

상대론적 원자모형

저자 : 강대현

이메일 : samplemoon@korea.kr

요약

1913년 덴마크의 과학자인 닐스 보어가 수소원자의 스펙트럼 선을 설명하는 공식을 선보였는데 공식이 간단하면서도 원자의 모형에 관한 그림을 얻는데 대단히 중요한 것이었다. 그럼에도 원자의 전자운동을 뉴턴 운동역학으로 다루어 원자번호가 큰 원자에서 전자의 에너지 준위를 계산하는 공식으로 사용하기에는 어려움이 있다. 그리하여 상대성역학으로 공식을 만들었는데, 이 공식은 유도과정도 아주 간단하고 익히기에도 좋고 가르치기에도 좋다고 할 수 있다.

1. 현황

원자에서 전자의 역학적 에너지 총합은

$$E = \frac{1}{2}m_0v^2 - \frac{ze^2}{r} \quad (1)$$

오래전부터 알려진 것처럼 (1)식과 같이 운동에너지에 쿨롱포텐셜을 합한 것이다.

닐스보어는 수소원자의 스펙트럼 선을 나타내는 발머공식 등을 참고하여

$$n\hbar = m_0vr \quad (2)$$

(2)식과 (3)식을 사용하는데 (2)식은 전자의 운동량과 원자핵과 전자사이의 거리를 곱한 값이 플랑크상수의 자연수 배여야 한다고 놓았고

$$\frac{m_0v^2}{r} = \frac{ze^2}{r^2} \quad (3)$$

(3)식은 원자핵과 전자 사이에 전기적 인력과 원심력이 같아야 한다는 조건을 달아 전자가 원자에서 갖는 공전궤도가 불연속 상태가 되도록 하였다.

(1),(2),(3)식으로부터 전자가 원자에서 갖는 에너지준위는

$$E = -\frac{1}{2}m_0c^2 \frac{z^2\alpha^2}{n^2} \quad (4)$$

(4)식과 같이 유도된다. 여기서 z 는 원자번호, $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ 이다.

(4)식은 수소원자의 경우, 관측된 결과와 정확하게 일치하여 닐스보어의 큰 업적이 되었고 100년이 지난 지금까지도 널리 이용되고 있는 실정이다.

이렇게 성공적인 (4)식은 원자번호가 큰 무거운 원자에는 사용하기에는 문제가 있다.

원자번호가 큰 우라늄같은 경우 92번으로 $z=92$ 가 되어 전자의 운동속도가 굉장히 크다. 따라서 상대성이론이 필요한 것이다. 아쉽게도 1913년에 닐스보어는 이 작업을 하지 않은 것으로 보인다. 업적을 보면 천재인데 상대성이론을 사용하지 않은 것은 간단하게 하려고 그랬을 것으로 보인다.

이후에 디랙방정식이나 쏘머펠트 공식이 상대론적 효과를 고려하여 나온 결과들이 있으나

공식이 나오는 과정이나 방법이 워낙 복잡하고 어렵다.

그리하여 닐스보어가 사용하던 방식을 차용해서 상대론적 보어모형을 만들었다.

2. 본문

원자에서 전자의 상대론적 역학적 에너지 총합은

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \frac{z e^2}{r} \quad (5)$$

오래전부터 알려진 것처럼 (5)식은 상대론적 운동에너지에 쿨롱포텐셜을 합한 것이다.

(여기서 $\frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = m$ 으로 이 뒤로는 표기한다.)

닐스보어가 했던 것처럼 수소원자의 스펙트럼 선을 나타내는 발머공식 등을 참고하여

$$n\hbar = mvr \quad (6)$$

(6)식을 사용하는데 전자의 운동량과 원자핵과 전자사이의 거리를 곱한 값이 플랑크상수의 자연수 배여야 한다고 놓은 것이고

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{ze^2}{r^2} \quad (7)$$

(7)식은 원자핵과 전자 사이에 전기적 인력과 원심력이 같아야 한다는 조건을 달아 전자가 원자에서 갖는 공전궤도가 원형이 되도록 하는 것이다.

이 시점에서 닐스보어가 했던 방법보다 좀 더 과정이 삽입된다.

(7)식 m 은 상대론적 질량이므로, (5)식과 함께 아래와 같이 만들어진다.

$$\frac{m^2 v^2}{r} = \frac{ze^2 m}{r^2} = \frac{ze^2}{c^2 r^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) \quad (8)$$

위의 (8)식을 더 다듬는다.

$$m^2 v^2 = \frac{ze^2}{c^2 r} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) \quad (9)$$

(5)식을 약간 다르게 표시해본다.

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - \frac{ze^2}{r} \quad (10)$$

(9)식과 (10)식을 결합시키면 다음과 같아진다.

$$E = \sqrt{\frac{ze^2}{r} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) + m_0^2 c^4} - \frac{ze^2}{r} \quad (11)$$

(11)식을 전개하면

$$\left(E + \frac{ze^2}{r} \right)^2 = \frac{ze^2}{r} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) + m_0^2 c^4 \quad (12)$$

$$E^2 + E \frac{ze^2}{r} = m_0^2 c^4 \quad (13)$$

한편, (6)식과 (9)식에서 다음 (14)식을 얻을 수 있다.

$$m^2 v^2 = \frac{ze^2}{c^2 r} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) = \frac{n^2 \hbar^2}{r^2} \quad (14)$$

위식을 더 정리하자면 이리하다.

$$\frac{ze^2}{c^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) = \frac{n^2 \hbar^2}{r} \quad (15)$$

$$\frac{ze^2}{c^2} E + \frac{z^2 e^4}{c^2 r} = \frac{n^2 \hbar^2}{r} \quad (16)$$

$$ze^2 E + \frac{z^2 e^4}{r} = \frac{n^2 \hbar^2 c^2}{r} \quad (17)$$

$$ze^2 E = \frac{n^2 \hbar^2 c^2 - z^2 e^4}{r} \quad (18)$$

(13)식, (18)식을 결합하면 아래와 같이 된다.

$$E = m_0 c^2 \sqrt{1 - \frac{z^2 \alpha^2}{n^2}} \quad (19)$$

(여기서 z 는 원자번호, $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ 이다.)

(19)식은 전자가 원자에서 갖는 에너지준위를 나타내는데, 무거운 원자에 쓸 수 있겠다. 공식을 유도하는 과정이 상당히 쉬워서 똑똑한 중학생이라면 할 수 있게 아주 간단한 것이다.

당연하지만 (19)식의 원자번호가 작다면

$$E = m_0 c^2 - \frac{1}{2} \frac{z^2 \alpha^2}{n^2} m_0 c^2 + \dots \quad (20)$$

위와 같이 쓸 수 있어서 정지질량을 제외하면 보어공식과 일치한다.

3. 맺는 말

무거운 원자에 전자를 쪼여 나오는 물체에서 나오는 특성엑스선을 관찰함으로써 원자의 1s 궤도의 대략적인 에너지 준위를 알 수가 있다고 한다.

특성엑스선을 관찰하여 원자번호를 알아낸 모즐리 법칙이 닐스보어의 공식에 z 대신 $z-1$ 을 대입하면 잘 일치한다고 한다. 원자번호가 커지면 2번째 전자껍질로 떨어질 때 발생하는 특성엑스선을 가지고 원자번호를 알 수 있는데 원자번호 40번이 넘어서면 닐스보어의 공식은 사용하기 어려워진다.

그래서 원자에 대한 상대론적 보어모형이 중요하다고 할 수 있다.

2020.2.9.(일요일) 작성

Relativistic Atomic Model

Daehyeon KANG

Abstract

In 1913, a Danish scientist named Niels Bohr introduced a formula that explained the spectral lines of hydrogen atoms, which was simple and important to get a picture of the model of atoms.

Nevertheless, it is difficult to treat the electron motion of an atom with Newtonian kinematics and use it as a formula for calculating the energy level of an electron in an atom with a large atomic number.

Thus, the formula was created with relativity, which is very simple to learn and good for teaching.