^4} - \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4})] \div (\sqrt{p^2c^2 + M^2c^4} - \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}) = \frac{e^2}{r} + H$$

여기서 전자와 원자핵의 운동량 p는 서로 동일하므로 바로 아래와 같이 정리된다.

$$[(M^2 - m^2)c^4)] \div (\sqrt{p^2c^2 + M^2c^4} - \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}) = \frac{e^2}{r} + H$$

$$[(M^2 - m^2)c^4)] \div \left(\frac{e^2}{r} + H\right) = (\sqrt{p^2c^2 + M^2c^4} - \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4})$$

바로 위식의 양변을 제곱한다.

$$[((M^2 - m^2)c^4)^2] \div \left(\frac{e^2}{r} + H\right)^2 = 2p^2c^2 + (m^2c^4 + M^2c^4) - 2(\sqrt{p^2c^2 + M^2c^4}\ \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}) \tag{4}$$

(3)식과 (4)식을 덧셈을 한다.

$$(\frac{e^2}{r}+H)^2+(\frac{(M-m)^2c^8}{(H+\frac{e^2}{r})^2}) = 4p^2c^2+2(m^2c^4+M^2c^4) \quad (5)$$

(5)식을 그대로 놓고 방정식의 파동함수를 찾기에는 어려워보이므로 근사적으로 표현해본다. r ≫ $\frac{e^2}{H}$ 이라고 했을 때 (5)식을 아래와 같이 표시한다.

$$\frac{e^4}{r^2}+2H\frac{e^2}{r}+H^2+\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^2}-\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^3}\frac{2e^2}{r}+\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^4}\frac{3e^4}{r^2} = 4p^2c^2+2(m^2c^4+M^2c^4) \quad (6)$$

(6)식을 정리해본다.

$$[H^2+\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^2}-2(m^2c^4+M^2c^4)]+(2H\frac{e^2}{r}-\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^3}\frac{2e^2}{r})+(\frac{e^4}{r^2}+\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^4}\frac{3e^4}{r^2}) = 4p^2c^2 \quad (7)$$

(7)식에 시간에 무관한 파동함수 ψ(r)를 붙여준다. (시간t,위도θ,경도Φ에 무관)

$$\{[H^2+\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^2}-2(m^2c^4+M^2c^4)]+(2H\frac{e^2}{r}-\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^3}\frac{2e^2}{r})+(\frac{e^4}{r^2}+\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^4}\frac{3e^4}{r^2})=4p^2c^2\}\psi(r) \quad (8)$$

(8)식의 우변을 운동량 연산자로 표기후 정리한다.

$$\{[H^2+\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^2}-2(m^2c^4+M^2c^4)]+(2H\frac{e^2}{r}-\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^3}\frac{2e^2}{r})+(\frac{e^4}{r^2}+\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^4}\frac{3e^4}{r^2})+4\hbar^2c^2\nabla^2=0\}\psi(r) \quad (9)$$

(9)식을 간단하게 만들기 위해 변환을 시도한다.

$\frac{\sqrt{2(m^2+M^2)c^4H^2-(H^4+(M^2-m^2)^2c^8)}}{\hbar cH}\, r = \rho$ 라 하면

$$\{(-\frac{1}{4}+\frac{\lambda}{\rho})+(\frac{1}{4}\frac{\alpha^2}{\rho^2}+\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^4}\frac{3}{4}\frac{\alpha^2}{\rho^2})+(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2})=0\}\psi(\rho) \quad (10)$$

여기서 $\lambda=\frac{\alpha}{2}\frac{(H^4-(M^2-m^2)^2c^8)}{H^2(2(m^2+M^2)c^4H^2-(H^4+(M^2-m^2)^2c^8))^{1/2}}$ 이고 $\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}$ 이다.

(10)식을 들여다보면 좌변 넷째 항 $\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^4}\frac{3}{4}\frac{\alpha^2}{\rho^2}$이 λ에 들어가지 않은 H 가 포함된 계수가 있다는 점이다. 이 상황에서 파동함수를 구하면 방정식은 모순(자가당착)을 낳게 된다.

그러므로 $\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{(H+\frac{e^2}{r})^2} = \frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^2}-\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^3}\frac{2e^2}{r}$ 전개해야 한다는 판단을 하였다.

방정식이 모순에 빠지는 상황을 피하는 방법은 저 방법외에는 없어보인다. 특수상대성이론과 양자이론은 위와 같이 해야한다고 묵시적으로 몰아가는 것 같다.
그리고, 이런 판단이 옳거나 그른지는 실험사실과 비교해서 시시비비를 가린다.

그러면 (10)식은 다음과 같이 다시 쓸 수있게 되는 것이다.

$$\{(-\frac{1}{4}+\frac{\lambda}{\rho})+(\frac{1}{4}\frac{\alpha^2}{\rho^2})+(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2})\}\psi(\rho)=0 \quad (11)$$

여기서 $\lambda = \frac{\alpha}{2}\frac{(H^4-(M^2-m^2)^2c^8)}{H^2(2(m^2+M^2)c^4H^2-(H^4+(M^2-m^2)^2c^8))^{1/2}}$가 되는데

수소원자의 에너지 준위를 찾기위해서 λ 를 정리해본다.

$\frac{\alpha}{2}\frac{(H^4-(M^2-m^2)^2c^8)}{H^2(2(m^2+M^2)c^4H^2-(H^4+(M^2-m^2)^2c^8))^{1/2}}=\lambda$ 를 양변을 제곱하여 정리한다.

$$\frac{\alpha^2}{4\lambda^2}(H^4-(M^2-m^2)^2c^8)^2 = H^4(2(m^2+M^2)c^4H^2-(H^4+(M^2-m^2)^2c^8)) \quad (12)$$

$$(1+\frac{\alpha^2}{4\lambda^2})H^8-2(m^2+M^2)c^4H^6+(1-\frac{\alpha^2}{2\lambda^2})(M^2-m^2)^2c^8H^4+\frac{\alpha^2}{4\lambda^2}(M^2-m^2)^4c^{16}=0 \quad (13)$$

$\frac{H^2}{(M^2-m^2)c^4}=E$ 를 이용해서 (13)식을 다시 적어본다.

$$(1+\frac{\alpha^2}{4\lambda^2})E^4-2\frac{m^2+M^2}{(M^2-m^2)}E^3+(1-\frac{\alpha^2}{2\lambda^2})E^2+\frac{\alpha^2}{4\lambda^2} = 0 \quad (14)$$

(14)식은 4차방정식인데 근의 공식이 있어서 일반적으로 해를 구할 수는 있지만 아주 길고 아주 지루한 작업이 될것이므로 수학에서 사용하는 뉴튼공식을 가지고 시도한다.

뉴튼공식 $E_2 = E_1 - \frac{f(E_1)}{f'(E_1)}$

방정식의 해를 쉽게 찾기위해 $E_1 = \frac{M+m}{M-m}$ 이라고 놓는다.. 이것은 $\lambda=\infty$ 일 때 (14)식의 근을 구하면 얻어진다.

$$f(E_1)=(1+\frac{\alpha^2}{4\lambda^2})E_1^4-2\frac{m^2+M^2}{(M^2-m^2)}E_1^3+(1-\frac{\alpha^2}{2\lambda^2})E_1^2+\frac{\alpha^2}{4\lambda^2}=E_1^4-2\frac{m^2+M^2}{(M^2-m^2)}E_1^3+E_1^2+\frac{\alpha^2}{4\lambda^2}E_1^4-\frac{\alpha^2}{2\lambda^2}E_1^2+\frac{\alpha^2}{4\lambda^2}$$

$$=\frac{\alpha^2}{4\lambda^2}E_1^4-\frac{\alpha^2}{2\lambda^2}E_1^2+\frac{\alpha^2}{4\lambda^2} = \frac{\alpha^2}{4\lambda^2}(E_1^4-2E_1^2+1)=\frac{\alpha^2}{4\lambda^2}(E_1^2-1)^2 = \frac{\alpha^2}{4\lambda^2}(\frac{4Mm}{(M-m)^2})^2 = \frac{\alpha^2}{\lambda^2}\frac{4M^2m^2}{(M-m)^4}$$

$$f'(E_1)= 4(1+\frac{\alpha^2}{4\lambda^2})E_1^3-6\frac{(m^2+M^2)}{(M^2-m^2)}E_1^2+2(1-\frac{\alpha^2}{2\lambda^2})E_1^1 = 4E_1^3-6\frac{(m^2+M^2)}{(M^2-m^2)}E_1^2+2E_1^1+\frac{\alpha^2}{\lambda^2}E_1^3-\frac{\alpha^2}{\lambda^2}E_1$$

$$= \frac{4Mm(M+m)}{(M-m)^3}+\frac{\alpha^2}{\lambda^2}\frac{4Mm(M+m)}{(M-m)^3}=(1+\frac{\alpha^2}{\lambda^2})\frac{4Mm(M+m)}{(M-m)^3}$$

$$E_2 = \frac{M+m}{M-m}-\frac{\frac{\alpha^2}{\lambda^2}\frac{4M^2m^2}{(M-m)^4}}{(1+\frac{\alpha^2}{\lambda^2})\frac{4Mm(M+m)}{(M-m)^3}} = \frac{(M+m)^2}{M^2-m^2}-\frac{\frac{\alpha^2}{\lambda^2}Mm}{(1+\frac{\alpha^2}{\lambda^2})(M^2-m^2)} \quad (15)$$

그러므로 $H^2=(M+m)^2c^4-\frac{\frac{\alpha^2}{\lambda^2}Mmc^4}{(1+\frac{\alpha^2}{\lambda^2})}$ 이고 $H= \{(M+m)^2c^4-\frac{\frac{\alpha^2}{\lambda^2}Mmc^4}{(1+\frac{\alpha^2}{\lambda^2})}\}^{\frac{1}{2}}$ 이다.

위 공식을 근사적으로 표기해본다.

$$\therefore H=(M+m)c^2-\frac{\frac{\alpha^2}{2\lambda^2}mc^2}{(1+\frac{\alpha^2}{\lambda^2})(1+\frac{m}{M})} \qquad (16)$$

λ가 어떻게 구성되는 지 알아보려면 일단 파동함수를 찾아보아야 한다.

(11)식에서 파동함수 ψ(ρ)를 구해본다.**[1]**

$$\{(-\frac{1}{4}+\frac{\lambda}{\rho})+(\frac{1}{4}\frac{\alpha^2}{\rho^2})+(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2})\}\psi(\rho)=0 \qquad (11)$$

$\psi(\rho)=e^{-\frac{\rho}{2}}G(\rho)$ 로 놓고 방정식에 작용시켜본다.

$$\{(\frac{\lambda-1}{\rho})+(\frac{1}{4}\frac{\alpha^2}{\rho^2})+(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+(\frac{2}{\rho}-1)\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2})\}G(\rho)=0 \qquad (17)$$

이번에는 $G(\rho)=\rho^k\sum_0^\infty a_n\rho^n$ 로 놓고 방정식에 적용하여본다.

$$\{(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+(\frac{2k+2}{\rho}-1)\frac{\partial}{\partial\rho}+(\frac{\lambda-1-k}{\rho})\}\sum_0^\infty a_n\rho^n=0 \qquad (18)$$

여기서 $k=\frac{-1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{(2\ell+1)^2-\alpha^2}$ 이다.

이어서 (18)식을 풀어본다.

$$\sum\{(n(n-1)a_n\rho^{n-2}+(\frac{2k+2}{\rho}-1)na_n\rho^{n-1}+(\frac{\lambda-1-k}{\rho})a_n\rho^n\}=0 \qquad (19)$$

(19)식으로부터 $a_{n+1}=\frac{n+k+1-\lambda}{(n+1)(n+2k+2)}a_n$ 이 얻어지는데 파동함수의 제곱을 모든공간에 걸쳐 적분했을 때 그 값이 유한해야 하므로 $n+k+1=\lambda$ 이라는 조건을 만족해야 한다.
위의 내용대로 (16)식에 대입하여본다.

$$H=(M+m)c^2-\frac{\frac{\alpha^2}{2(n+k+1)^2}}{(1+\frac{\alpha^2}{(n+k+1)^2})}\frac{mc^2}{(1+\frac{m}{M})} \qquad (20)$$

(20)식은 슈뢰딩거방정식에서 얻어지는 것과 아주 유사하다. 다만 부양자수 ℓ에 따라서는

에너지 준위에 아주 작은변동이 있을뿐이다.

지금까지 보여준 방정식풀이는 전자가 스핀없이 전하와 질량을 갖는 경우이다.
이런 경우, 전자가 스핀이 없다고 가정했을 때 2s,2p 궤도 사이의 에너지 갭은 얼마나 되는지 알아본다.

먼저 $k=\frac{-1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{(2\ell+1)^2-\alpha^2}$ 을 간단하게 정리해야한다.

수소원자인 경우 $1 \gg \alpha^2$이므로

$$k=\frac{-1}{2}+\sqrt{(\ell+\frac{1}{2})^2-\frac{\alpha^2}{4}} \simeq \frac{-1}{2}+(\ell+\frac{1}{2})-\frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{4(\ell+\frac{1}{2})}=\ell-\frac{1}{4}\frac{\alpha^2}{2(\ell+\frac{1}{2})}$$

$n+k+1=\lambda$가 수소원자 2s궤도인 경우 $n=1, k=-\frac{\alpha^2}{4}$ 이므로, $2-\frac{\alpha^2}{4}=\lambda_{2s}$ 이다.

2p 궤도인 경우는 $n=0, k=1-\frac{\alpha^2}{12}$ 이므로 $2-\frac{\alpha^2}{12}=\lambda_{2p}$ 이다.

(20)식에 대입시켜 계산해보면 2p-2s 궤도사이의 에너지준위 갭은 $\frac{\alpha^4}{48}\frac{mc^2}{1+\frac{m}{M}}$ 정도이다.

말하자면 2s궤도 에너지 준위보다 2p 궤도 준위가 위의 수치만큼 높게 되어 있다.

수소원자의 전자는 분명하게 스핀을 가지고 있을 때 스핀-궤도운동이 서로 작용한다..
스핀-궤도결합으로 인한 에너지준위 변동은 아래 식으로 주어진다.[**2**]

$$\triangle E=\frac{1}{4}mc^2(Z\alpha)^4\frac{\left\{\begin{matrix}\ell \\ -\ell-1\end{matrix}\right\}}{n^3\ell(\ell+1/2)(\ell+1)} \tag{21}$$

여기서 $n=2$ 주양자수이고, 수소원자인 경우 Z=1이다. $\ell=1$을 대입하여 계산해보면
2P1/2 준위는 본래 에너지준위보다 $-\frac{1}{48}\alpha^4mc^2$ 만큼 낮아진다는 뜻이된다.
상대성이론 효과와 스핀-궤도결합효과를 고려해주면 2S 와 2P1/2 준위는 일치하게 된다.

특수상대성이론에 의한 전자와 수소핵의 운동에너지,전기포텐셜을 모두 갖춘 (1)식으로부터 얻어진 수소원자의 에너지 준위는 실험사실과 잘 일치한다.
수소원자의 2S 와 2P1/2 준위가 일치하는 부분은 나에게 뜻밖에 강렬한 편치를 남겼다.
다윈항(darwin term)은 없어야 하는 상황이 되었다.

3. 결 론

수소원자의 스펙트럼 미세구조를 특수상대성이론과 양자이론을 결부시킨 (5)식을

가지고 조사해보면 지금까지 섭동항으로 사용해왔던 다윈항(darwin term)이 있을 필요가 없다는 것이다.

비록 (5)식이 복잡해보이고 방정식의 해를 찾아가는 과정이 어려웠지만 바람직한 결과가 나온 것이다.

사실은 $\frac{(M^2-m^2)^2c^8}{H^4}\frac{3}{4}\frac{\alpha^2}{\rho^2}$ 항 때문에 만난 방정식에 모순이 나와 난관에 봉착했었다.

처음엔 특수상대성이론 및 양자이론이 태생적으로 어울릴 수 없는 문제를 안고 있다고 보고 물리학적 증거로 삼으려했었다.

그런데 2개의 이론이 자연현상에 잘 들어맞는 이론이라 그 항을 제외하는 방식을 선택하였다. 어쩌면 저 항이 없어야 가장 근사한 전개일 수도 있다는 생각이 들고.

램이동량은 (5)식의 둘째항 포텐셜과 관련이 있을듯하다

이렇게 관측된 수소원자의 미세구조와 잘 맞는 것 같고 이 방정식의 형태가 에너지항과 운동량 항이 같은 차수가 아닌 다소 복잡한 형태이나

그렇지만 험난한 방정식풀이 과정을 넘기고 잘 마무리되어 운수가 좋은 경우였다고 지나간 시간을 돌아본다.

참고문헌(reference)

[**1**]Gasiorowicz “quantum physics” johnwiely&sons inc 1974, pp195-197

[**2**]Gasiorowicz “quantum physics” johnwiely&sons inc 1974, p274