양자역학

Taejoon Whang

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat voluptatem. Ut enim aeque doleamus animo, cum corpore dolemus, fieri.

March 06, 2025

서 문

<숙지 사항>

1. 아무리 교양부터라고 하더라도 고등학교 수학, 과학을 이해하는 정도의 수준은 필요합니다.
2. 용어는 영어를 우선으로 하며, 한국어 용어는 이상한 경우 적히지 않을 수도 있습니다.
3. 이 문서는 Griffiths, Ziok 등의 양자역학 교재와 각종 교양서, 인터넷 자료, MIT의 8.03 교양 양자역학 과정, 그리고 불변의 고전인 <Feynman Lectures on Physics>를 참고했습니다.

Contents

1. 시작하기 전에

앞으로 등장할 개념과 수학적 기반을 이해하기 위한 사전 지식들입니다.

1.1. 양자란?

양자(量子), 영어로는 quantum. 복수로는 quanta입니다. quantity에서 유래했고, 한자로도 양과 관련있는 무언가인 것 같습니다.

> **Definition 1.1.1 (양자)** 물리량의 최소 단위

양자는 ~자로 끝나서 무슨 입자인가 싶으실 수도 있겠지만, 정의는 어떤 물리량의 최소 단위입니다. 즉, 양자라는 개념은 실질적이기보다는 추상적, 관념적인 것입니다. 어떤 것이 '양자화(quantized)' 되었다는 것은 특정 물리량이 더 이상 분해될 수 없는 기본 단위가 있다는 것으로, 양자역학의 범위에 들어왔다는 것, 양자역학의 언어로 표현된다는 것 정도가 됩니다.

이 정의를 보면 어느 정도 과학적 사고가 전개되시는 독자들은 의문이 들 겁니다.

1. 아날로그 세상은 연속적이라 물리량에는 최소 단위가 없는 것 아닌가?
2. 최소라고 하는데, 얼마나 작은 것인가? 분자? 원자? 핵자? 쿼크??
3. 각주로 달리는 것은 부연 설명 또는 참고 용도이므로 일단 이해할 수 없다면 넘겨도 좋습니다.

먼저, 양자역학에서 확실한 것은 없습니다. 심지어 그 이론 자체도 확실하게 증명되어 있지 않아요. 사실, 대부분의 논리는 추측에 가까운 과정으로 전개되었습니다. 양자역학에서 가장 기본적인 가정은 '양자화 이론'이 아니라 '양자화 가설(hypothesis of quantization)'입니다.

나머지 양자역학 이론들은 이 양자 가설을 기반으로 쌓아 올려졌습니다. 언제든지 모순이 발생할 수 있다는 것입니다.

그럼에도 양자 가설을 채택하는 이유는, 실제 관측 결과, 실제 현상을 너무 잘 설명하기 때문입니다. 일부 이론들에서 리만 가설을 참이라고 가정하는 것과 비슷한 것입니다. 대부분의 식들도 합리적인 추측과 비슷한 과정을 통해 도출된 것이 많습니다. 이런 걸 postulate(가정)라고 합니다.

아직까지는 의문이 많이 생길 것인데, 정확한 것은 더 자세한 내용이 등장할 때 설명하도록 하겠습니다.

1.2. 수학적 기반

1.2.1. 미적분 표기법에 대하여

$f(x)$를 x에 대해 미분했을 때, 우리는 보통 이렇게 표현하고는 합니다.

$$f'(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f(x) \tag{1.1}$$

여기서 $f'(x)$는 라그랑주(Joseph Louis Lagrange)의 표기법입니다. d를 사용하는 표기[1]는 라이프니츠(Gottfried Wilhelm von Lebniz)의 표기입니다. 참고로, 뉴턴(Isaac Newton)은 시간 t에 대한 미분을 $\dot{f}$와 같이 표기했습니다[2].

이계도함수는 각 표기법에 따라 표현하면 아래와 같습니다.

$$\text{라그랑주} : f''(x) \qquad \text{라이프니츠:} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} f(x) \qquad \text{뉴턴:} \ddot{f} \tag{1.2}$$

라이프니츠는 처음에, 미분계수를 아래와 같이 무한소의 분수로 나타낼 수 있다고 했습니다[3].

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} \tag{1.3}$$

그의 주장에 모호한 부분이 있었지만, 여전히 여러 상황에서 이들은 분수와 같이 행동한다는 점, 그리고 특히 다변수 상황에서 미적분 연산을 명확하게 표시할 수 있다는 점에서 현재까지 분수가 아닌, 미적분 연산 자체에 대한 표기로서 널리 사용되고 있습니다.

$\mathrm{d}y/\mathrm{d}x$를 읽을 때는, 이것이 분수가 아니기 때문에 '$\mathrm{d}x$ 분(分)의 $\mathrm{d}y$'가 아니라 '$\mathrm{d}y$ $\mathrm{d}x$'라고 읽습니다.

그런데, 수학적으로 엄밀히 들어가면 사실 이것은 분수가 맞습니다! 다만, $\mathrm{d}x$ 등은 일반적인 수가 아니라 미분 형식(differential form)입니다. 하지만 이 정의와 논증은 미분기하학과 선형대수학 등의 이해를 수반해야하므로, 여기서 다루기에는 너무 복잡하니 넘어가겠습니다.

적분 표기도 라이프니츠의 것을 따릅니다. $f(x)$를 x에 대해 적분할 때, 아래와 같이 표기하죠.

---

[1]여러 곳에서 표기를 $\frac{dy}{dx}$와 같이 하지만, 사실 d를 연산자로 본다면 정확한 표기는 기울이지 않고 $\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}$로 하는 것이 맞습니다.

[2]뉴턴은 뉴턴 역학을 정립하는 과정에서 미적분을 발명했습니다.

[3]$\mathrm{d}x$는 x의 무한소인 반면, Δx는 x의 증분으로 유한소입니다.

$$\int f(x)\,\mathrm{d}x \tag{1.4}$$

이것은 사실 구분구적법에 따라 아래와 같습니다.

$$\lim_{\Delta x \to 0} \sum_i x_i\,\Delta x \tag{1.5}$$

1.2.2. 편미분

편미분(偏微分, partial derivative)은 대상으로 하는 문자 외에 나머지 항들을 모두 상수로 취급하고 미분하는 방법입니다.

백문(百聞)이 불여일견(不如一見), 직접 봅시다.

$$f(x, y) \coloneqq x^2 + y^2 - r^2 \tag{1.6}$$

이 함수를 x에 대해 일반적으로 미분하면 다음과 같습니다.

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = 2x + 2y \cdot y' \tag{1.7}$$

하지만 이를 x에 대해 편미분하면 다음과 같습니다.

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2x \tag{1.8}$$

이때 ∂은 편미분 기호로, partial, round, partial d, round d, del[4] 등 여러 가지로 부릅니다. 이 책에서는 명칭 언급이 필요한 경우 partial로 통일하겠습니다.

이 원리를 적용해, $f(x, y)$를 x에 대해서 미분하는 과정을 다시 써보면 다음과 같습니다.

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} \tag{1.9}$$

이 원리에 따라, 아래와 같은 식이 성립합니다.

$$\mathrm{d}f(x, y, z) = f_x\,\mathrm{d}x + f_y\,\mathrm{d}y + f_z\,\mathrm{d}z \qquad \text{where } f_u = \frac{\partial f}{\partial u} \tag{1.10}$$

이때, $\mathrm{d}f$를 f의 전미분(全微分, total derivative)이라고 합니다. 이것을 확장시켜 엄밀히 정의한 것이 미분 형식입니다.

[4] 델 연산자(∇)와 혼동 가능성이 있습니다.

1.2.3. 연산자

연산자(operator)란 특정한 항에 연산을 작용하는 것입니다. 사실 이것은 수학적으로 올바른 정의는 아닙니다[5]. 우리가 가장 잘 아는 연산자는 사칙연산의 기호들입니다.

$$3 + 2 = 5 \tag{1.11}$$

위 식에서 +가 바로 연산자 입니다. +는 앞의 항과 뒤의 항, 두 개의 항을 피연산항으로 가집니다. 이런 것을 이항 연산자(binary operator)라고 합니다. 이것을 우리에게 익숙한 함수 꼴로 굳이 나타내면 아래와 같습니다.

$$\begin{gathered} + : \mathbb{C} \times \mathbb{C} \longrightarrow \mathbb{C} \\ +(3, 2) = 5 \quad \leftarrow \text{(이 표기는 수학적으로 부정확합니다.)} \end{gathered} \tag{1.12}$$

다른 대표적인 연산자로는 미분 연산자가 있습니다. 별게 아니고, 갖다 붙이면 미분하라는 뜻이 됩니다.

$$D \coloneqq \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \tag{1.13}$$

위와 같이 정의한다면, Df는 f를 x에 대해 미분하라는 뜻이 되겠습니다. 미분 연산자는 덧셈과 달리 피연산항이 하나밖에 없습니다. 양자역학에서 등장하는 연산자는 대부분 피연산항이 하나밖에 없을 것입니다. 연산자라는 것을 표시하기 위해 $\hat{x}$와 같이 문자 위에 ^를 찍어 나타냅니다. $\hat{x}$는 x hat이라고 읽습니다. 예를 들어, 운동량 연산자는 아래와 같습니다.

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla} \tag{1.14}$$

아직 각 기호의 의미는 몰라도 됩니다. 지금은 이것이 파동함수라는 어떤 상태 함수에 작용하여 운동량을 알아내는데 쓰인다는 것 정도만 대충 알면 될 것 같습니다.

1.2.4. 디랙 표기법

디랙(Paul Dirac)이 고안한 브라-켓 표기법(bra-ket notation)은 벡터를 표기하는 새로운 방법입니다. 이름의 유래는 ⟨⟩(bracket)를 반으로 잘라서 ⟨를 bra, ⟩를 ket이라고 하는데서 왔습니다.

먼저, 우리가 아는 벡터 표기법은 아래와 같습니다. 굵은 글씨로 쓰는 것은 위에 화살표를 쓰는 것보다 가독성이 좋다는 장점이 있으며, 기울일지 바로 세울지는 정해져 있지 않습니다.

[5]광의(廣義)로, 연산자란 정의역과 공역이 동일한 함수입니다.

$$\vec{v} = \boldsymbol{v} = \mathbf{v} \tag{1.15}$$

켓을 사용한 표기는 아래와 같습니다.

$$\vec{v} = |v\rangle \tag{1.16}$$

브라는 일종의 연산자로서, 옆에 오는 항과의 내적(inner product, dot product)을 의미합니다.

$$\vec{v} \cdot \{\} = \langle \mathbf{v}, \{\} \rangle = \langle v| \tag{1.17}$$

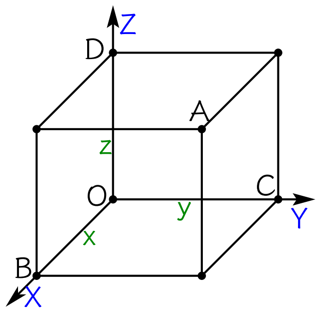
어떤 벡터가 브라에 결합하면 아래와 같이 됩니다.

$$\langle a||b\rangle = \langle a|b\rangle = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \tag{1.18}$$

이러한 브라-켓 표기법으로, 힐베르트 공간의 원소인 벡터를 통해 양자 상태를 $|\psi\rangle$처럼 표현하게 됩니다. 이것에 대한 이야기도 나중에 자세히 하겠습니다.

1.2.5. 좌표계

1.2.5.1. 직교 좌표계



데카르트 좌표계(Cartesian coordinate system)이라고도 합니다 .가장 간단하고 직관적인 좌표계이죠. 3차원에서는 원점과 x, y, z 축이 주어지면 다음과 같이 한 점 P의 좌표를 유일하게 특정할 수 있습니다.

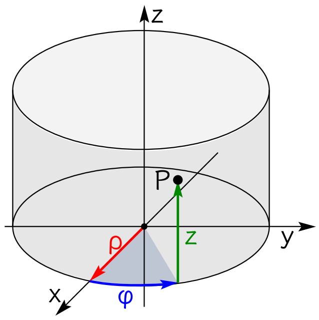
$$\mathrm{P}(x, y, z) \tag{1.19}$$

변수의 범위는 당연히 다음과 같죠.

$$-\infty < x, y, z < +\infty \tag{1.20}$$

1.2.5.2. 원통 좌표계

영어로는 cylindrical coordinate system 입니다.



특정한 점 P를 경계에 포함하는 원통을 생각해보면, 인수 세 개로 점을 나타낼 수 있습니다. 원통의 반지름 ρ, x 축과의 편각 φ, 높이 z만 있으면 됩니다.

$$P(\rho, \varphi, z) \tag{1.21}$$

이 좌표계는 사실 2차원 극좌표계(polar coordinate system)를 z축에 대해서만 쌓아 올린 것입니다. 즉 $(x, y, z$는 (ρ, φ, z)로 아래와 같이 나타낼 수 있습니다.

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \varphi \\ y &= \rho \sin \varphi \\ z &= z \end{aligned} \tag{1.22}$$

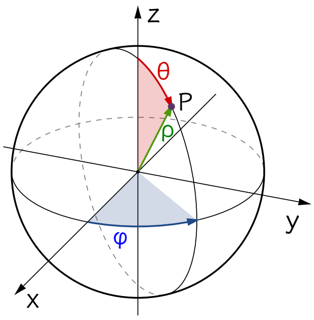
반대로도 해보면 아래와 같습니다.

$$\begin{aligned} \rho &= \sqrt{x^2 + y^2} \\ \varphi &= \arctan \frac{y}{x} \\ z &= z \end{aligned} \tag{1.23}$$

변수의 범위는 다음과 같습니다.

$$\begin{aligned} 0 \leq \rho &< \infty \\ 0 \leq \varphi &< 2\pi \\ -\infty < z &< +\infty \end{aligned} \tag{1.24}$$

1.2.5.3. 구면 좌표계



영어로는 spherical coordinate system입니다. 특정한 점 P는 반지름 ρ, z 축과의 편각 θ, x축 과의 편각 φ로 표현될 수 있습니다.

$$\mathrm{P}(\rho, \theta, \varphi) \tag{1.25}$$

각 변수를 (x, y, z)를 (ρ, θ, φ)에 대해 나타내 봅시다.

$$\begin{aligned} x &= \rho \sin\theta \cos\varphi \\ y &= \rho \sin\theta \sin\varphi \\ z &= \rho \cos\theta \end{aligned} \tag{1.26}$$

반대로도 해봅시다.

$$\begin{aligned} \rho &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta &= \arctan \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \\ \varphi &= \arctan \frac{y}{x} \end{aligned} \tag{1.27}$$

변수의 범위는 아래와 같을 겁니다.

$$\begin{aligned} 0 \leq \rho &< +\infty \\ 0 \leq \theta &\leq \pi \\ 0 \leq \varphi &< 2\pi \end{aligned} \tag{1.28}$$

θ와 φ가 함께 회전하므로 θ는 180° 범위로 충분하겠죠.

1.2.6. 델 연산자

델(del) 연산자는 이렇게 ∇ 역삼각형 모양으로 생겼습니다. 이 기호 자체는 나블라(nabla)라고 하고, 하프 모양에서 따왔다고 합니다.

네 가지가 있는데, 종류는 아래와 같습니다.

$$
\begin{aligned}
\text{Gradient} &: \boldsymbol{\nabla} \\
\text{Divergence} &: \boldsymbol{\nabla}\cdot \\
\text{Curl} &: \boldsymbol{\nabla}\times \\
\text{Laplacian} &: \boldsymbol{\nabla}^2
\end{aligned}
\tag{1.29}
$$

델 연산자는 벡터이기 때문에, 단순히 ∇ 외에도 $\vec{\nabla}$ 또는 $\boldsymbol{\nabla}$로 표기합니다.

divergence와 curl의 $\cdot$ (dot product)와 $\times$ (cross product)는 벡터의 내적과 외적을 의미합니다. 연산을 더 자세히 알아보기 위해 f를 스칼라 함수, $\mathbf{A} = \left(A_x, A_y, A_z\right)$라고 합시다. 이때 네 가지 연산은 다음과 같습니다.

$$
\boldsymbol{\nabla} f = \left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}, \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}y}, \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z}\right) \tag{1.30}
$$

$$
\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A} = \frac{\mathrm{d}A_x}{\mathrm{d}x} + \frac{\mathrm{d}A_y}{\mathrm{d}y} + \frac{\mathrm{d}A_z}{\mathrm{d}z} \tag{1.31}
$$

$$
\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A} = \begin{vmatrix} \hat{\imath} & \hat{\jmath} & \hat{k} \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} & \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y} & \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} = \left(\frac{\mathrm{d}A_z}{\mathrm{d}y} - \frac{\mathrm{d}A_y}{\mathrm{d}z}, \frac{\mathrm{d}A_x}{\mathrm{d}z} - \frac{\mathrm{d}A_z}{\mathrm{d}x}, \frac{\mathrm{d}A_y}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}A_x}{\mathrm{d}y}\right) \tag{1.32}
$$

$$
\boldsymbol{\nabla}^2 f = \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}y^2} + \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}z^2} \tag{1.33}
$$

x, y, z는 각각 독립된 변수이기 때문에 편미분을 쓰지 않아도 상관없지만 앞으로 혼동을 피하기 위해 편미분으로 재정의합시다.

$$
\boldsymbol{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{1.34}
$$

1.2.7. 오일러 항등식

수학에 관심이 있는 독자들이라면 한 번쯤은 보았을 식입니다.

$$
e^{ix} = \cos x + i \sin x \tag{1.35}
$$

$$
e^{i\pi} + 1 = 0 \tag{1.36}
$$

식 (1.36) 은 "오일러 공식"이라고 불리며 아름다운 수학적 결론으로는 훌륭하지만, 물리에서는 그 원형인 오일러 항등식[식 (1.35)]에 더 관심이 있습니다.

cos과 sin으로 파동을 표현할 수 있으면서도 e^x의 성질에 따라 미분이 편리하고 특정 상황에서는 전기장과 자기장의 진행을 실수부와 허수부로 동시에 나타낼 수 있다는 점에서 장점이 많아 널리 이용됩니다.

간단히 증명해보도록 하겠습니다.

먼저, $\cos\theta + i\sin\theta$는 복소평면(complex plane)에서의 극형식(polar form)이라고 합니다. 편각(argument) θ를 매개변수로 받아 복소평면 위의 점 $x+yi$를 나타내기 때문입니다. 이때, $x = \cos\theta, y = \sin\theta$입니다. 이상을 정리하면 다음과 같습니다.

Theorem 1.2.1 (오일러 항등식)

$$\begin{aligned} z &:= x + yi \qquad \text{where } x, y \in \mathbb{R},\ i = \sqrt{-1} \\ \arg z &=: \theta \end{aligned} \tag{1.37}$$

$$\begin{aligned} x &= \cos\theta \\ y &= \sin\theta \\ \therefore z &= \cos\theta + i\sin\theta \end{aligned} \tag{1.38}$$

Proof.

$$z = \cos\theta + i\sin\theta \tag{1.39}$$

z가 θ에 따라 변하므로 이 값을 함수 $f(\theta)$라고 합시다. 이제 이 함수에 대해 알아보기 위해 먼저 θ에 $x+y$를 대입해 봅시다.

$$\begin{aligned} f(x+y) &= \cos(x+y) + i\sin(x+y) \\ &= \cos x\cos y - \sin x\sin y + i(\sin x\cos y + \cos x\sin y) \\ &= \cos x(\cos y + i\sin y) + \sin x(i\cos y - \sin y) \\ &= \cos x(\cos y + i\sin y) + \sin x\big(i\cos y + i^2\sin y\big) \\ &= \cos x(\cos y + i\sin y) + i\sin x(\cos y + i\sin y) \\ &= (\cos x + i\sin x)(\cos y + i\sin y) \\ &= f(x)f(y) \end{aligned} \tag{1.40}$$

$$\therefore f(x+y) = f(x)f(y) \tag{1.41}$$

또, $f(0) = 1 + 0i = 1$입니다.

그런데, $f(x)$는 식 (1.41) 이고 $f(0) = 1$이며, cos과 sin은 여각 관계이므로 모든 실수 x에 대해서 $f(x) \neq 0$이므로, 코시 함수 방정식에 의해 $f(x)$는 지수함수입니다.

$$\cos x + i \sin x = c^x \qquad \text{where } \ c \neq 0 \tag{1.42}$$

양변을 미분하면 아래와 같습니다.

$$c^x \ln c = -\sin x + i \cos x \tag{1.43}$$

이 식은 x에 대한 항등식이 되므로, $x = 0$을 대입하면

$$\ln c = i \quad \therefore c = e^i \tag{1.44}$$

$$\therefore e^{ix} = \cos x + i \sin x \tag{1.45}$$

□

또, 테일러 급수로도 이것이 성립함을 쉽게 확인할 수 있습니다. e^x의 테일러 급수가 아래와 같으므로

$$e^x \overset{\text{Tayl.}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \tag{1.46}$$

그러므로 e^{ix}의 테일러 전개식은

$$e^{ix} \overset{\text{Tayl.}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ix)^n}{n} = 1 + ix - \frac{x^2}{2!} - i\frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4} + \dots \tag{1.47}$$

그런데, $\cos x$와 $\sin x$의 테일러 전개식은 아래와 같습니다.

$$\cos x \overset{\text{Tayl.}}{=} 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots \tag{1.48}$$

$$\sin x \overset{\text{Tayl.}}{=} x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots \tag{1.49}$$

식 (1.49) 에 i만 곱해 식 (1.48) 과 더하면 식 (1.47) 과 같습니다.

1.3. 확률 기본

양자역학의 확률 해석 때문에, 확률을 다룰 줄 아는 것은 중요합니다. 조금 쉬운 부분으로 가 봅시다.

이 부분의 내용은 David J. Griffiths와 Darrel F. Schröter의 <Introduction to Quantum Mechanics> 3판에서 가져왔습니다.

1.3.1. 이산 변수

먼저, 불연속적인, 즉 이산(離散, discrete)적인 변량을 다루어 봅시다.

한 방에 나이별로 사람이 아래와 같이 있다고 합시다.

나이 (세)	사람 수 (명)
14	1
15	1
16	3
22	2
24	2
25	5

$N(j)$를 나이 j 세의 사람 수라고 정의한다면, 다음과 같이 표현할 수 있습니다.

$$\begin{aligned} N(14) &= 1 \\ N(15) &= 1 \\ N(16) &= 3 \\ N(22) &= 2 \\ N(24) &= 2 \\ N(25) &= 5 \end{aligned} \tag{1.50}$$

또, $N(18), N(19)$ 등은 0입니다.

방 안에 있는 전체 사람 수는 이렇게 구할 수 있습니다.

$$N_{\text{Total}} = \sum_{j=0}^{\infty} N(j) \tag{1.51}$$

나이 j 세일 사람이 방에 있을 확률을 $P(j)$라고 한다면 아래와 같습니다.

$$P(j) = \frac{N(j)}{N_{\text{Total}}} \tag{1.52}$$

또, 대푯값들을 살펴보면, 최빈값(最頻값, mode)은 25, 중간값(median)은 23, 평균(average, mean)은 21입니다. 여기서, 평균은 아래와 같습니다.

$$\langle j \rangle = \frac{\sum jN(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} jP(j) \tag{1.53}$$

양자역학에서는 최빈값, 중간값보다는 모든 변량을 반영하는 평균에 관심이 있고, 이러한 맥락에서는 평균을 기댓값(expectation value)라고 합니다. 기댓값이라는 말은 나올 확률이 가장 높은 값이라는 말인데, 실제로 21살인 사람은 이 방에 없으므로 오해의 소지가 있는 용어이긴 합니다.

하지만 기댓값만으로 전체 변량을 대표하기에는 아직 한계가 있습니다. 평균은 같지만 고르게 분포한 것과 한 쪽에 좁게 분포한 것에는 분명히 차이가 있기 때문입니다. 그래서 각 변량이 평균으로부터 얼마나 떨어져 있는지를 구해 보겠습니다.

$$\Delta j = j - \langle j \rangle \tag{1.54}$$

이 값을 편차(deviation)이라고 합니다. 그럼 이제 편차의 평균을 구하면 되겠네요? 좋습니다.

$$\begin{aligned} \langle \Delta j \rangle &= \sum (j - \langle j \rangle) P(j) = \sum jP(j) - \langle j \rangle \sum P(j) \\ &= \langle j \rangle - \langle j \rangle = 0 \end{aligned} \tag{1.55}$$

그 값이 ... 0이 나온다는 것 빼고요. 그러면 어떡해야 할까요? 절댓값을 취하면 되려나요? 절댓값은 양수, 음수 두 가지 경우로 나뉘기 때문에 계산이 복잡해질수록 더 다루기 번거로워집니다. 그래서 제곱을 한 후 평균을 구해 봅시다.

$$\left\langle (\Delta j)^2 \right\rangle =: \sigma^2 \tag{1.56}$$

이 값을 분산(variance)라고 하고, 이는 표준편차(standard deviation)의 제곱입니다. 보통 앞글자 s의 그리스 문자인 σ로 표현합니다. (표준편차는 변량 빼기 평균의 제곱의 평균의 제곱근이 됩니다. 헉![6])

표준편차를 좀 더 쉽게 구하는 방법이 없을까요?

[6] 원본 책을 존중하여 재미있는 문장을 그대로 넣었습니다.

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \left\langle (\Delta j)^2 \right\rangle = \sum (\Delta j)^2 P(j) = \sum (j - \langle j \rangle)^2 P(j) \\ &= \sum \left(j^2 - 2j\langle j \rangle + \langle j \rangle^2 \right) P(j) \\ &= \sum j^2 P(j) - 2\langle j \rangle \sum jP(j) + \langle j \rangle^2 \sum P(j) \\ &= \left\langle j^2 \right\rangle - 2\langle j \rangle \langle j \rangle + \langle j \rangle^2 \\ &= \left\langle j^2 \right\rangle - \langle j \rangle^2 \end{aligned} \tag{1.57}$$

즉, 분산은 (제곱의 평균) − (평균의 제곱)이 됩니다.

$$\sigma \equiv \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2} \tag{1.58}$$

$\sigma \in \mathbb{R}$이므로 식 (1.58) 은 다음을 암시하기도 합니다.

$$\left\langle j^2 \right\rangle \geq \langle j \rangle^2 \qquad (\text{등호 성립 조건: } \sigma = 0) \tag{1.59}$$

$\sigma = 0$이라는 것은 모든 변량이 같다는 것이겠죠.

1.3.2. 연속 변수

이제 연속적인 변수를 다루어 봅시다. 이산 분포에서는 $j \in \mathbb{Z}$였기 때문에 불연속적인 특정 값을 잡았어야 했습니다. 하지만, 연속 분포는 그렇지 않습니다. 예를 들어, 길에서 아무나 잡았을 때, 그 사람의 나이가 정확히 16세 35일 4시간 27분 3.333...초일 확률은 0 입니다. 그러므로 우리는 범위를 잡아서 확률을 따져야 합니다. 이 사람의 나이가 16세에서 17세 사이일 확률 같은 것 말이죠.

길에서 잡은 사람의 나이가 0살일 확률은 0입니다. 모든 사람이 150살에는 죽는다고 가정할 때, 예를 들어 0살에서 10살을 만날 확률보다는 0살에서 50살을 만날 확률이 더 높습니다. 0살에서 150살을 만날 확률은 1이 되겠죠.

이 '누적 확률'을 나타낸 함수를 누적 분포 함수(CDF, cumulative density function)이라고 하고, 이것을 미분한 것이 확률 밀도 함수(PDF, probability density function)가 됩니다. 이 PDF를 $\mathrm{PDF}(x)$라고 할 때, 변량이 x와 $x + \mathrm{d}x$ 사이에 분포할 확률은 다음과 같습니다.

$$\mathrm{PDF}(x)\,\mathrm{d}x \tag{1.60}$$

이를 더 세련된 용어로 확률 밀도라고 하는 것입니다. a와 b 사이의 확률 밀도는 아래와 같습니다.

$$P_{ab} = \int_a^b \mathrm{PDF}(x)\,\mathrm{d}x \tag{1.61}$$

당연히 아래도 성립해야 합니다.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{PDF}(x)\,\mathrm{d}x = 1 \tag{1.62}$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,\mathrm{PDF}(x)\,\mathrm{d}x \tag{1.63}$$

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\mathrm{PDF}(x)\,\mathrm{d}x \tag{1.64}$$

$$\sigma^2 \equiv \left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2 \tag{1.65}$$

1.4. 상태 함수 ψ

ψ는 상태 함수(state function) 또는 파동함수(wave function)로, 어떤 입자의 분포 등의 정보를 포함하고 있는 함수입니다. 상태 벡터(state vector)이기도 하므로, $|\psi\rangle$처럼 쓰기도 합니다. 파동함수는 그 자체로는 아무 물리적 의미도 없습니다. 대신, ψ에 그 켤레 복소수(conjugate)를 곱하면 PDF가 나옵니다[7].

$$\mathrm{PDF} = \psi^* \psi = |\psi|^2 \tag{1.66}$$

예를 들어 $\psi(x,t)$는 위치 x와 시간 t에서 입자가 발견될 확률을 나타낼 수 있습니다.

따라서 아래가 성립합니다.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x = 1 \tag{1.67}$$

1.5. 슈뢰딩거 방정식

독일의 물리학자 슈뢰딩거(Erwin Schrödinger)가 제안한 파동 방정식으로, 아직 식의 의미는 몰라도 됩니다. 하지만 그 모양 정도는 눈에 담아두면 좋습니다.

$$\hat{E}\psi = \hat{\mathcal{H}}\psi \tag{1.68}$$

[7] $|a+bi| = \sqrt{a^2+b^2}$

이를 완전히 전개하면 다음과 같이 생기게 됩니다.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(x)\psi \tag{1.69}$$

이 식의 해는 ψ가 됩니다.

이 식은 양자역학에서, 뉴턴 역학의 뉴턴 운동 방정식($F = ma$)이라거나, 라그랑주 역학의 오일러-라그랑주 방정식[8]과 비슷한 역할을 가집니다.

1.6. 출발

양자역학은 교양으로만 배우면 식은 하나도 언급하지 않고도 핵심이 되는 아이디어를 모두 알 수 있습니다. 하지만 양자역학은 처음부터 확률 해석과 식으로 태동했기 때문에 그 精髓(정수, *essence*)에 닿기 위해서는 수학적 이해가 필수적입니다.

결코 쉽지는 않을 것이고, 당연히 필자에게도 어렵습니다. 하지만, 재미는 있을 겁니다. 그럼,

> Let's dive into the fascinating world of Quantum Mechanics!

[8] q는 일반화 좌표, L은 라그랑지언일 때 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$

2. 양자역학의 역사

3. 파동함수와 불확정성 원리

3.1. 슈뢰딩거 방정식

처음부터 압도적(overwhelming)일 수도 있겠지만 양자역학의 가장 밑바탕이 되는 것부터 집고 넘어가겠습니다.

질량 m의 입자 또는 질점(質點)이 x축을 따라 힘 $F(x,t)$를 받으며 이동하는 상황을 생각해 봅시다. 뉴턴 역학으로 대표되는 고전 역학(classical mechanics)의 의의는