이공계 대학생을 위한 양자역학 입문 4: 힐베르트 공간에서의 내적과 에르미트 행렬의 고유벡터의 직교성

힐베르트 공간이란 상태 벡터(파동함수)가 사는 복소벡터공간을 말한다. 여기서 '복소'란 계수가 복소수가 될 수 있다는 것을 의미한다. 이 글에서는 내적(스칼라곱)이 힐베르트 공간에서 어떻게 정의되는지를 보이고, 에르미트 행렬을 정의하고, 그 성질에 대해 설명하겠다.

첫째로, 다음과 같은 상태벡터에 대해 생각해보자. $|v>= (0.6{+}0.8i)|2J>$ 여기서 $|2J>$는 에너지행렬의 고유벡터로서 고유값이 $2J$이 됨을 의미한다. 간단하게 하기 위해 $|2J>$의 노름(norm)이 1이라고 하자. 여기서 '노름'이란 벡터의 크기를 말한다. 다시 말해, $\sqrt{<2J|2J>} = 1$를 의미한다. (만약 이러한 표기 방법에 친숙하지 않다면, 내가 쓴 '디락의 bra-ket notation'을 읽어 보라)

이제, 위에서 고려한 상태벡터 $|v>$의 노름을 계산해보자. 이는 $<v|v>$의 제곱근으로 주어진다. 순진하게 이를 계산한다면, $<v| = (0.6+0.8i) < 2J|$와 $|v>= (0.6+0.8i)|2J>$를 얻을 것이고 $<v|v>= (0.6+0.8i)^2 < 2J|2J>= (0.6{+}0.8i)^2$를 이용하면 우린 $<v|v>= (0.6{+}0.8i)^2 < 2J|2J>= (0.6+0.8i)^2$를 얻을 것이다. 그래서 노름은 $\sqrt{<v|v>} = 0.6+0.8i$가 될 것이다. 하지만 노름은 항상 음이 아닌 실수가 되어야 한다. (복소수를 값으로 가진 크기는 말이 안 된다.) 그렇지만 $|v>$의 놈을 $(0.6{+}0.8i)$의 크기와 $|2J>$의 크기를 곱한 값으로 정의해서 이 딜레마를 피해나갈 수 있다. $(0.6{+}0.8i)$의 크기는 $\sqrt{0.6^2+0.8^2} = 1$이므로 $|v>$의 놈은 1이다. 이것을 다른 방식으로 다음과 같이도 볼 수 있다.

$$1 = \sqrt{(0.6+0.8i)(0.6-0.8i)} = \sqrt{(0.6+0.8i)(0.6+0.8i)^*} \tag{1}$$

여기서 *는 복소켤레를 의미한다. 다시 말해, 만약 $<v|$를 $(0.6{+}0.8i)^* < 2J| = (0.6-0.8i) < 2J|$로 정의하면, 우린 다음과 같은 결과를 얻는다.

$$<v|v>= (0.6-0.8i)(0.6+0.8i) < 2J|2J>= 1 \tag{2}$$

그래서 만약 $|v>= a|w>$면 $<v| = a^* < w|$이다.

이것으로부터 얻을 수 있는 사실은 $< a|b>^* = < b|a>$이다. 이것을 엄밀하게 증명해보자. $|a>= \sum_i a_i|i>$ 그리고 $|b>= \sum_i b_i|i>$라고 정의하자. 여기서 $|i>$는 정규직교기저(orthogonal basis)를 의미한다. 정규직교란 i가 j와 다르면 $<i|j>= 0$ 같으면 1을 의미한다. 그럼 다음 식을 얻는다

$$< a|b >= \sum_i (a_i^*) b_i \tag{3}$$

한편

$$< b|a >= \sum_i (b_i^*) a_i = \sum_i [(a_i^*) b_i]^*. \tag{4}$$

그래서 우리는 $< a|b >^* = < b|a >$라고 결론을 내릴 수 있다. 여기로부터 곧바로 유도될 수 있는 성질은 $< v|v >$가 실수라는 것이다.($< v|v >^* = < v|v >$).

힐베르트 공간에서 에르미트 행렬이라는 행렬이 하는 역할은 실수벡터 공간에서 대칭행렬이 하는 역할과 비슷하다. 에르미트 행렬은 복소켤레가 전치와 같은 행렬로 정의된다. 다시 말해 자기수반(self-adjoint)인 행렬을 에르미트 행렬이라고 한다. (수반이란(adjoint) 전치 후 복소켤레를 해준 것을 의미한다.) 에르미트 행렬의 중요한 특징 중 하나는 고유벡터가 항상 실수라는 것이다. 이것에 대해 이미 "대칭행렬과 에르미트 행렬의 고유값과 고유벡터"에서 공부했지만, 브라켓 표기법(bra-ket notation)을 이용하여 다시 한 번 증명해보자. $|n >$을 에르미트 행렬 A의 고유값이 n인 고유벡터라 하자. 그럼:

$$< n|A|n > = < n|A^\dagger|n > = (< n|A^\dagger)|n > = (n^* < n|)n > = n^* < n|n > \tag{5}$$

여기서, 우리는 A가 자기수반이라는 것을 이용했다. 마찬가지로,

$$< n|A|n > = < n|(A|n >) = < n|(n|n >) = n < n|n > \tag{6}$$

그래서

$$n^* < n|n > = n < n|n > \tag{7}$$

결국 위 식은 $n^* = n$을 의미한다. 다시 말해 n은 실수다. 그래서 에르미트 행렬의 고유값은 항상 실수라는 결론에 도달했다. 에르미트 행렬의 이러한 성질은 매우 중요하다. 이전 글에서 모든 observable에 대응하는 행렬이 있으며, 관측의 결과값은 항상 그 행렬의 고유값으로 나온다고 언급했었다. 항상 관측값은 실수이므로, 고유값도 실수가 되어야 한다. ("이 연필의 길이가 "13+3i" cm이다"라는 문장은 말이 안 된다.) 그래서, obseravble에 대응하는 행렬은 항상 에르미트 행렬이라는 것을 이해할 수 있다.

이제, 에르미트 행렬의 고유벡터는 서로 직교한다는 것을 증명해보자. 역시, 이것을 그 전 글에서 증명했지만, 여기서는 브라켓 표기법(bra-ket notation)을 이용해서 증명할 것이다. $|n >$과 $|m >$이 에르미트 행렬 A의 고유값이 n과 m인 고유벡터라 하자. 그럼 $< n|A|m >$은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} < n|A|m > &= < n|A^\dagger|m > = (< n|A^\dagger)|m > = (n^* < n|)|m > \\ &= n* < n|m > = n < n|m > \end{aligned} \tag{8}$$

여기서 n이 에르미트 행렬의 고유값이므로 실수라는 사실을 썼다.($n^* = n$). 마찬가지로,

$$< n|A|m > = m < n|m > \tag{9}$$

두 식이 같은 값이므로, 다음을 얻는다.

$$n < n|m >= m < n|m > \tag{10}$$

이 말은 만약 n과 m이 같지 않다면, $< n|m >= 0$이라는 뜻이다. 그래서 에르미트 행렬의 모든 고유벡터는 고유값이 서로 다른 한 서로 직교한다는 것을 증명했다.

이것은 아주 중요한 성질이다. 이는 observable에 해당하는 에르미트 행렬의 고유벡터들을 직교기저로 쓸 수 있다는 것을 의미한다. (고유값이 연속적이지 않고 불연속적인 한 기저를 정규직교기저로 잡을 수 있다는 것이 알려져 있다. 다른 글에서 고유값이 연속적인 경우를 다룰 것이다.)

예를 들면, E_i들을 에너지 행렬의 고유값으으로 잡으면, 우린 다음과 같이 정규직교기저(orthonormal basis)를 잡을 수 있다.

$$\begin{aligned} &< E_i|E_j >= 0 \quad \text{if} \quad E_i \neq E_j \\ &< E_i|E_j >= 1 \quad \text{if} \quad E_i = E_j \end{aligned} \tag{11}$$

(만약 원래 $< E_i|E_i >= A$이고 여기서 A가 0이 아니라면, 다음과 같이 $|E_i >$를 '정규화(normalize)'하여 같은 고유값 E_i의 새 고유벡터를 얻을 수 있다:

$$|E_i(\text{new}) >= \frac{|E_i >}{\sqrt{A}} \tag{12}$$

분명히, 이 벡터는 고유값이 그전 고유값과 같다. 왜냐하면,

$$E|E_i(\text{new}) >= E\left(\frac{|Ei >}{\sqrt{A}}\right) = E_i\frac{|E_i >}{\sqrt{A}} = E_i|E_i(\text{new}) > \tag{13}$$

또한 노름이 1이다. 왜냐하면,

$$< E_i(\text{new})|E_i(\text{new}) >= \frac{< E_i|E_i >}{(\sqrt{A})^2} = 1. \tag{14}$$

이게 '정규화'가 의미하는 바이다.

우린 이 고유기저를 이용해 임의의 벡터 $|\psi >$를 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$|\psi >= \sum_i \psi(E_i)|E_i > \tag{15}$$

이 관계식은 약간 다르게 표현될 수 있다. 나의 이전 글 "bra-ket notation" 에서 completeness relation이 다음과 같이 표현되었다는 것을 상기해라.

$$1 = \sum_i |E_i >< E_i| \tag{16}$$

여기에 $|\psi >$를 양변에 곱하면, 다음 식을 얻는다.

$$|\psi >= \sum_i < E_i|\psi > |E_i > \tag{17}$$

그래서 결국, $\psi(E_i) =< E_i|\psi >$인 것이다. 다시 말해, 이 기저에서 벡터의 좌표값은 단순히 이 벡터와 기저 벡터의 내적(dot product)으로 주어진다. 이건 새로운 결과는 아닐 것이다. 에를 들면, $v = 3\hat{x} + 4\hat{y} + 5\hat{z}$라면 $5 = v \cdot \hat{z}$다. 이게 가능한 이유는 기저가 정규직교이기 때문이다.

연습문제 1: $|a >= (2 + 3i)|b >$일 때 $< a|$를 $< b|$를 이용해 표현해보라.

연습문제 2: $< 2\mathrm{J}|2\mathrm{J} >=< 3\mathrm{J}|3\mathrm{J} >= 1$가 성립된다고 할 때 다음 상태벡터 ψ가 잘 정규화되었다는 것을 확인하라. (즉, 크기가 1이라는 것을 확인하라.)

$$|\psi >= \left(\frac{1-i}{\sqrt{6}}\right)|2\mathrm{J} > + \left(\frac{2}{\sqrt{6}}\right)|3\mathrm{J} > \tag{18}$$

연습문제 3: 만약 한 물체의 파동함수가 위의 상태벡터로 주어질 경우 관찰자가 그 물체의 에너지를 2J로 관찰할 확률은 얼마인가? 또한, 3J일 때에는 얼마인가?

연습문제 4: observable에 대응하는 행렬을 에르미트 행렬이어야 하므로, 위치 행렬과 운동량행렬은 에르미트 행렬이다. 이를 고려하여, 다음 연산자들이 에르미트행렬인가 아닌가를 가려내라.

$$XP_x, \qquad XY, \qquad XP_y, \qquad P_xP_y \tag{19}$$