이공계 대학생을 위한 양자역학 입문 6: 위치 기저와 디락 델타 함수

위치 연산자는 에너지 연산자와 아주 다른 성질을 갖고 있다. 한 입자의 위치는 연속적인 값을 가질 수 있다. 예를 들어 0.4567 미터나 3.112938475$\cdots$ 미터 같은 값들이 가능하다. 그래서, 위치 연산자는 연속적인 고유값을 갖는다. 이런 사실을 염두해 두고 x를 고유값으로 갖는 위치 연산자의 고유벡터를 $|x>$라 하자. 즉,

$$\hat{x}|x>=x|x> \tag{1}$$

여기서 $\hat{x}$는 위치 연산자며 x는 고유값이다. 이러한 표기법을 쓰면 completeness relation은 나의 bra-ket 표기법 글에 잠시 언급했듯이 다음과 같이 표기될 수 있다

$$1=\int_{-\infty}^{\infty} dx|x><x| \tag{2}$$

적분범위는 마이너스 무한대부터 플러스 무한대까지다. 왜냐하면, 위치값은 이 둘 값의 어느 값도 될 수 있기 때문이다. 이 관계식을 이용하면, 임의의 상태 벡터 $|\beta>$에 대해 다음과 같은 식을 얻을 수 있다:

$$|\beta>=\int_{-\infty}^{\infty} dx<x|\beta>|x> \tag{3}$$

만약 $\beta(x)\equiv<x|\beta>$라고 정의한다면:

$$|\beta>=\int_{-\infty}^{\infty} dx\beta(x)|x> \tag{4}$$

다시 말해, $\beta(x)$는 $|\beta>$에 대한 기저 $|x>$의 계수이다.

이는 양자역학 입문 4의 마지막에 나왔던 부분을 기억하면 쉽게 이해할 수 있을 것이다. 즉,

$$|\psi>=\sum_i<E_i|\psi>|E_i>=\sum_i\psi(E_i)|E_i> \tag{5}$$

여기서 $\psi(E_i)$는 벡터 $|\psi>$의 기저$|E_i>$에 대한 계수다.

마찬가지로, ket 벡터 $<\alpha|$에 대해서는 다음을 얻는다:

$$<\alpha|=\int_{-\infty}^{\infty} dx<\alpha|x><x|=\int_{-\infty}^{\infty} dx\alpha^*(x)<x| \tag{6}$$

여기서 $<\alpha|x>=<x|\alpha>^*=\alpha^*(x)$라는 사실을 이용했다.

이제 α와 β의 내적을 구해보자:

$$<\alpha|\beta>=\int_{-\infty}^{\infty}dx<\alpha|x><x|\beta>=\int_{-\infty}^{\infty}dx\alpha^*(x)\beta(x) \tag{7}$$

이 식을 보면 양자역학 입문 네번째 글에 나왔던 식이 생각나야 한다. 즉, $|i>$이 정규직교기저이고 $|A>=\sum_i a_i|i>$와 n $|B>=\sum_i b_i|i>$라면 $<A|B>=\sum_i a_i^* b_i$을 얻는다.

위치 x_a와 위치 x_b사이에 입자가 발견될 확률을 구하기 위해, 나의 첫번째 양자역학 입문 글을 생각해보자. 거기서, 나는 주어진 고유값을 관측결과로 얻을 확률은 그에 해당하는 고유벡터의 계수의 제곱을 모든 고유벡터의 계수의 제곱의 합으로 나누어 준거라 설명하였다. 엄밀히 말하자면, 나의 양자역학에 대한 네번째 글이 의미하듯, 계수의 제곱이 중요한 것이 아니라 계수의 크기의 제곱이 중요한 것이다. 상태 벡터가 $\sum_j c_j|j>$로 주어진다면, 이는 수식으로 다음과 같이 표기될 수 있다:

$$P_i=\frac{|c_i|^2}{\sum_j|c_j|^2}=\frac{c_i c_i^*}{\sum_j c_j c_j^*} \tag{8}$$

상태 벡터가 규격화 되어 있을 경우, 분모가 1이므로, P_i는 단순히 $|c_i|^2$로 주어진다.

위치 연산자의 경우, 확률은 다음과 같다

$$P=\int_{x_a}^{x_b}dx\phi^*(x)\phi(x) \tag{9}$$

여기서 $|\phi>$ 가 대응하는 입자의 규격화된 상태벡터라고 가정했다. (즉,. $<\phi|\phi>=\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*(x)\phi(x)=1$). 이는 확률이 x_a와 x_b사이의 '계수"의 제곱을 모두 '더해' 준 것으로 해석될 수 있다. 즉, x와 $x+dx$ 사이에서 입자가 발견될 확률은 $\phi^*(x)\phi(x)dx$로 주어진다. 또한, 이는 우리가 주었던 규격화 조건은 마이너스 무한대와 플러스 무한대 사이에 입자가 발견될 확률이 1인 것으로 해석 가능하다. 즉, 입자를 아무 곳에서나 발견할 수 있는 확률이 1이란 것이다. 이 해석은 (즉, 확률을 모두 더하면 1이 되는 것)은 나중에 time evolution 연산자의 유니타리성에 대해 이야기할 때 중요한 역할을 할 것이다.

이제 주제를 약간 바꿔서 디락 델타 함수에 대해 이야기하겠다.. $|x_0>$의 파동함수 $\phi(x)$는 무엇이 될까? 당연히, 이 상태벡터에 해당하는 입자의 위치를 재면 100%의 확률로 x_0을 얻을 것이다. 그래서 $x=x_0$이 아니라면 $\phi(x)$는 0일 것이다. 이를 염두해 두고 수학적으로 $\phi(x)$를 계산해보자.

$$|x_0>=\int_{-\infty}^{\infty}<x|x_0>|x>dx \tag{10}$$

즉, $\phi(x)=<x|x_0>$이다. 또한, 우린 위치 연산자가 에르미트 행렬임을 알고 있다. 이 말은 고유값이 다른한 고유벡터가 서로 직교한다는 뜻이다. 이는

$x = x_0$이 (즉, $x - x_0 = 0$) 아니라면 $< x|x_0 >= 0$임을 의미한다. 이는 우리의 그전 분석과 일치한다. 또한, $< x|x_0 >$이 $(x - x_0)$만의 함수라는 점에 주목해라. 그래서 이를 다음과 같이 $\delta(x - x_0)$를 이용, 표기할 수 있다:

$$< x|x_0 >= \delta(x - x_0) \tag{11}$$

이 함수의 이름은 디락 델타 함수다. 이제 $x - x_0 = 0$일 때 이 함수 값을 계산해보자. 이를 위해 (10)로 돌아와 보자:

$$|x_0 >= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)|x > dx \tag{12}$$

만약 $x \neq x_0$이면 $\delta(x - x_0) = 0$ 이므로 적분의 값은 $x = x_0$일 때에만 기여된다. 즉, 위 식의 우변은 어떤 특정한 c에 대해 $c|x_0 >$가 된다. 또한 좌변으로부터 c가 1이 되어야 함은 명백하다. 아주 작은 ϵ에 대해 다음을 얻는다

$$\begin{aligned} |x_0 > \quad &= \int_{x=x_0-\epsilon}^{x=x_0+\epsilon} \delta(x - x_0)|x > dx \\ &= \int_{x=x_0-\epsilon}^{x=x_0+\epsilon} \delta(x - x_0)|x_0 > dx \end{aligned} \tag{13}$$

그래서 결론은

$$\begin{aligned} 1 \quad &= \int_{x=x_0-\epsilon}^{x=x_0+\epsilon} \delta(x - x_0)dx \\ &= \int_{x-x_0=-\epsilon}^{x-x_0=\epsilon} \delta(x - x_0)dx \\ &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x)dx \qquad (14) \\ 1 \quad &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx \qquad (15) \end{aligned}$$

위 식에서 두번째 줄로부터 세번째 줄로 넘어갈 때 변수를 바꿔주었고, 세번째 줄에서 네번째 줄로 갈 때에는 $x = 0$이 아닌 이상 $\delta(x) = 0$이란 점을 썼다. 결론적으로 디락 델타 함수는 다음 두 조건으로 정의된다. 첫째, $x \neq 0$이면 $\delta(x) = 0$. 둘째, 식 (15).

위치 연산자의 고유벡터가 $|x >$ 규격화되지 않는다는 것도 언급하자. 만약 그렇지 않다면 $< x|x >$가 1이었을 것이다. 이는 말이 안 된다. 왜냐하면, 만약 $< x|x >= 1$ (즉,.$\delta(x - x = 0) = 1$ 였다면 (14)로부터, 다음 결과가 나온다:

$$\begin{aligned} 1 \quad &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} 1dx = 0 \\ &= 2\epsilon \\ &= 0 \end{aligned} \tag{16}$$

사실 (14)이 $\delta(0) = \infty$를 의미한다는 것을 보는 것은 쉽다. 이것을 아주 작은 범위에 대해 적분해준 것이 유한한 값을 가지기 때문이다. 결론적으로, 위치 연산자의 고유벡터는 고유값이 연속적인 값을 갖기 때문에 규격화되어 있지 않다. 사실, 이 규격화 조건을 강요하는 것은 부자연스럽다..

마지막으로, 디락 델타 함수의 다른 성질 하나를 보여 주겠다.

$$f(x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x - x_0) \tag{17}$$

이유는 다음과 같다. $\delta(x - x_0)$는 $x = x_0$일 때에만 0이 아닌 값을 갖기 때문에, 이 적분은 $x = x_0$일 때에만 기여한다. 그래서, 그 전과 마찬가지로, 다음을 얻는다:

$$\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} f(x)\delta(x - x_0) \tag{18}$$

$$= \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} f(x_0)\delta(x - x_0) \tag{19}$$

$$= f(x_0)\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \delta(x - x_0) \tag{20}$$

$$= f(x_0) \tag{21}$$

여기서 마지막 스텝에서는 (14)를 이용했다.

나중 글에서 위치 기저와 운동량 기저에 대해 이야기할 때, 디락 델타 함수에 대해 다시 한 번 이야기하겠다.

연습문제 1. 다음을 계산하라:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx(x^2 + 4x)\delta(x - 4), \qquad \int_{-3}^{3} dx(x^2 - 4x)\delta(x + 4) \tag{22}$$

연습문제 2. 다음 관계식들이 맞다고 스스로 확신해보라.

$$\delta(-x) = \delta(x), \qquad \delta(3x) = \frac{1}{3}\delta(x), \qquad \delta(-3x) = \frac{1}{3}\delta(x) \tag{23}$$

연습문제 3. 몇몇 책들은 다음과 같은 표기 방식을 쓰기도 한다: $\delta(x, y) \equiv \delta(x - y)$. 이 경우, 다음을 계산해라:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(y)\delta(x, y)dy \tag{24}$$

연습문제 4. 다음을 계산해라:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - f(y, z))\delta(y - g(z))\delta(z)dxdydz \tag{25}$$

몇몇 책들은 다음과 같은 표기 방식을 쓰기도 한다: $\delta^3(\vec{x}) \equiv \delta(x)\delta(y)\delta(z)$.

연습문제 5. 헤비사이드 계단 함수(Heaviside step function) θ는 다음과 같이 주어진다:

$$\theta(x) = \int_{-\infty}^{x} \delta(x) dx \tag{26}$$

이 때, 다음을 계산해라:

$$\theta(-50), \qquad \theta(-30), \qquad \theta(5), \qquad \theta(0.3) \tag{27}$$

연습문제 6. 다음을 계산해라 (힌트[1]):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x^2 - 4x)(x+2) dx \tag{28}$$

[1] $x^2 - 4x = x(x-4)$를 이용해라. 그리고 디락 델타 함수가 언제 0이 되지 않나 생각해보고, 연습문제 2의 예와 비슷한 공식을 이용해 보라.