

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

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

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

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

이다. 마찬가지로, 우리는

$$X\psi(x) = x\psi(x) \quad (2)$$

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

을 얻는다.

여기서 한 발짝만 더 나아가면

$$(XP - PX)\psi(x) = i\hbar\psi(x) \quad (4)$$

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

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

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

이다.

이것을 연산자로 생각하면 p^2 은 p 를 벡터 $\psi(x)$ 에 두 번 가해준 것이고 $V(x)$ 는 벡터 $\psi(x)$ 에 $V(x)$ 를 곱한 것이다. 즉, p^2 은 $-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ 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,

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

가 된다.

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

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

여기서 E 는 고유값이다.

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

$$[X, P] = i\hbar \quad (8)$$

지금까지는 일차원 문제만 고려했다. 그러나 우리가 사는 세상에서는 입자가 삼차원 안에서도 움직일 수 있으므로 이를 지금부터 고려하겠다. 이 경우, 위치 연산자 X, Y, Z 는 각각 x, y, z 를 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:

$$[X, P_x] = [Y, P_y] = [Z, P_z] = i\hbar \quad (9)$$

$$[Y, P_x] = [Z, P_x] = [X, P_y] = [Z, P_y] = [X, P_z] = [Y, P_z] = 0 \quad (10)$$

$$[X, Y] = [Y, Z] = [Z, X] = 0 \quad (11)$$

$$[P_x, P_y] = [P_y, P_z] = [P_z, P_x] = 0 \quad (12)$$

마지막 식은 편미분이 교환가능하다는 성질로부터 얻어질 수 있다.

한편으로, (5)는 다음 식이 된다:

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

즉,

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

연습문제 1. 라이프니츠 법칙과 편미분의 성질로부터 $[Y, P_x] = 0$ 을 증명하라. (힌트¹)

연습문제 2. 다음을 증명하라

$$[A, B] = -[B, A], \quad [A, A] = 0 \quad (15)$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (16)$$

$$[D, EF] = [D, E]F + E[D, F] \quad (17)$$

연습문제 3. (16)과 (17)를 이용하여 다음을 증명하라:

$$[X^2, P_x] = 2i\hbar X \quad (18)$$

$$[X, P_x^2] = 2i\hbar P_x \quad (19)$$

연습문제 4. 라이프니츠 법칙과 $P\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}$ 를 이용하여, 다음을 증명하라:

$$[f(X), P_x] = i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x} \quad (20)$$

(Hint: $[f(X), P_x]\psi = i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi$ 를 보이면 된다.) (18)을 위 식을 이용해서 얻을 수도 있음을 주목해라.

¹ $[Y, P_x]\psi = 0$ 를 증명하면 된다.