이공계 대학생을 위한 양자역학 입문 1: observable과 고유치

본 글은 선형대수학과 고등학교 물리를 아는 사람을 위하여 쓰여졌다. 즉, 이공계 대학생 2학년 이상을 염두에 두고 쓰여진 글이다.

양자역학에는 'observable'이란 것이 있다. 'observable'이란 관측할 수 있는 것이란 뜻이다. observable에는 에너지(energy), 운동량(momentum), 각운동량(angular momentum), 위치 (position)등이 있다. 이 observable에는 각각 대응되는 linear operator이 있다. Linear Operator를 다른 말로 이야기하면 행렬(matrix)이다. 즉, 에너지 행렬, 운동량 행렬, 각운동량 행렬, 위치 행렬 같은 것이 있다. 이들 모두 행렬이나 물리학계에서는 보통 끝에 이와 같이 행렬이라고 붙여 부르지 않고 연산자(operator)라는 말을 붙여서 부른다. 예를 들어 energy operator, momentum operator, angular moentum operator, postion operator.

그럼 각각의 행렬에는 고유값(eigenvalue)과 고유벡터(eigenvector)가 있을 것이다. 이 때 관측 되는 값은 항상 물체의 고유값(eigenvalue)을 갖는 걸로 알려져 있다.

예를 들어 어느 물체의 에너지를 재고 싶다고 하자. 그러면 이 물체의 위치에너지와 운동에너지가 있을 것이다. 위치 에너지와 운동 에너지를 합한 것이 총에너지가 될 것일 텐데 이 총에너지에 대응하는 에너지 연산자 (energy operator)또는 에너지 행렬(energy matrix)이 있을 것이다. 이 에너지 행렬의 고유값(eigenvalue)을 계산해 보면 특정한 값이 나올 것이다. 이 값만이 그 물체의 에너지가 될 수 있을 것이다.

예를 들어 물체의 에너지의 행렬의 고유값(eigenvector)가 2J, 3J, 5J 이라면, 이 물체의 에너지는 2J, 3J, 5J을 가질 수 있지만, 4J은 무슨 일이 있어도 가질 수 없는 것이다.

실제로 예를 들자면 수소 원자를 들수 있다. 화학을 조금이라도 공부한 사람이라면 수소원자의 에너지 준위 $E = -R/n^2$ 으로 나타내지는 것을 알 것이다. 여기서 n은 자연수고 R은 상수이다. 이 때 수소 원자의 에너지가 항상 이 특정한 준위의 값을 갖는다는 것은 잘 알려진 사실이다. 그 이유는 수소 원자의 에너지 행렬이 $-R/n^2$이라는 고유값(eigenvalue)를 갖기 때문이다. 물론 여기서 n은 무한히 커질 수 있고, 따라서 고유값도 무한히 많다. 고유값의 개수와 행렬의 크기는 일치하므로, 여기서 에너지 행렬은 무한대$\times$무한대의 정사각형 모양의 행렬인 것을 알 수 있다. (사실 양자역학에서 다루는 거의 모든 linear operator(행렬 또는 matrix)는 무한대$\times$무한대의 행렬이다.)

또한 양자역학에서는 물체 하나 하나 마다 벡터(vector)가 하나씩 대응된다. 이 벡터를 파동함수(wave function)이라고 한다.

이 vector가 양자역학과 어떤 관련이 있는지 설명을 하겠다.

예를 들어 앞의 예에서 말했던, 2J, 3J, 5J을 에너지 행렬의 고유값(eigenvalue)으로 갖는 물체의 예를 들어 보자. 이 때 각각의 고유벡터(eigenvector)를 $|2J>$, $|3J>$, $|5J>$로 표시하자. (양자역학에서는 보통 벡터를 화살표로 표시하는 대신 이런 식으로 표현한다. 이 표시 방법을 디락(Dirac)의 브라켓(bracket) notation이라고 한다. 더 알고 싶다면 나의 글 'bra-ket notation'을 참고하라)

어떠한 물체가 $|2J> + |3J>$의 형태로 있다고 하자. 즉 반은 2J인 상태, 반은 3J인 상태라고 하자. 그럼 관측을 했을 때 이 물체의 에너지가 2J이 될 확률은 50%이고 3J이 될 확률은 50%이다. 2.5J이 될 확률은 0이다. 그리고 관측을 하는 순간 이 물체의 벡터는 그 에너지의 고유함수(eigenvector)로 바뀐다. 예를 들어 관측했을 때 2J이 나왔다면 이 물체의 벡터(파동함수)가 $|2J>$로 바뀐다.

더 깊은 이해를 위해 예를 들어보자. 어떠한 물체의 벡터(파동함수)가 $(0.6)|2J> + (0.8)|5J>$이라고 하자. 그럼 0.6의 제곱은 0.36, 0.8의 제곱은 0.64고 0.36과 0.64의 합은 1이지 않는가. 그렇다면 이 물체의 에너지가 2J이 될 확률은 36%, 5J이 될 확률은 64%이다. 그리고 관측을 하는 순간 36%의 확률로 파동함수가 $|2J>$로 바뀌고 64%의 확률로 파동함수가 $|5J>$로 바뀐다. 그래서 만약 $|2J>$로 바뀌었다고 하면, 다시 이 물체의 에너지를 재면 100% 2J이 나온다. (이러한 양자역학의 해석 방법을 '코펜하겐 해석'이라고 한다.)

그럼 이 물체의 운동량이나 위치, 각운동량 등 다른 observable의 값은 어떻게 될까? 그것도 에너지의 경우와 마찬가지이다. 이 물체에 대응하는 벡터(파동함수)를 observable의 고유벡터(eigenvector)로 전개(expansion)해 주고 각각의 계수를 제곱해 준 값을 그렇게 얻어진 계수들의 제곱들의 합으로 나누어 준 것이 이 물체가 그 값의 observable을 가질 확률이다. (왜 확률이 계수에 비례 하지 않고 계수의 제곱에 비례하는지는 '양자역학 입문 5'를 읽으면 자연스러워질 것이다. 이 시점에서는 그냥 계수는 음의 값을 가질 수 있지만 계수의 제곱은 음이 될 수 없다는 점에 주목하자. 확률은 음이 될 수 없기 때문에, 음의 값이 될 수도 있는 계수에 비례한다는 것은 말이 되지 않는다. 게다가 일반물리에서 광학을 배웠다면 빛의 세기는 진폭에 비례하지 않고, 진폭의 제곱에 비례한다는 것을 기억하자.)

덧붙이자면 운동량과 위치 행렬은 서로 commute하지 않는다고 알려져 있다. 이 말은 운동량 행렬을 P, 위치 행렬을 X라고 한다면 $XP - PX$가 0이 아니라는 뜻이다. 그래서 운동량과 위치를 동시에 결정할 수는 없는 것이다. 사실 $XP - PX$가 $ih/2\pi$와 같은데, (h는 플랑크 상수) 여기로부터 그 유명한 하이젠베르크의 불확정성 원리를 유도할 수 있다.

하이젠베르크의 양자역학이라는 것은 모든 것을 $XP - PX = ih/(2\pi) = i\hbar$라는 것으로부터 유도하는 것이고, 슈뢰딩거의 양자역학은 에너지 행렬이 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$는 것으로부터 유도하는 것이다. 여기서 $V(x)$는 위치에너지이고 예를 들어 파동함수(물체에 대응되는 벡터)가 $\psi(x)$라고 하면

(여기서 이것이 함수처럼 보이기는 하지만, 사실 벡터이기도 하다. 다음 글에서 이것에 대해 설명하겠다.) 이 벡터에 에너지 행렬을 곱해준 것은 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x)$가 되는 것이다.

놀랍게도 하이젠베르크의 양자역학과 슈뢰딩거의 양자역학은 아주 달라보여도 서로 동등하고 항상 같은 결과를 주는 것으로 증명되어 있다. 그러나 실제로는 많은 경우 슈뢰딩거의 양자역학을 푸는 것이 더 유용하고 편리하다. 나의 양자역학에 관한 세번째 글에서 이 동등성을 증명할 것이다. 슈뢰딩거가 이를 생각해내는데 몇 달이 걸렸지만, 이 증명은 간단하다.

연습문제 1: 한 입자의 파동함수가 $3|2\mathrm{J}> -|4\mathrm{J}>$라 하자. 그럼 관찰자가 이 입자가 4J의 에너지가 있다고 관측할 확률은 얼마인가?