이공계 대학생을 위한 양자역학 입문 5: 주어진 observable의 기대값

이 글에서는 상태 벡터를 알 경우 주어진 observable의 기대값을 구하는 법에 대해 설명하겠다. 이를 위해, 면이 여섯 개인 주사위를 이용해 기대값이 무엇인지 알아 보자. 그 기대값은 다음과 같이 계산될 수 있다.

$$< \text{Die} >= 1 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{6} + 3 \times \frac{1}{6} + 4 \times \frac{1}{6} + 5 \times \frac{1}{6} + 6 \times \frac{1}{6} \tag{1}$$

고로 기대값은 가능한 값에 그 값이 될 확률을 곱한 후 이를 다 더해 줌으로써 얻어질 수 있다. 이를 양자역학의 경우에 대응해보자.

상태벡터가 다음과 같이 주어졌다고 하자

$$|\psi >= 0.6|2\text{J} > +0.8|5\text{J} > \tag{2}$$

여기서 $|x\text{J} >$는 그전과 같이 에너지 행렬의 고유값 xJ의 규격화된 고유벡터라 하자. (i.e. $< x\text{J}|x\text{J} >= 1$) 다음과 같이 상태함수 $|\psi >$도 규격화되어 있음에 유의하라:

$$< \psi|\psi >= 0.6^2 + 0.8^2 = 1 \tag{3}$$

물리에서는 보통 상태벡터가 규격화 되어 있다고 가정한다. 왜냐하면 노름이 무한히 크지 않는한, 항상 규격화시킬 수 있고, 규격화된 벡터를 이용하는 것이 많이 편리하기 때문이다.

나의 양자역학에 관한 첫번째 글로부터, 에너지가 2J이 될 확률이 0.36 이며 5J이 될 확률은 0.64임을 알 수 있다. 그래서 기대값은 다음과 같다.

$$< E >= 0.6^2 \times 2\text{J} + 0.8^2 \times 5\text{J} = 3.92 \tag{4}$$

그렇긴 하지만, 똑같은 것이 다음과 같이 계산될 수 있다:

$$< E >=< \psi|E|\psi >= (0.6 < 2\text{J}| + 0.8 < 5\text{J}|)(2 \times 0.6|2\text{J} > +5 \times 0.8|5\text{J} >) \tag{5}$$

그래서 E의 기대값은 $< \psi|E|\psi >$로 주어진다는 결론에 도달한다. 다른 observable의 경우도 똑같은 방식으로 기대값을 구할 수 있다. (5)의 계산은 기저(basis)를 E의 고유벡터로 잡고 계산하였지만, 수식 $< \psi|E|\psi >$에는 기저가 안 나타나 있으므로 기저에 의존하지 않는다. 그래서 다른 기저에서 똑같은 것을 계산하면 똑같은 값을 얻는다.

연습문제 1: 힐베르트 공간이 이차원인 계(system)를 생각해보자. 그리고 정규직교기저(orthonormal basis)가 $|A>$와 $|B>$로 주어진다고 하자. 이때 에르미트 연산자 H가 이 기저벡터들에 다음과 같이 작용한다고 하자:

$$\begin{aligned} H|A> &= 4|A> -3i|B> \\ H|B> &= 3i|A> +2|B> \end{aligned} \tag{6}$$

다음과 같은 표기법을 쓸 때,

$$|A> = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |B> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

H를 2×2 행렬로 표기하고, 상태벡터가 $|A>$로 주어질 때 H의 기대값을 구하라.