

General Chemistry I

단원	Ch 4. Introduction to Quantum Mechanics
학습 주제	Schrodinger Equation

① The Schrodinger Equation

🌈 슈뢰딩거 방정식 증명 - 차시마다 다를 수 있음.

1. 슈뢰딩거 방정식(Schrodinger 방정식)

- ① 일차원 운동을 하는 질량이 m 인 입자에 대한 슈뢰딩거 방정식 : 파동-입자 이중성이 고려됐으며, 슈뢰딩거 방정식의 해는 파동함수(ψ)로서 기술됨.

Schrodinger 방정식 유도

$\lambda = h/p$ 인 파동을 기술하는 2개의 파동함수 $\psi(x) = A \sin \frac{2\pi x}{\lambda}$, $\psi(x) = B \cos \frac{2\pi x}{\lambda}$

sine함수를 선택하여 슈뢰딩거 방정식에 ψ 를 대입

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = A \frac{2\pi}{\lambda} \cos \frac{2\pi x}{\lambda}, \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -A \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \sin \frac{2\pi x}{\lambda} = - \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \psi(x) \text{ 이므로 } \frac{d^2\psi}{dx^2} = - \left(\frac{2\pi}{h} p \right)^2 \psi(x)$$

이 식의 양변에 $-\frac{h^2}{8\pi^2 m}$ 을 곱하여 정리

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{p^2}{2m} \psi(x) = K\psi(x) \text{ 외부 힘 존재 시 } E = K + V(x)$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- ② 슈뢰딩거 방정식의 풀이 및 이용

$E\psi = H\psi$	\Rightarrow	ψ (파동함수)	\Rightarrow	○ 슈뢰딩거 방정식에 대입하면 에너지를 얻음 ○ ψ^2 을 통해 전자를 발견할 확률 밀도를 구함
(solve)			(use)	

2. 파동함수에 내재된 정보

- ① 파동함수에 대한 보른(Max Born)의 해석 : 입자의 파동함수가 임의의 한 점 x 에서 ψ 의 값을 가지면 x 와 $x+dx$ 사이에서 그 입자가 발견될 확률은 $|\psi|^2 dx$ 에 비례한다.
- ⓐ 파동함수의 제곱(ψ^2) : 확률밀도(probability density)라고 하며, 입자를 발견할 확률을 해당 영역의 부피로 나눈 값(미분소 당 확률)
- ⓑ 파동함수의 물리적 의미 : 단순한 확률 진폭이며, 부호에 대한 의미는 없음 ▷ $\psi^2 d\tau$ 로 계산하는 과정에서 부호항의 의미는 사라진다.

② 정규화(normalization)

- ⓐ 확률밀도함수를 적분했을 때 1이 되어야 연속확률분포의 조건 만족 즉,

$$N^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\psi(x))^2 dx = 1$$

일 때 상수 N 을 구하는 과정을 정규화라 한다.

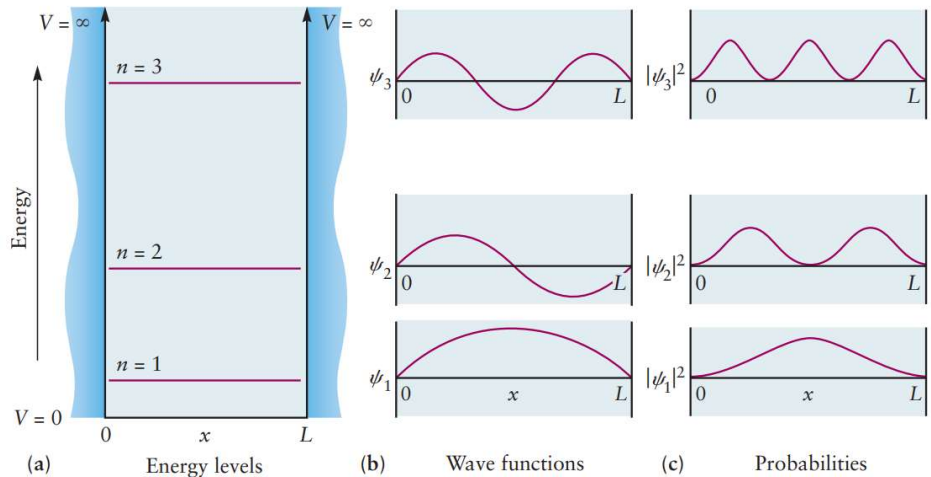
③ 파동함수의 조건

- ⓐ 1가 함수(일대일 대응)로 하나의 독립 변수에 의해 하나의 종속 변수가 있어야 함.
- ⓑ 파동함수(ψ), 파동함수의 일차 도함수(ψ')가 연속함수 ▷ 원함수와 도함수가 미분가능해야 이계도함수 존재
- ⓒ 수렴해야 한다.(발산하면 확률밀도함수의 조건에 위배)

2 Quantum Mechanics of Particle-in-a-Box Models

1. 1차원 상자

FIGURE 4.37 (a) The potential energy for a particle in a box of length L , with the first three energy levels marked. (b) Wave functions showing the ground state ψ_1 and the first two excited states. The more numerous the nodes, the higher the energy of the state. (c) The squares of the wave functions from (b), equal to the probability density for finding the particle at a particular point in the box.



- ① 질량이 m 인 입자가 높이가 ∞ 인 에너지 장벽에 갇혀 있는 상황을 나타내는 슈뢰딩거 방정식(상자 내에서 퍼텐셜 에너지(V)는 0이지만, 기벽에서 퍼텐셜 에너지는 ∞ 임 ▷ 무한 퍼텐셜 우물)

$$\text{(상자 내)} \quad -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

$$\text{(기벽)} \quad -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E - \infty)\psi(x)$$

- ② 기벽에서 입자의 파동함수 : $x=0$, $x=L$ 인 경우 $\psi(x)=0$
- ③ 상자 속 입자에 대한 슈뢰딩거 방정식의 해 : sine함수 고른 이유는 경계 조건 만족시키기 위함임.

$$\text{(기벽)} \quad \psi(x) = A \sin \frac{n\pi}{L}x$$

1차원 PiB의 파동함수 정규화

$$\psi(x) = A \sin kx \text{ 라 하면 } \psi(0) = 0, \psi(L) = 0$$

$$\text{이때 } \psi(L) = 0 \text{ 이려면 } kL = n\pi \quad (n=1, 2, 3\cdots) \Rightarrow \text{따라서 } k = \frac{n\pi}{L}$$

$$\psi(x) = A \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (n=1, 2, 3\cdots)$$

$$\text{이때 정규화하려면 } A^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = A^2 \int_0^L \frac{1 - \cos 2 \frac{n\pi x}{L}}{2} dx = \frac{2}{L} \quad (\text{주기 적분})$$

$$\text{따라서 } A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

④ 상자 속 입자의 에너지 구하기

1차원 PiB의 에너지 구하기

(solve 1) 슈뢰딩거 방정식에 ψ 를 대입

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \therefore \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{8\pi^2m}{\hbar^2} E\psi, \text{ 이 때 } \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \text{ 대입하면}$$

$$-\sqrt{\frac{L}{2}} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 \sin \frac{n\pi}{L} x = -\frac{8\pi^2m}{\hbar^2} E \sin \frac{n\pi}{L} x \quad \therefore \quad E = \frac{(n\pi)^2 \hbar^2}{8\pi^2mL^2} = \frac{n^2 \pi^2 (\hbar^2/4\pi^2)}{2mL^2} = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$$

(solve 2) 허용되는 파장과 드브로이 식의 이용 ($\lambda = 2L/n$, $\lambda = h/p$)

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{(h/\lambda)^2}{2m} = \frac{n^2 \hbar^2 / 4L^2}{2m} = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$$

[Example 4.7(8ed)] The Lewis dot structure of 1,3-butadiene, $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ has two double bonds. Four electrons make two of the single bonds into double bonds, the extra pair of bonding electrons on the first, and the extra pair on the third of the carbon-carbon bonds. In a single particle-in-a-box model for these four electrons, they may move freely along all three carbon-carbon bonds in the molecule but not past the end C atoms. If you draw a line along the carbon-carbon-carbon backbone of this molecule and label the center of one end C atom as $x=0$, this corresponds to a one-dimensional box of length equal to the sum of the carbon-carbon bond lengths: C=C bond + C-C bond + C=C bond = $1.34 \text{ \AA} + 1.54 \text{ \AA} + 1.34 \text{ \AA} = 4.22 \text{ \AA}$. When two electrons are in the $n=1$ state and two electrons are in the $n=2$ state :

- (1) Calculate the most likely and the least likely positions of one of the $n=2$ electrons
- (2) Calculate the probability of finding this electron between the first two carbon atoms, between the second two carbon atoms, and between the third two atoms.