이공계 대학생을 위한 양자역학 입문 3: 하이젠베르크의 행렬역학과 슈뢰딩거 방정식의 동등성

필자는 저번에 쓴 이공계 대학생을 위한 양자역학 입문 마지막 부분에서 하이젠베르크의 양자역학은 $XP - PX = i\hbar$로부터 유도되는 것이고, 슈뢰딩거의 양자역학은 에너지 행렬이 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$인 것으로 부터 유도되는 것인데, 증명은 하지 않고, 두 형식이 동등하다고 했는데, 여기서 이것이 어떻게 이해될 수 있는지 보이겠다.

이 이해의 핵심은 X(위치 행렬)이 파동함수에 x를 곱해주는 것이고 P(운동량 행렬)이 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$에 해당하면 (즉 x로 미분해주고 $-i\hbar$를 곱해주는 것) $XP - PX = i\hbar$가 성립될 수 있다는 것이다. 일단 이것이 하이젠베르크의 양자역학에 어떻게 대응되는지 보자.

P라는 행렬을 벡터 $\psi(x)$에 가해주면, 우리는 $= -i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}$를 얻는다.

이 행렬에 다시 X를 가해주면, 우리는 $-i\hbar x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}$를 얻는다. 즉 다시 말해,

$$XP\psi(x) = -i\hbar x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} \tag{1}$$

이다. 마찬가지로, 우리는

$$X\psi(x) = x\psi(x) \tag{2}$$

$$PX\psi(x) = P(X\psi(x)) = -i\hbar\frac{\partial(x\psi(x))}{\partial x} = -i\hbar(\psi(x) + x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}) \tag{3}$$

을 얻는다.

여기서 한 발짝만 더 나아가면

$$(XP - PX)\psi(x) = i\hbar\psi(x) \tag{4}$$

즉, $XP - PX = i\hbar$인 것이다. 이것이 하이젠베르크의 행렬 역학이다. 즉, $XP - PX = i\hbar$이라는 조건이 X는 x로 곱해주고 운동량 연산자 P는 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$를 가해주는 것과 동등한 조건이라는 것이다.

그럼, 이제 슈뢰딩거 방정식을 유도해 보자. 고전 역학에서 역학적 에너지는

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{(mv)^2}{2m} + V(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{5}$$

이다.

이것을 연산자로 생각하면 p^2은 p를 벡터 $\psi(x)$에 두 번 가해준 것이고 $V(x)$는 벡터 $\psi(x)$에 $V(x)$를 곱한 것이다. 즉, p^2은 $-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$인 것이다. 즉 이것을 $2m$으로 나누어주고 여기에 $V(x)$를 곱한 것을 더해주면 에너지 행렬이 나온다. 즉 에너지 행렬을 벡터 $\psi(x)$에 가해주면,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) \tag{6}$$

가 된다.

이 에너지 행렬의 고유값과 고유벡터는 다음 방정식을 풂으로써 얻을 수 있다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \tag{7}$$

여기서 E는 고유값이다.

이 시점에서 교환자라는 것을 소개하겠다. A와 B의 교환자는 $AB-BA$로 정의되고 $[A,B]$로 표시한다. 이 표시 방법을 쓰면, 다음과 같이 쓸 수 있다:

$$[X,P]=i\hbar \tag{8}$$

지금까지는 일차원 문제만 고려했다. 그러나 우리가 사는 세상에서는 입자가 삼차원 안에서도 움직일 수 있으므로 이를 지금부터 고려하겠다. 이 경우, 위치 연산자 X, Y, Z는 각각 x, y, z를 곱하는 것에 대응한다. 또한, 이 경우 세 개의 운동량 연산자가 존재한다. 운동량의 x,y,z-성분으로 다음과 같이 표기한다. P_x,P_y,P_z. 물론, 이들은 다음과 같이 작용한다: $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$,$-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$,$-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$. 이러한 관계들을 이용하면, 쉽게 다음 식들을 확인할 수 있다:

$$[X,P_x]=[Y,P_y]=[Z,P_z]=i\hbar \tag{9}$$

$$[Y,P_x]=[Z,P_x]=[X,P_y]=[Z,P_y]=[X,P_z]=[Y,P_z]=0 \tag{10}$$

$$[X,Y]=[Y,Z]=[Z,X]=0 \tag{11}$$

$$[P_x,P_y]=[P_y,P_z]=[P_z,P_x]=0 \tag{12}$$

마지막 식은 편미분이 교환가능하다는 성질로부터 얻어질 수 있다.

한편으로, (5)는 다음 식이 된다:

$$E=\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}+V(x,y,z) \tag{13}$$

즉,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2})+V(x,y,z)\psi(x)=E\psi(x) \tag{14}$$

연습문제 1. 라이프니츠 법칙과 편미분의 성질로부터 $[Y,P_x]=0$을 증명하라. (힌트[1])

연습문제 2. 다음을 증명하라. (단, 여기서 c와 d는 스칼라이다.)

$$[A,B]=-[B,A], \qquad [A,A]=0 \tag{15}$$

$$[A,B+C]=[A,B]+[A,C], \qquad [A+B,C]=[A,C]+[B,C] \tag{16}$$

$$[A+B,C+D]=[A,C]+[B,C]+[A,D]+[B,D] \tag{17}$$

$$[cA,dB]=cd[A,B] \tag{18}$$

연습문제 3. (17)와 (18)를 이용해 다음을 증명해라.

$$[A+Bi,A-Bi]=i[B,A]-i[A,B]=2i[B,A] \tag{19}$$

[1] $[Y,P_x]\psi=0$를 증명하면 된다.

연습문제 4. 다음을 증명해라.

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \tag{20}$$

$$[D, EF] = [D, E]F + E[D, F] \tag{21}$$

연습문제 5. (20)과 (21)를 이용하여 다음을 증명하라:

$$[X^2, P_x] = 2i\hbar X \tag{22}$$

$$[X, P_x^2] = 2i\hbar P_x \tag{23}$$

연습문제 6. 라이프니츠 법칙과 $P\psi(x) = -i\hbar\dfrac{\partial\psi(x)}{\partial x}$를 이용하여, 다음을 증명하라:

$$[f(X), P_x] = i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x} \tag{24}$$

(Hint: $[f(X), P_x]\psi = i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi$를 보이면 된다.) (22)을 위 식을 이용해서 얻을 수도 있음을 주목해라.

요약

- A와 B의 교환자는 $[A, B] = AB - BA$으로 주어진다.
- $[X, P] = i\hbar$.
- 위치 연산자 X는 x를 곱해주는 것이다.
- 운동량 연산자 P_x는 $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$를 가해주는 것이다.
- $[A, B] = -[B, A], \qquad [A, A] = 0$
- $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$
- $[D, EF] = [D, E]F + E[D, F]$