

기 초 양 자 역 학

《INTRODUCTION TO QUANTUM MECHANICS》

<FORMULATION>

□ □ 과 학 고 2 학 년 □ □ □
2016. 12. 07 - 2018. 08. 25

제 1장 파동함수

1. 1. Schrodinger 방정식

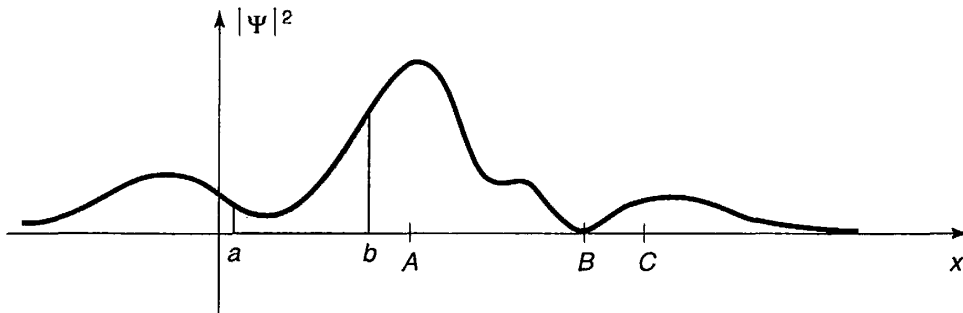
① Schrodinger 방정식

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

*초기 파동함수 $\Psi(x, 0)$ 가 주어지면 모든 순간의 $\Psi(x, t)$ 가 결정된다.

1. 2. 통계학적 해석

① 파동함수의 통계학적 해석



$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \text{시간 } t \text{에서 입자를 영역 } [a, b] \text{에서 발견할 확률}$$

1)해석: 위치 A근방에서 발견할 확률은 상대적으로 매우 높고, B근처에서 발견될 확률은 거의 없다.

2)조건: 당연히 확률밀도함수의 조건, $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$ 이어야 한다.

② 측정에 관한 해석

1. 사실주의적 입장

입자는 측정 직전, **특정위치**에 있었다.

*양자역학은 불완전한 이론: 실제로 존재하는 입자의 위치를 알 수 없으므로

2. 정통주의적 입장:

입자는 실제로 아무 곳에도 있지 않았다.¹⁾

*코펜하겐 해석: ‘**관측행위**’가 입자의 위치를 결정지었다. (**입자의 에너지상태조차도**)

1) 실제로 입자가 존재하지 않았다는 의미가 아니다. 입자의 위치가 특정 지어진 상태로 있지 않았다는 의미이다.

3. 불가지론적 입장

입자의 위치는 아무런 의미가 없다.²⁾

⇒ 여러 실험적인 검증을 통해 ‘정통주의적 입장’ 이 옳음이 확인되었다.

1. 4. 규격화

① 파동함수의 규격화 조건

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

② 규격화 유지

Proof 1

$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx$ 이고, 우변의 적분을 간단히 정리하면

$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$ 인데, 이것을 복소 켈레의 슈뢰딩거방정식을 이용하여,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V\Psi, \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V\Psi^*$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) \quad \leftarrow \text{함수의 변수변환}$$

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \left[\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \right]_{-\infty}^{+\infty} = 0 ; \text{ 규격화를 유지한다}$$

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0$$

※이것은 양자역학을 뒷받침하는 매우 중요한 근거이다!!

2) 측정을 한 순간 이미 입자는 ‘그 위치’ 에 존재하지 않게 되기 때문이다. 하지만 이것은 측정 이전 입자가 정확한 위치를 가지는지 아닌지의 여부가 차이를 야기하지 않는다는 것을 전제한다.

1. 5. 운동량

① 위치의 기댓값

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx$$

※해석: 동일상태에서의 측정반복의 평균이 아니라, 동일한 상태의 입자들에 대한 측정의 평균치이다.

② 속도의 기댓값

Proof 2

$$\langle v \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) dx$$

이제 부분적분을 사용하여, $\int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) dx$ 만 따로 계산하자.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) dx = \left[x \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) dx$$

$$\text{따라서 } \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) dx \text{ 이다.}$$

$$\langle v \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} = - \frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

③ 운동량 연산자

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx$$

해석: $\langle x \rangle$ 와 마찬가지로 $\langle p \rangle$ 도 동일한 상태의 입자들에 대한 평균이다.

운동량 연산자: $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ 로 정의된다. 여기서, $\langle \Psi | \hat{p} \Psi \rangle$ 와 $\langle \Psi | \hat{p} \Psi \rangle$ 는 완전히 일치한다.(Hermitian Op.)

④ 일반화 물리량의 연산자

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* Q \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx$$

*간단한 예시들:

$$\text{운동에너지} - \langle T \rangle = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi dx \quad \text{변위제곱} - \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Psi(x, t)|^2 dx$$

1. 6. 불확정성의 원리

① 불확정성의 원리 (변위-운동량)

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

〔※일반화된 불확정성 원리〕

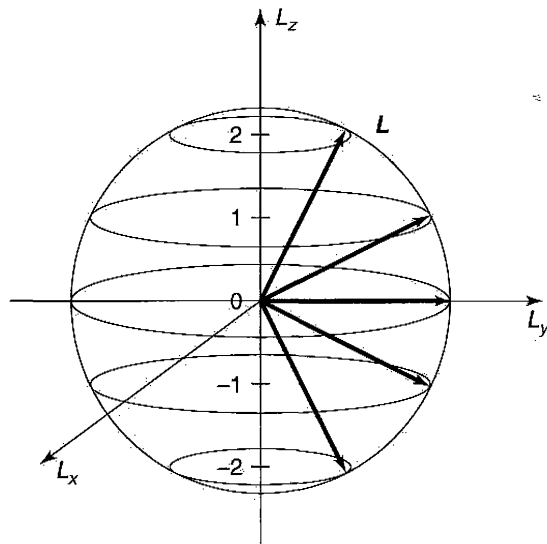
1. 수식화: $\sigma_A \sigma_B \geq \left[\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right]^2$

2. 해석: ‘측정행위’ 이외에는 아무런 제약을 주지 않았다. 즉, 측정행위 그 자체로 불확정성이 있다.

② 불확정성의 원리 (각운동량-각운동량)

$$\sigma_{L_x} \sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_z \rangle|$$

*해석: L_z 가 결정되더라도 L_x, L_y 는 결정되지 않는다.



제 2장 시간에 무관한 슈뢰딩거 방정식

2. 1. 정지된 상태

㉠ 시간에 무관한 슈뢰딩거 방정식

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

※ 슈뢰딩거 방정식이 변분가능하기 위해서는 결정된 상태(determinate state)³⁾이어야 한다.

㉡ 변수분리 가능한 해들의 성질

1. 변수분리가능한 해들은 정지된 상태를 나타낸다.

$$|\Psi(x, t)|^2 = \psi^* e^{+iEt/\hbar} \psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2$$

2. 변수분리가능한 해들은 물리계의 총 에너지가 정확하게 측정된다.

— Proof 3 —

$$\sigma_H^2 = \langle \Psi | (\hat{H}^2 - \langle H \rangle^2) \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{H}^4 \Psi \rangle - 2E^2 \langle \Psi | \hat{H}^2 \Psi \rangle + E^4 \langle \Psi | \Psi \rangle \text{인데,}$$

슈뢰딩거 방정식 $\hat{H}\Psi = E\Psi$ 으로부터, $\langle \Psi | \hat{H}^n \Psi \rangle = E^n$ 이므로

$$\sigma_H^2 = E^4 - 2E^4 + E^4 = 0; \text{ 에너지의 측정값이 항상 동일}$$

3. 슈뢰딩거 방정식의 일반해는 변수분리가능한 해들의 선형결합이다.

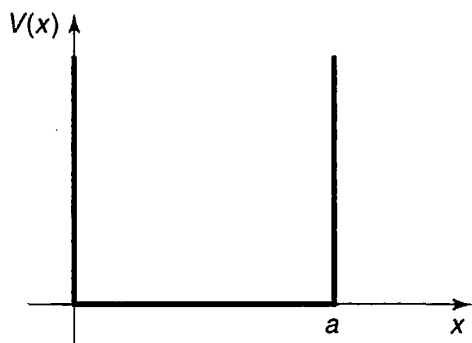
$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

※완전성: $\psi_n(x)$ 는 슈뢰딩거 방정식만으로 알 수 있고, $\Psi(x, 0)$ 으로 c_n 이 결정되므로 초기조건만으로 이후의 모든 운동상태가 결정된다.

3) Determinate state: 동일한 상태에 있는 입자들에 대하여 모두 동일한 측정값을 얻는 상태. 헤밀토니안의 경우 한 상태에서 모두 동일한 에너지가 측정된다.

2. 2. 무한히 깊은 사각 퍼텐셜 우물

① 슈뢰딩거 방정식



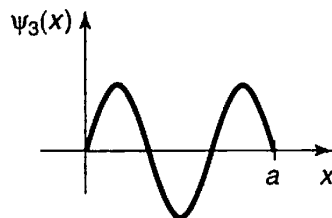
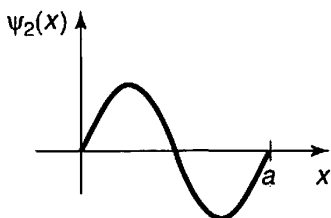
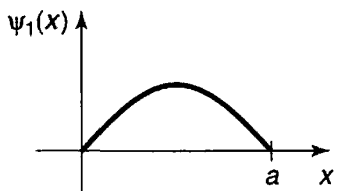
$$\text{-퍼텐셜: } V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (x < 0, x > a) \end{cases}$$

$$\text{-존재영역: } 0 < x < a \quad 4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (0 < x < a)$$

* $V \rightarrow \infty$ 의 영역에서는 입자가 존재할 수 없으므로, $\psi(x)=0$ 이라 두면 된다.

② 파동함수



$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

*파동함수의 성질

1. n 의 홀/짝 여부에 따라 기함수와 우함수의 성질을 갖는다.
2. n 이 증가함에 따라 마디(node)의 개수가 증가한다.
3. 파동함수들이 서로 직교(Orthogonal)한다.

$$\int \psi_n(x)^* \psi_m(x) dx = 0 \quad (n \neq m)$$

4. 파동함수들은 완전(Complete)하다.

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

4) 경계 $x=0, a$ 에서는 무한히 큰 힘을 받기 때문이다.

③ 에너지

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

*에너지가 양자화되어 있음에 유의하라!!⁵⁾

④ 푸리에의 묘기 (Fourier's Trick)

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \Leftrightarrow c_n = \int \psi_n(x)^* f(x) dx$$

1) 직교성 $\int \psi_n(x)^* \psi_m(x) dx = \delta_{n,m}$ 에 근거하여, 직교성을 갖는 물리계에서만 성립한다.

2) 초기 $\Psi(x, 0)$ 는 반드시 ψ_n 의 형태를 띄어야 하는 것은 아니다. $f(x)$ 가 푸리에 급수이기만 하면 된다.⁶⁾

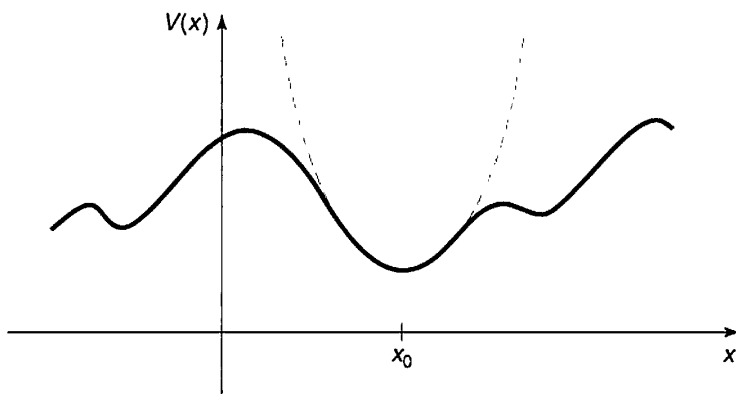
⑤ 총에너지의 기댓값

$$\langle H \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \sum c_m \psi_m | \hat{H} \sum c_n \psi_n \rangle = \sum \sum c_m^* c_n E_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum |c_n|^2 E_n$$

*해석: 이 물리계는 $E_1, E_2, \dots$ 의 양자화된 에너지를 가지고, E_n 을 가질 확률은 $|c_n|^2$ 이다.⁷⁾

2. 3. 조화진동자 (Harmonic Oscillator)-!!⁸⁾

① 용수철의 퍼텐셜



$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots \cong \frac{1}{2} V''(x_0)(x - x_0)^2$$

5) 양자역학에서는 크게 속박상태(bound state)와 산란상태(scattering state)를 다룬다.

6) 이는 Dirichlet의 정리에 근거한다. 당연히 푸리에 급수로 표현되는 어떠한 형태의 함수들도 허용된다.(예: $f(x) = Ax(x-a)$ 등)

7) 이 경우 양자화된 물리계에 대한 것이다. 연속적인 스펙트럼의 경우 적분으로 표현되어야 한다.

8) 2차원 조화진동자의 양자역학적 해석에 관하여는 ‘平成20年度東京大學大學院理學係研究科物理學專攻 修士課程入學試験’를 참고하라.

② 슈뢰딩거 방정식

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = E\psi$$

③ 대수적 풀이-(사다리연산자)

(1) 사다리연산자

-올림연산자: 파동함수의 에너지 상태를 한 단계($\hbar\omega$ 만큼) 높여주는 변환

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} x - i \frac{1}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right)$$

-내림연산자: 파동함수의 에너지 상태를 한 단계($\hbar\omega$ 만큼) 낮춰주는 변환

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} x + i \frac{1}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right)$$

*올림연산자와 내림연산자는 서로 **헤르미트 켤레**이다.

(2) 해밀토니안의 인수분해

Solution 1-1

해밀토니안: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + m\omega^2 x^2$ ← 연산자를 분해하여 1계 미분방정식으로 만든다.

사다리연산자: $a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} x + i \frac{1}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right)$, $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} x - i \frac{1}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right)$

교환자: $[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = \frac{1}{2\hbar} \left(m\omega x^2 + \frac{\hat{p}^2}{m\omega} - i[x, \hat{p}] - m\omega x^2 - \frac{\hat{p}^2}{m\omega} - i[x, \hat{p}] \right)$,

$$[a, a^\dagger] = -\frac{i}{\hbar} [x, \hat{p}] = -\frac{i}{\hbar} (i\hbar) = 1, \quad a^\dagger a = aa^\dagger - 1$$

이 결과를 이용하여 계의 해밀토니안을 사다리연산자를 이용하여 표현해 보자.

$$aa^\dagger = \frac{1}{2\hbar} \left(m\omega x^2 + \frac{\hat{p}^2}{m\omega} \right) - \frac{i}{2\hbar} [x, \hat{p}] = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m} \right) + \frac{1}{2} = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} + \frac{1}{2}$$

$$a^\dagger a = \frac{1}{2\hbar} \left(m\omega x^2 + \frac{\hat{p}^2}{m\omega} \right) + \frac{i}{2\hbar} [x, \hat{p}] = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m} \right) - \frac{1}{2} = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} - \frac{1}{2}$$

$$\therefore \hat{H} = \hbar\omega \left(aa^\dagger - \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

*해밀토니안이 두 연산자의 곱으로 분해되었다.

(2) 조화진동자 해의 성질

Solution 1-2

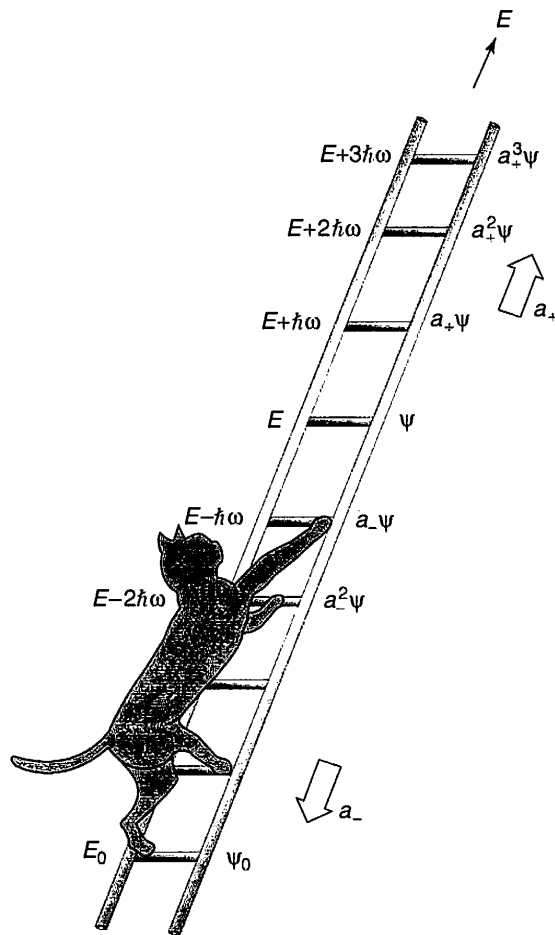
슈뢰딩거 방정식: $H\psi = E\psi \Leftrightarrow \hbar\omega\left(aa^\dagger - \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi$ ←여기서 a 와 $a^\dagger$ 에 주목하라!!!

파동함수: $\Psi = a\psi$, $\Psi^\dagger = a^\dagger\psi$ ←이 새로운 파동함수도 슈뢰딩거방정식을 만족시키는지 확인하겠다.

$$H(a\psi) = \hbar\omega\left(aa^\dagger - \frac{1}{2}\right)(a\psi) = \hbar\omega a\left(a^\dagger a - \frac{1}{2}\right)\psi = \hbar\omega a\left(aa^\dagger - 1 - \frac{1}{2}\right)\psi = (E - \hbar\omega)\psi$$

$$H(a^\dagger\psi) = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)(a^\dagger\psi) = \hbar\omega a^\dagger\left(aa^\dagger - \frac{1}{2}\right)\psi = \hbar\omega a^\dagger\left(a^\dagger a + 1 + \frac{1}{2}\right)\psi = (E + \hbar\omega)\psi$$

<해석>: $\Psi = a\psi$ 는 $\hbar\omega$ 만큼 높은, $\Psi = a^\dagger\psi$ 는 $\hbar\omega$ 만큼 낮은 에너지상태를 갖는다.



※체크 사항

1. 일단 1개의 해만 찾으면, 그것보다 $\hbar\omega$ 만큼 높거나 낮은 해들을 계속 찾아나갈 수 있다.
2. 모든 해의 규격화상수가 같으리라는 보장은 없다.
3. 에너지가 가장 낮은 바닥상태 ψ_0 가 존재하여 $a\psi_0 = 0$ 이어야만 한다.

(3) 바닥상태의 파동함수 및 에너지

Solution 1-3

$$\text{바닥상태 조건: } a\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} x + i \frac{1}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right) \psi_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \psi_0 + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d\psi_0}{dx} = 0$$

$$\text{파동함수: } \int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = - \int \frac{m\omega}{\hbar} x^2 dx \Leftrightarrow \ln \psi_0 = - \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + C \Leftrightarrow \psi_0 = A \exp \left[- \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right]$$

$$\text{규격화 조건: } \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \int |\psi_0(x)|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[- \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \right] dx = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

$$A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left[- \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right]$$

$$\text{에너지: } H\psi_0 = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \psi_0 = \left(\frac{1}{2} \hbar\omega \right) \psi_0, \quad E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad \leftarrow \text{바닥상태 조건 } a\psi_0 = 0 \text{에 유의!!}$$

※에너지가 양자화 되어 있다.

(4) 모든 상태의 파동함수, 에너지

Solution 1-4

$$\text{-올림연산자: } a^\dagger \psi_n = c_n \psi_{n+1} \quad \leftarrow \text{파동함수의 에너지 상태를 한 단계 올려준다.}$$

$$\text{-내림연산자: } a \psi_n = d_n \psi_{n-1} \quad \leftarrow \text{파동함수의 에너지 상태를 한 단계 낮춰준다.}$$

$$\text{-슈뢰딩거방정식: } \begin{cases} H\psi = \hbar\omega \left(aa^\dagger - \frac{1}{2} \right) \psi = E_n \psi = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \psi \Leftrightarrow aa^\dagger \psi = n + 1 \\ H\psi = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \psi = E_n \psi = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \psi \Leftrightarrow a^\dagger a \psi = n \end{cases}$$

$$\text{-규격화: } \begin{cases} |c_n|^2 = \langle a^\dagger \psi_n | a^\dagger \psi_n \rangle = \langle aa^\dagger \psi_n | \psi_n \rangle = n + 1 \langle \psi_n | \psi_n \rangle = n + 1 \\ |d_n|^2 = \langle a \psi_n | a \psi_n \rangle = \langle a^\dagger a \psi_n | \psi_n \rangle = n \langle \psi_n | \psi_n \rangle = n \end{cases}$$

$$a^\dagger \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad a \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}$$

이제 이 조건들을 사용하여 모든 상태를 바닥상태와 올림연산자만으로 나타내자.

$$(a^\dagger)^n \psi_0 = \sqrt{1} (a^\dagger)^{n-1} \psi_1 = \sqrt{2!} (a^\dagger)^{n-2} \psi_2 = \dots = \sqrt{n!} \psi_n \Leftrightarrow \psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_0$$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_0, \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

*바닥상태의 에너지로부터 연산 $a^\dagger$ 을 계속하면 모든 상태를 찾을 수 있고, 이 상태의 $\Delta E = \hbar\omega$ 이다.

③ 파동함수의 성질

(1) 파동함수

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) \exp\left[-\frac{\xi^2}{2}\right], \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

(2) 파동함수의 직교성

Proof 4

$$\langle \psi_m | a^\dagger a \psi_n \rangle = n \langle \psi_m | \psi_n \rangle \quad \leftarrow \text{앞에서 } aa^\dagger \psi = n+1, \quad a^\dagger a \psi = n \text{을 적용하였다. (1)}$$

한편, 중간연산방법을 달리하였을 때 또한, 같은 결과를 얻어야 한다.

$$\langle \psi_m | a^\dagger a \psi_n \rangle = \langle a \psi_m | a \psi_n \rangle = \langle a^\dagger a \psi_m | \psi_n \rangle = m \langle \psi_m | \psi_n \rangle \text{을 얻는다. (2)}$$

따라서 (1)과 (2)의 결론을 비교하여, $n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = m \langle \psi_m | \psi_n \rangle$ 이어야 한다.

$$\begin{cases} \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_m dx = 0 & (n \neq m) \\ \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_m dx = 1 & (n = m) \end{cases} \quad \leftarrow \text{규격화조건에 의해 } \langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 \text{ 이어야 한다.}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_m dx = \delta_{mn} \quad (\text{정규직교성})$$

(3) 위치연산자와 운동량 연산자

-위치연산자

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a)$$

*<예시>: 가령 $\langle x^2 \rangle$ 의 경우, $\langle x^2 \rangle = \langle \psi | \hat{x}^2 \psi \rangle = \left\langle \psi \left| \frac{\hbar}{2m\omega} (a^{\dagger 2} + a^\dagger a + aa^\dagger + a^2) \psi \right. \right\rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$ 이다.

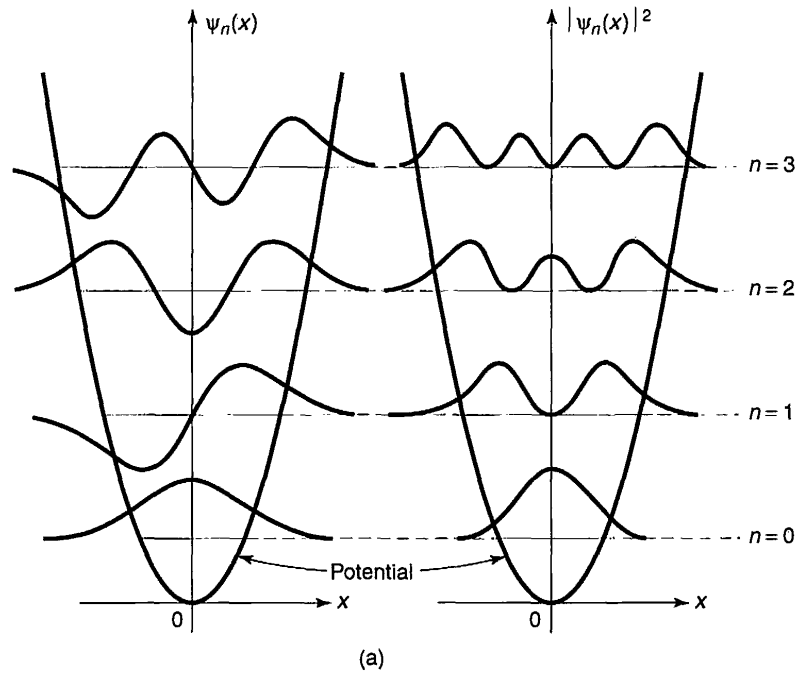
-운동량연산자

$$\hat{p} = i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a^\dagger - a)$$

*<예시>: 가령 $\langle p^2 \rangle$ 의 경우, $\langle p^2 \rangle = \langle \psi | \hat{p}^2 \psi \rangle = \left\langle \psi \left| -\frac{\hbar m\omega}{2} (a^{\dagger 2} - a^\dagger a - aa^\dagger + a^2) \psi \right. \right\rangle = \hbar m\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$ 이다.⁹⁾

9) 사실 이것을 에렌페스트의 정리를 확인할 수 있는 한 예이다.

(4) 파동함수의 형태



파동함수는 n 이 홀수이면 기함수, 파동함수는 n 이 짝수이면 우함수의 형태를 갖는다

(5) 헤르미트 다항식

-점화관계

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi)$$

-로드리게스의 공식

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2}$$