제2절 양자론의 기초

1.2.4 보어(Bohr)의 원자모형

3. 진동수조건(frequency condition)

- 전자 천이 상태에 따른 스펙트럼 영역

계 열	발견연도	스펙트럼 영역	전자의 천이 상태
라이먼(Lyman)	1906~1914	자외선	원자가 n=2, 3, 4, … 인 준위로부터 n=1인 준위로 떨어질 때
발머(Balmer)	1885	자외선, 가시광선	원자가 n=3, 4, 5, … 인 준위로부터 n=2인 준위로 떨어질 때
파센(Pashen)	1908	적외선	원자가 n= 4, 5, 6, … 인 준위로부터 n=3인 준위로 떨어질 때
브라켓 계열	1922	적외선	원자가 n= 5, 6, 7, … 인 준위로부터 n=4인 준위로 떨어질 때
푼트 계열	1924	적외선	원자가 n= 6, 7, 8, … 인 준위로부터 n=5인 준위로 떨어질 때

제2절 양자론의 기초

1.2.4 보어(Bohr)의 원자모형

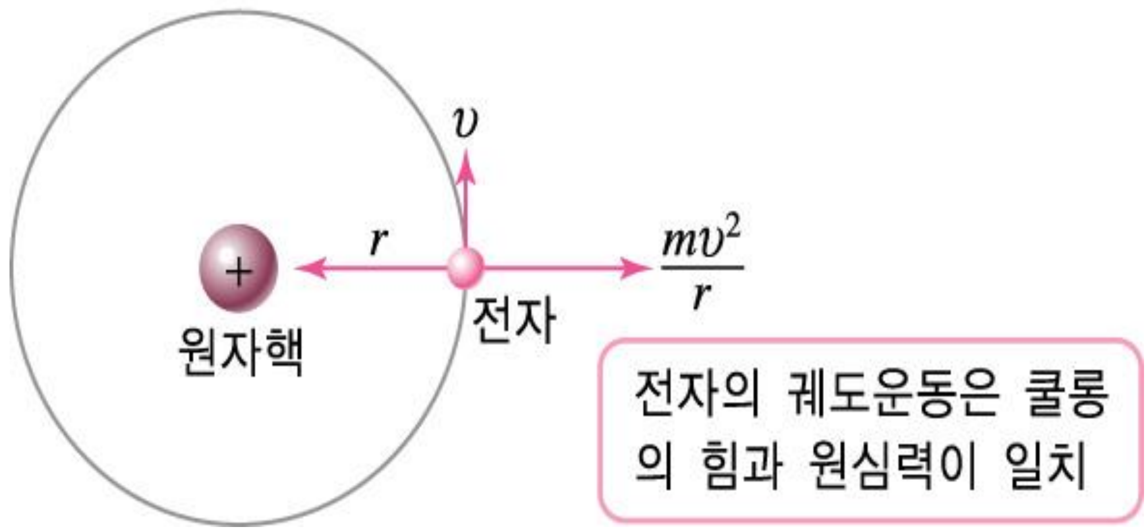
4. 보어의 반지름

* 전자궤도 반경 r_n은 $r_n = \dfrac{\varepsilon_0 h^2 n^2}{\pi m e^2}$ $\quad r_n = 0.529 \times 10^{-10} \times n^2$ [m]

* $n = 1$인 궤도반경

$r_1 = 0.529$[Å]

1-14



제2절 양자론의 기초

1.2.4 보어(Bohr)의 원자모형

5. 전자의 에너지

* 전자의 전체에너지 *E*는 운동에너지 *Ek*와 위치에너지 *Ep*의합

- 운동에너지 Ek

$$E_k = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

- 위치에너지 *Ep*

$$E_p = -\int_{\infty}^{r} F dr = \int_{\infty}^{r} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} dr = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$E_k = -\frac{1}{2} E_p \qquad E = E_k + E_p = \frac{1}{2} E_p = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

- 전자의 전체에너지 *E*

$$E = -\frac{m e^4}{8\pi\varepsilon_0 h^2} \times \frac{1}{n^2} = -13.58 \times \frac{1}{n^2}$$

제2절 양자론의 기초

1.2.5 전자의 양자수

- 원자 내 전자의 상태를 완전히 기술하기 위해서는 주양자수, 부양자수, 자기 양자수, 스핀 양자수의 네개의 양자수 필요

* 주양자수(主量子數 : principal quan-tum number) n

  원자 내 전자의 에너지를 결정, 양의 정수

* 부양자수 l : 각운동양자수 또는 방위양자수

* 자기양자수(磁氣量子數) m_l : 궤도면의 자장방향(磁場方向) 에 대한 기울기를 규정

* 스핀양자수(spin quantum number) m_s :전자의 자전(自轉)

제2절 양자론의 기초

1.2.5 전자의 양자수

- 원자 내 전자의 상태를 완전히 기술하기 위해서는 주양자수, 부양자수, 자기 양자수, 스핀 양자수의 네개의 양자수 필요

주 양자수 : $n = 1, 2, 3, \ldots$

방위 양자수 : $l = 0, 1, 2, 3, \ldots, (n-l)$, 즉 $0 \leqq l \leqq n-1$

자기 양자수 : $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$, 즉 $-l \leqq m \leqq l$

스핀 양자수 : $m_s = \pm 1/2$

제2절 양자론의 기초

1.2.5 전자의 양자수

- 전자각(電子殼 : electron shell) 주 양자수 n에 대응하는 궤도를 각각 $K, L, M, \ldots$각
- 전자부각 $l = 0, 1, 2, 3,$ 에 대응하는 준위를 각각 s, p, d, f
- 실리콘의 경우

* $n = 1$인 K각 $l = 0, m_l = 0, m_s = \pm 1/2$의 두 개 상태, 즉 $1s^2$

* $n = 2$인 L각

- $l = 0,\ m_l = 0,\ m_s = \pm 1/2$에 대응되는 두 개의 상태는 $2s^2$
- $l = 1,\ m_l = -1, 0, 1,\ ms = \pm 1/2$인 $2p^6$

*실리콘의 전자배열 $1s^2\ 2s^2 2p^6\ 3s^2 3p^2$

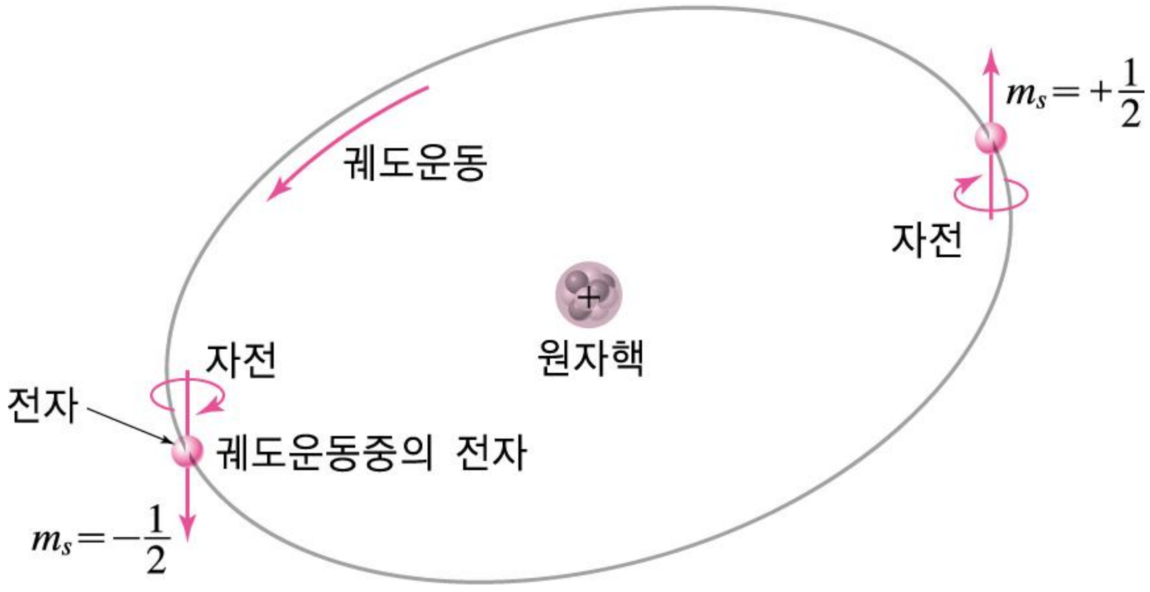
$1s^2$의 1은 $n = 1(K$각$)$이며 s^2의 2는 s궤도에 전자가 2개

제2절 양자론의 기초

1.2.5 전자의 양자수

- 스핀 양자수(spin quentum number) :전자의 자전에 의한 제4의 양자수

09

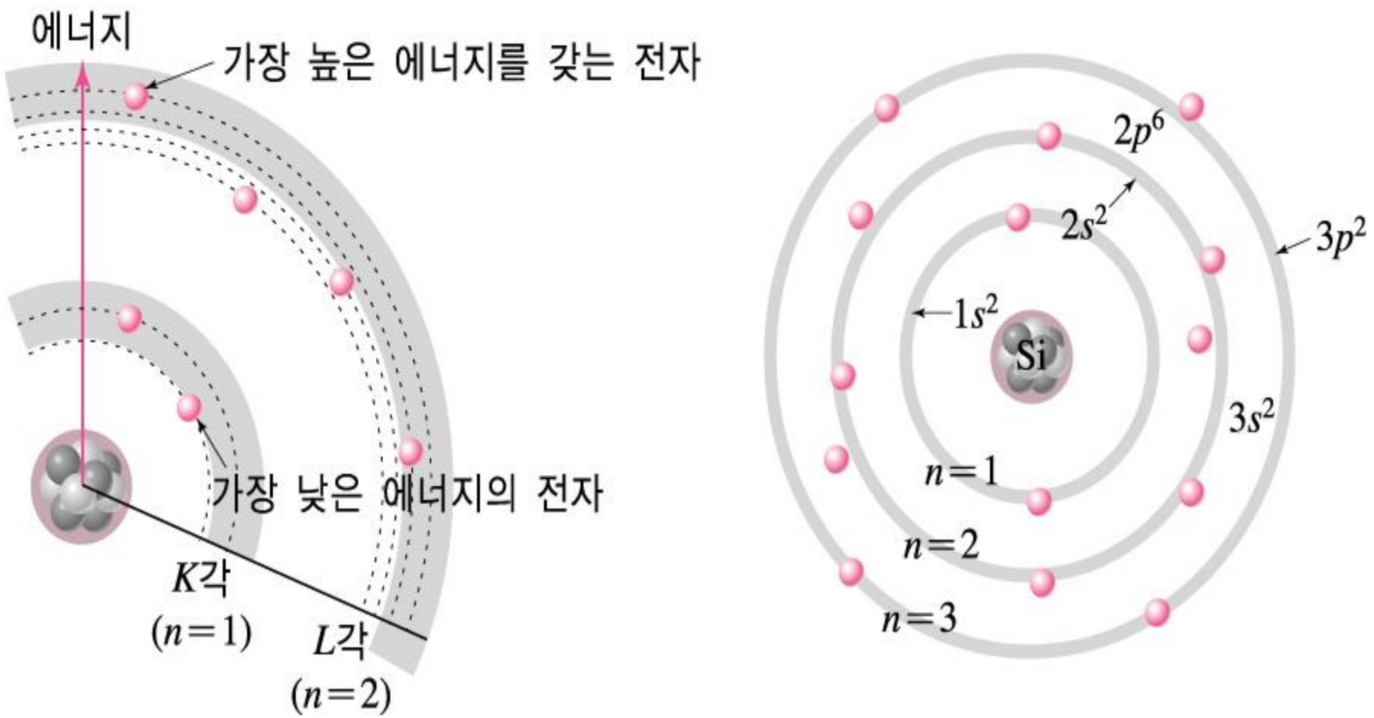


제2절 양자론의 기초

1.2.5 전자의 양자수

- 실리콘 원자의 전자배열

1-15



제2절 양자론의 기초

1.2.5 전자의 양자수

* 4족원소의 전자배열

원 소	원자번호	전자배열
탄소(C)	6	$1s^2\ 2s^2\ 2p^2$
실리콘(Si)	14	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^2$
게르마늄(Ge)	32	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^2$
주석(Sn)	50	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^6\ 4d^{10}\ 5s^2\ 5p^2$

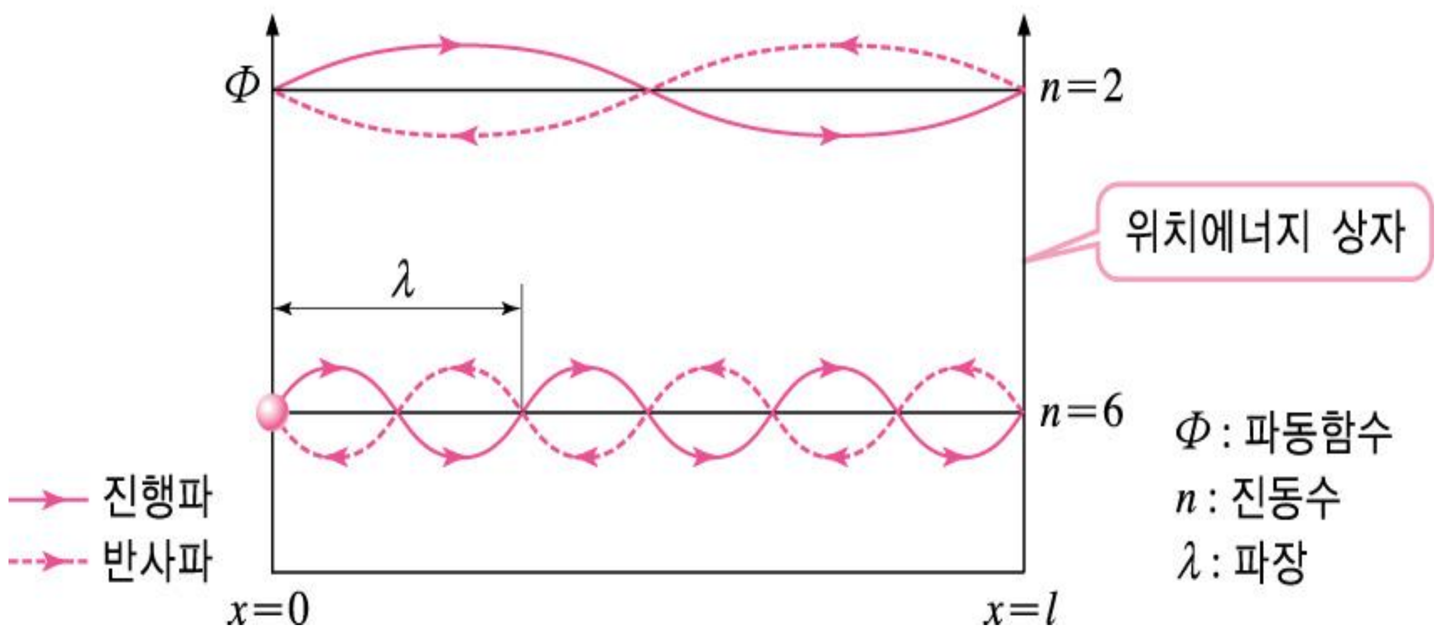
제3절 확률분포함수

* 물질파(파동함수)의 해

- 물질파 : 질량이 m인 입자가 속도가 v이고, 파장이 λ 인 파(wave)의 형태로 진행하는 파동

- 정상파 : 깊은 위치에너지 상자 내에 전자가 존재하고, 이 전자가 에너지 상자 내를 왕복 운동할 때의 물질파(전자파)

1-7



제3절 확률분포함수

* 슈뢰딩거의 파동함수 해

$$\lambda = \frac{2l}{n} \qquad (n = 1,\ 2,\ 3\ \cdots\cdots)$$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{h^2}{8ml^2}n^2$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}E\Phi = 0 \qquad \Phi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad k^2 = \frac{8\pi^2 m}{h^2}E$$

- 경계조건을 적용한 해 : $\Phi =$ **sin*kx*의 해(1차원 해)**
- 에너지의 값: $E = \frac{h^2}{8\pi^2 m}k^2 = \frac{h^2}{8ml^2}n^2$
- 3차원의 해: $\Phi = A\ \sin\frac{\pi n_x x}{l}\ \sin\frac{\pi n_y y}{l}\ \sin\frac{\pi n_z z}{l}$
- 에너지의 값 : $E = \frac{h^2}{8ml^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \qquad n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$

제3절 확률분포함수

- 전자가 얻을 수 있는 상태수 : (n_x, n_y, n_z)의 조합의 총수
- 에너지가 0 ~ E_0까지의 상태수 N

$$E_0 = \frac{h^2}{8ml^2} n_0^2 \qquad (n_0^2 = n_{x0}^2 + n_{y0}^2 + n_{z0}^2)$$

$$n_x = r \sin\theta \cos\Phi, \quad n_y = r \sin\theta \sin\Phi, \quad n_z = r \cos\theta$$

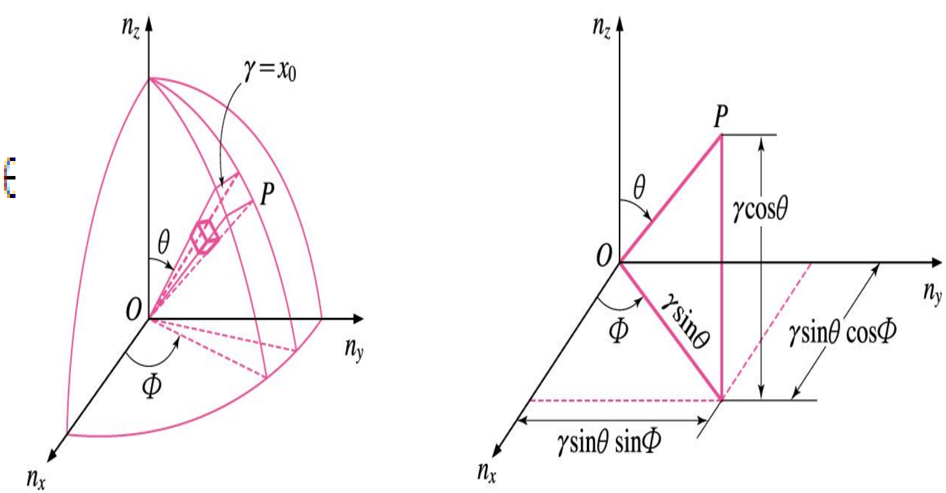
$$dN = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\Phi$$

$$N = \int\int\int r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\Phi$$

$$N = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{n_0} r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\Phi$$

$$N = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} l^3 E^{3/2} \qquad dN = 2\pi \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} l^3 E^{1/2} dE$$

64



(a) 8분 구(球) (b) 삼각함수 좌표

제3절 확률분포함수

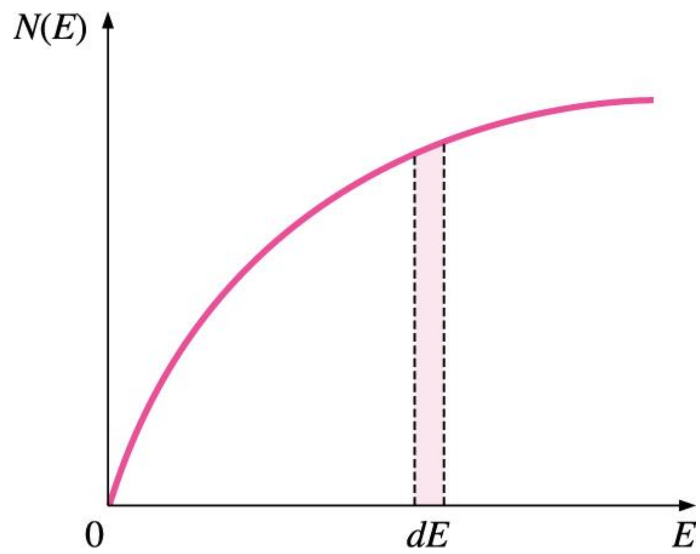
- 단위체적당 전자의 존재 가능 수 : $N(E)\,dE$

$$dN = 2\pi\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} L^3 E^{1/2}\,dE$$

$$N(E)\,dE = 2\frac{dN}{L^3} = 4\pi\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} E^{1/2}\,dE$$

$$N(E) = 4\pi\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$$

1-20

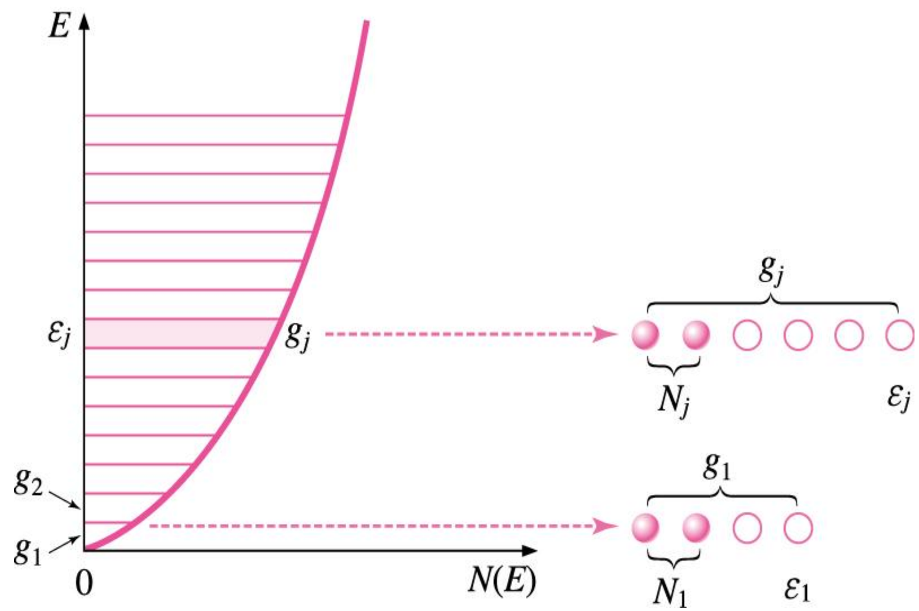


제4절 페르미-디렉 분포함수

- 전자의 분포상태

$$N(E)dE = 2\frac{dN}{l^3} = 4\pi\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} E^{1/2}dE$$

65

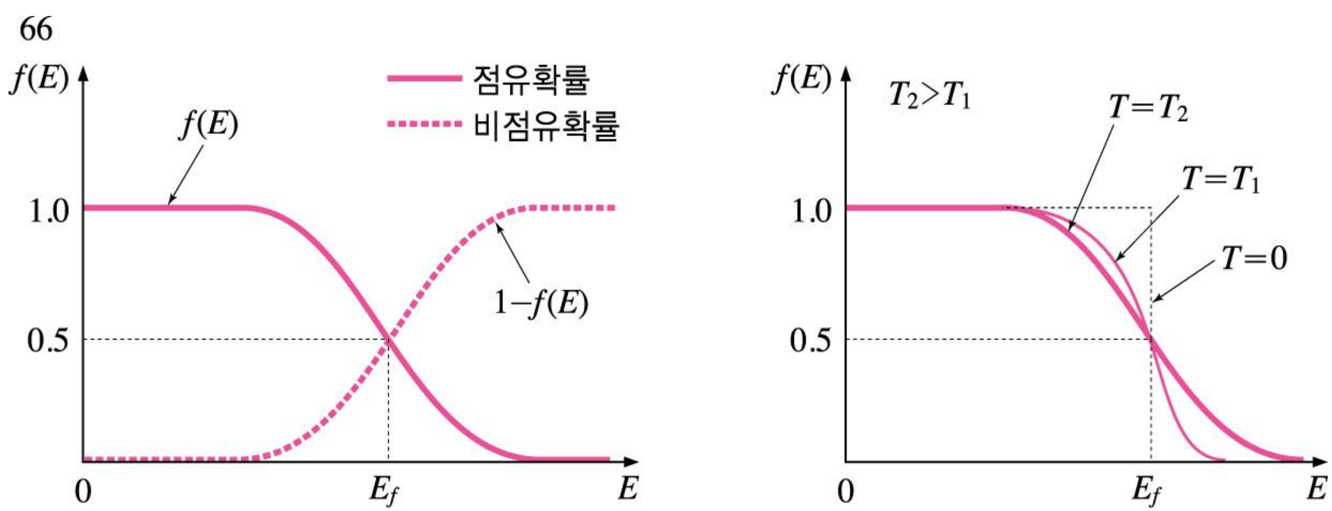


제4절 페르미-디렉 분포함수

- 페르미 – 디렉(Fermi-Dirac) 분포함수

전자의 존재 가능한 상태의 수 내에서 실제 존재하는 전자 의 실수를 결정하는 분포함수

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\dfrac{E - E_f}{kT}\right)}$$



(a) Fermi-Dirac 분포 (b) 온도에 의한 변화

제4절 페르미 – 디렉 분포함수

- 페르미-디렉(Fermi-Dirac) 분포함수 $$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)}$$

* *E*<*Ef* 의 경우 : Fermi-Dirac 분포함수 *f*(*E*)

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)} = \frac{1}{1 + \exp(-\infty)} = 1$$

* *E*>*Ef* 인 경우

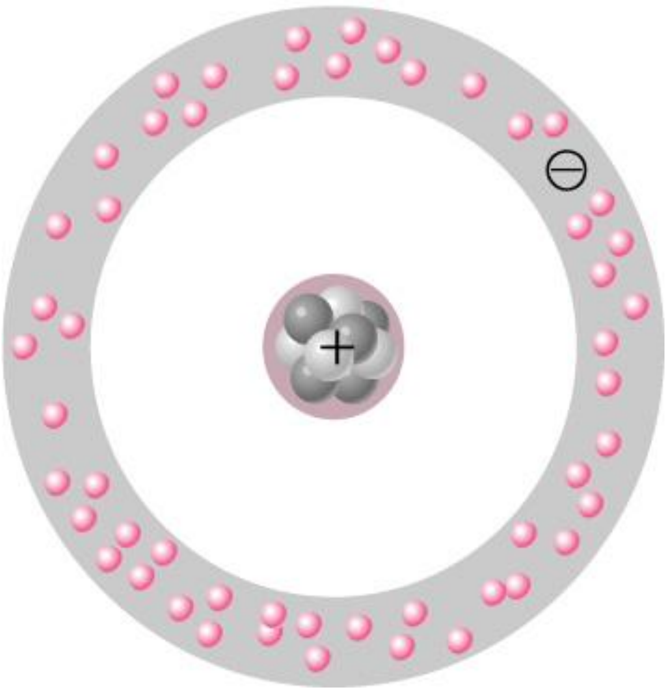
$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp(\infty)} = 0$$

* *E*= *Ef* 의 경우 $$f(E) = \frac{1}{1 + \exp(0)} = \frac{1}{2}$$

제4절 페르미-디렉 분포함수

전자의 위치는 “어느 위치에 있을 확률”로 표현

1-19



Chapter 01
복습문제 풀이
연구문제 풀이 – 보고서-

Thanks for your hard study of chapter 1