

제3장 수식화

지금까지 공부한 과정들을
수학적으로 다시 한 번 정리해 봅시다.

양자역학 = 연산자 + 상태

양자역학 = 연산자 + 상태

벡터 $|\Psi\rangle$

양자역학 = 연산자 + 상태

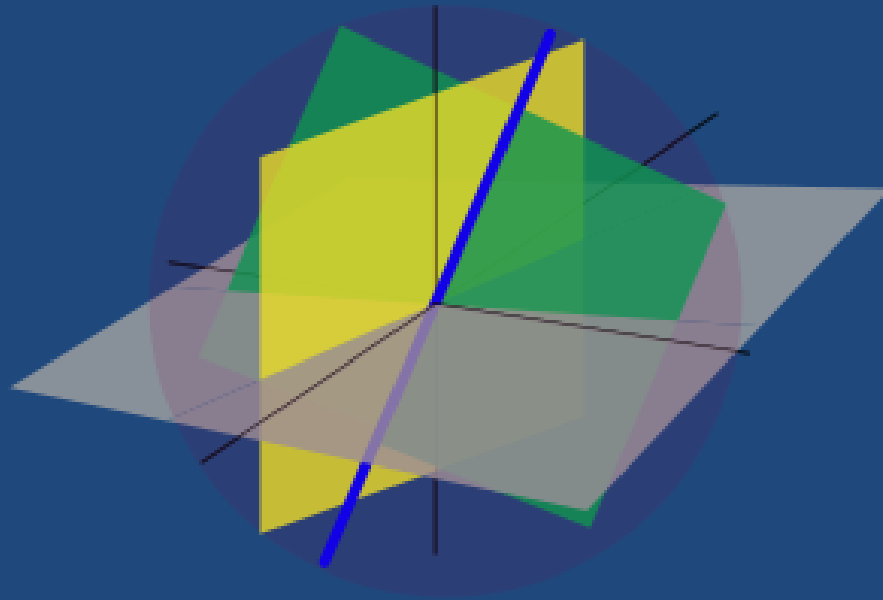
행렬 $\hat{Q}$ 벡터 $|\Psi\rangle$

양자역학 = 연산자 + 상태

벡터 $|\Psi\rangle$

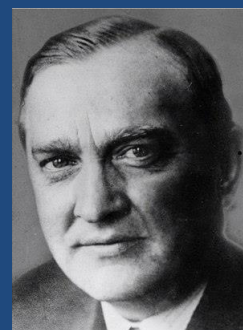
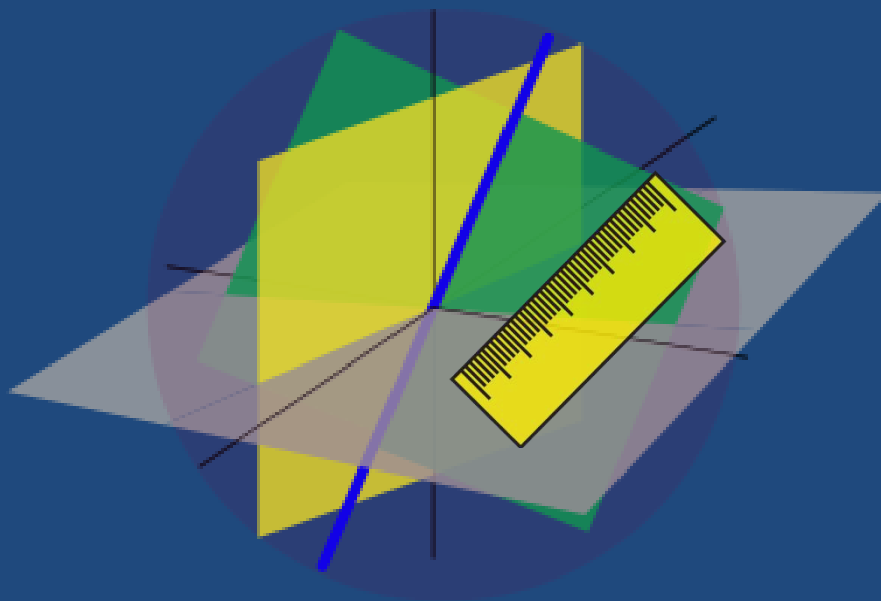
원리 1: $|\Psi\rangle$ 는 힐베르트 공간에 속한다.

벡터 공간



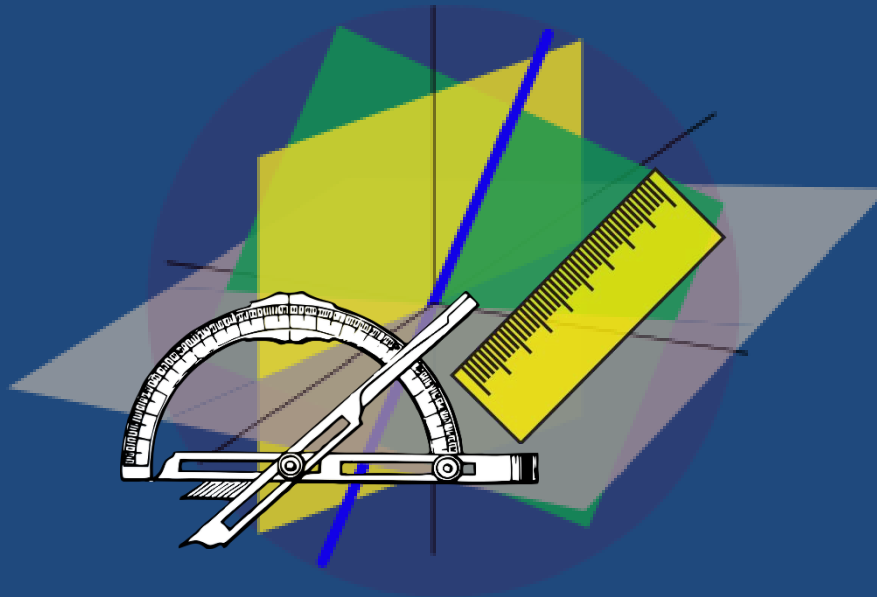
벡터 공간이란 선형연산이 가능한 벡터들이 정의된
수학적 공간을 말합니다.

바나흐 공간



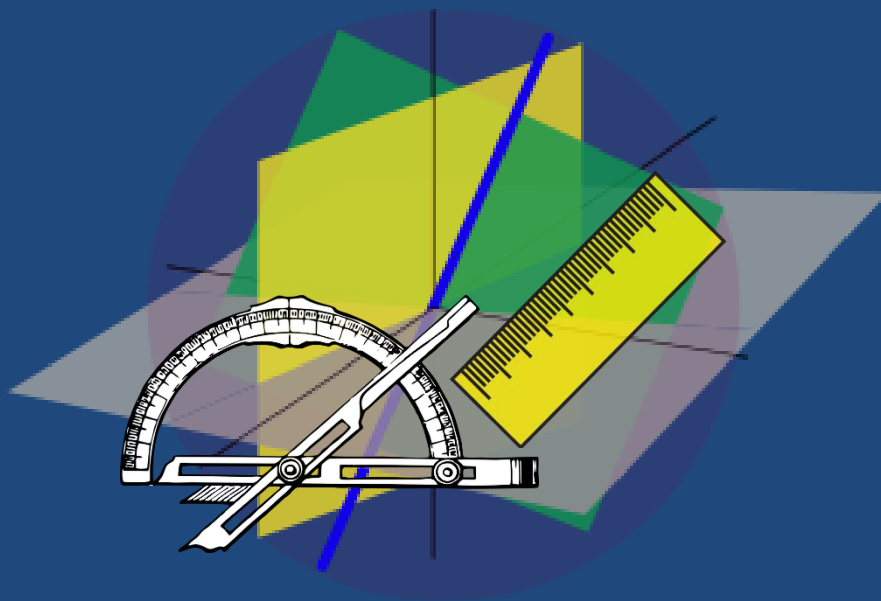
벡터 공간에 거리_{norm} 를 정의할 수 있으면
바나흐 공간이라고 부릅니다.

힐베르트 공간



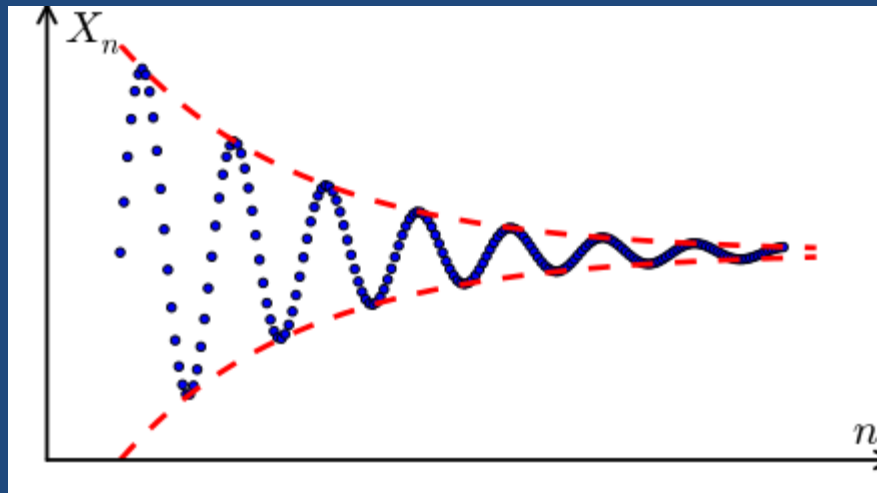
바나흐 공간에 각도를 측정하는 **내적** inner product 을
잘 정의할 수 있으면
힐베르트 공간이라고 부릅니다.

힐베르트 공간



바나흐 공간에 각도를 측정하는 내적 inner product 을
잘 정의할 수 있으면
힐베르트 공간이라고 부릅니다.

힐베르트 공간



힐베르트 공간은 빈 틈이 없이 꽉 차 있어야 합니다.
즉, **Cauchy complete**해야 합니다.

원리 1: $|\Psi\rangle$ 는 힐베르트 공간에 속한다.

즉, 벡터 공간vector space이고,
내적inner product이 존재하며,
완비성completeness을 가지고 있다.

벡터의 내적

$$\begin{aligned}\langle f|g\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle f|x\rangle \langle x|g\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x) dx\end{aligned}$$

벡터의 내적

$$\begin{aligned}\langle f|g\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle f|x\rangle \langle x|g\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x) dx\end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| dx = I$$

$$\sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n| = I$$

벡터의 내적

$$\begin{aligned}\langle f|g\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle f|x\rangle \langle x|g\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x) dx\end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| dx = I \qquad g(x) = \langle x|g\rangle$$

$$\sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n| = I \qquad f^*(x) = \langle f|x\rangle$$

파동함수의 규격화

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi | x \rangle \langle x | \Psi \rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \Psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx \\ &= 1\end{aligned}$$

벡터의 표현 representation

$|\Psi\rangle$ 는 추상적인 벡터 공간의 원소입니다.

벡터의 표현 representation

$|\Psi\rangle$ 는 추상적인 벡터 공간의 원소입니다.

이 벡터는 기저 함수의 집합 $\{|n\rangle\}$ 에 의해 다음과 같이 표현됩니다.

$$\begin{pmatrix} \langle 1|\Psi\rangle \\ \langle 2|\Psi\rangle \\ \langle 3|\Psi\rangle \\ \dots \\ \langle n|\Psi\rangle \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \dots \\ c_n \\ \dots \end{pmatrix}$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

벡터의 표현 representation

내적은 다음과 같은 두 행렬의 곱으로 생각할 수 있습니다.

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = (c_1^* \ c_2^* \ \dots \ c_n^* \ \dots) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \dots \\ c_n \\ \dots \end{pmatrix} = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 = 1$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

양자역학 = 연산자 + 상태

행렬 $\hat{Q}$ 벡터 $|\Psi\rangle$

원리 2: $\hat{Q}$ 은 에르미트 연산자 Hermitian operator이다.

원리 2: $\hat{Q}$ 은 에르미트 연산자 Hermitian operator이다.

즉, $\hat{Q}^\dagger = \hat{Q}$ 이다.

연산자의 표현 representation

연산자도 기저 함수에 의해 행렬로 표현될 수 있습니다.

$$\begin{pmatrix} \langle 1|\hat{Q}|1\rangle & \cdots & \langle 1|\hat{Q}|N\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle N|\hat{Q}|1\rangle & \cdots & \langle N|\hat{Q}|N\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & \cdots & Q_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ Q_{N1} & \cdots & Q_{NN} \end{pmatrix}$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

연산자의 표현 representation

이 때 에르미트 연산자는 다음과 같은 성질을 가지게 됩니다.

$$\begin{pmatrix} \langle 1|\hat{Q}|1\rangle & \cdots & \langle 1|\hat{Q}|N\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle N|\hat{Q}|1\rangle & \cdots & \langle N|\hat{Q}|N\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & \cdots & Q_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ Q_{N1} & \cdots & Q_{NN} \end{pmatrix}$$

$$Q_{ij}^* = Q_{ji}$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

연산자의 표현 representation

$$\langle f | \hat{Q} | g \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle f | n \rangle \langle n | \hat{Q} | m \rangle \langle m | g \rangle$$

$$|f\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$$|g\rangle = \sum_n d_n |n\rangle$$

연산자의 표현 representation

$$\begin{aligned}\langle f|\hat{Q}|g\rangle &= \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle f|n\rangle \langle n|\hat{Q}|m\rangle \langle m|g\rangle \\ &= \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N c_n^* d_m Q_{nm}\end{aligned}$$

$$|f\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$$|g\rangle = \sum_n d_n |n\rangle$$

연산자의 표현 representation

$$\langle f | \hat{Q} | g \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle f | n \rangle \langle n | \hat{Q} | m \rangle \langle m | g \rangle$$

$$= \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N c_n^* d_m Q_{nm}$$

$$= (c_1^* \ c_2^* \ \dots \ c_n^* \ \dots) \begin{pmatrix} Q_{11} & \dots & Q_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ Q_{N1} & \dots & Q_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ \dots \\ d_n \\ \dots \end{pmatrix}$$

$$|f\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$$|g\rangle = \sum_n d_n |n\rangle$$

연산자의 기댓값 expectation value

$$\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi | x \rangle \langle x | \hat{Q} | x' \rangle \langle x' | \Psi \rangle dx dx'$$

연산자의 기댓값 expectation value

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi | x \rangle \langle x | \hat{Q} | x' \rangle \langle x' | \Psi \rangle dx dx' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi | x \rangle Q(x') \langle x | x' \rangle \langle x' | \Psi \rangle dx dx' \\ \hat{Q} | x \rangle &= Q(x) | x \rangle\end{aligned}$$

연산자의 기댓값 expectation value

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi | x \rangle \langle x | \hat{Q} | x' \rangle \langle x' | \Psi \rangle dx dx' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi | x \rangle Q(x') \langle x | x' \rangle \langle x' | \Psi \rangle dx dx' \\ \hat{Q} | x \rangle &= Q(x) | x \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) Q(x') \Psi(x') \delta(x - x') dx dx' \\ \langle x' | x \rangle &= \delta(x - x')\end{aligned}$$

연산자의 기댓값 expectation value

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi | x \rangle \langle x | \hat{Q} | x' \rangle \langle x' | \Psi \rangle dx dx' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi | x \rangle Q(x') \langle x | x' \rangle \langle x' | \Psi \rangle dx dx' \\ \hat{Q} | x \rangle &= Q(x) | x \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) Q(x') \Psi(x') \delta(x - x') dx dx' \\ \langle x' | x \rangle &= \delta(x - x') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) Q(x) \Psi(x) dx\end{aligned}$$

연산자의 기댓값 expectation value

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi | x \rangle \langle x | \hat{Q} | x' \rangle \langle x' | \Psi \rangle dx dx' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi | x \rangle Q(x') \langle x | x' \rangle \langle x' | \Psi \rangle dx dx' \\ \hat{Q} | x \rangle &= Q(x) | x \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) Q(x') \Psi(x') \delta(x - x') dx dx' \\ \langle x' | x \rangle &= \delta(x - x') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) Q(x) \Psi(x) dx \\ &\equiv \langle \hat{Q} \rangle\end{aligned}$$

에르미트 연산자의 성질

에르미트 연산자는

- (1) 항상 대각화diagonalization가 가능합니다.

에르미트 연산자의 성질

에르미트 연산자는

- (1) 항상 대각화diagonalization가 가능합니다.
- (2) 이 때 고윳값은 실수가 됩니다.

에르미트 연산자의 성질

에르미트 연산자는

- (1) 항상 대각화diagonalization가 가능합니다.
- (2) 이 때 고윳값은 실수가 됩니다.
- (3) 고유벡터들은 서로 직교orthogonal하게 됩니다.

에르미트 연산자의 성질

에르미트 연산자는

- (1) 항상 대각화diagonalization가 가능합니다.
- (2) 이 때 고윳값은 실수가 됩니다.
- (3) 고유벡터들은 서로 직교orthogonal하게 됩니다.
- (4) 고유벡터들은 벡터공간 전체를 생성할 수 있고, 벡터공간의 기저basis를 형성합니다.

원리 3: 한 번에 측정되는 값은 고유값^{eigenvalue}이며,
그 때의 상태는 고유상태^{eigenstate}이다.

원리 3: 한 번에 측정되는 값은 고유값^{eigenvalue}이며,
그 때의 상태는 고유상태^{eigenstate}이다.

즉, 항상 대각화^{diagonalization}가 가능하고,
고유값은 실수가 되며,
고유벡터는 서로 직교^{orthogonal}하면서
벡터공간의 기저^{basis}를 형성한다.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

슈뢰딩거 방정식도 에르미트 연산자의 고윳값 문제입니다.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi = E \Psi$$

슈뢰딩거 방정식도 에르미트 연산자의 고윳값 문제입니다.

푸리에 변환 Fourier transformation

$$\langle x|\Psi\rangle = \Psi(x)$$

푸리에 변환 Fourier transformation

$$\begin{aligned}\langle x|\Psi\rangle &= \Psi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|p\rangle \langle p|\Psi\rangle dp\end{aligned}$$

푸리에 변환 Fourier transformation

$$\begin{aligned}\langle x|\Psi\rangle &= \Psi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|p\rangle \langle p|\Psi\rangle dp \\ \langle x|p\rangle &= \frac{e^{ixp/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixp/\hbar} \langle p|\Psi\rangle dp\end{aligned}$$

푸리에 변환 Fourier transformation

$$\begin{aligned}\langle x|\Psi\rangle &= \Psi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|p\rangle \langle p|\Psi\rangle dp \\ \langle x|p\rangle &= \frac{e^{ixp/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixp/\hbar} \langle p|\Psi\rangle dp \\ \langle p|\Psi\rangle &= \Phi(p) \\ &\text{운동량으로 표현} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixp/\hbar} \Phi(p) dp\end{aligned}$$

원리 4: 여러 번의 반복된 측정에 의해
통계적 해석statistical interpretation을 하게 된다.

통계적 해석

$$\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle \Psi | n \rangle \langle n | \hat{Q} | m \rangle \langle m | \Psi \rangle$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

통계적 해석

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle &= \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle \Psi | n \rangle \langle n | \hat{Q} | m \rangle \langle m | \Psi \rangle \\ \hat{Q} | n \rangle = Q_n | n \rangle &= \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N c_n^* c_m Q_m \langle n | m \rangle\end{aligned}$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

통계적 해석

$$\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle \Psi | n \rangle \langle n | \hat{Q} | m \rangle \langle m | \Psi \rangle$$

$$\hat{Q}|n\rangle = Q_n|n\rangle = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N c_n^* c_m Q_m \langle n|m\rangle$$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N c_n^* c_m Q_m \delta_{nm}$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

통계적 해석

$$\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle \Psi | n \rangle \langle n | \hat{Q} | m \rangle \langle m | \Psi \rangle$$

$$\hat{Q}|n\rangle = Q_n|n\rangle = \sum_{m=1}^N c_m^* c_m Q_m \langle n|m\rangle$$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N c_n^* c_m Q_m \delta_{nm}$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_{n=1}^N c_n^* c_n Q_n$$

통계적 해석

$$\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle \Psi | n \rangle \langle n | \hat{Q} | m \rangle \langle m | \Psi \rangle$$

$$\hat{Q}|n\rangle = Q_n|n\rangle = \sum_{m=1}^N c_m^* c_m Q_m \langle n|m\rangle$$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N c_n^* c_m Q_m \delta_{nm}$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad = \sum_{n=1}^N c_n^* c_n Q_n = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 Q_n$$

통계적 해석

$$\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle \Psi | n \rangle \langle n | \hat{Q} | m \rangle \langle m | \Psi \rangle$$

$$\hat{Q}|n\rangle = Q_n|n\rangle = \sum_{m=1}^N c_m^* c_m Q_m \langle n|m\rangle$$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} = \sum_{m=1}^N \sum_{m=1}^N c_n^* c_m Q_m \delta_{nm}$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad = \sum_{n=1}^N c_n^* c_n Q_n = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 Q_n = \sum_{n=1}^N p_n Q_n$$

밀도 행렬

$$\hat{\rho} \equiv |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 |n\rangle\langle n| = \sum_{n=1}^N p_n |n\rangle\langle n|$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

밀도 행렬

$$\hat{\rho} \equiv |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 |n\rangle\langle n| = \sum_{n=1}^N p_n |n\rangle\langle n|$$

그러면 일반적으로 다음이 성립합니다.

$$\text{tr } \hat{\rho} \hat{Q} = \langle \hat{Q} \rangle$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

폰 노이만 엔트로피 von Neumann entropy

폰 노이만은 다음과 같은 방법으로 엔트로피를 정의했습니다.

$$S_{vN} \equiv -\text{tr} \hat{\rho} \ln \hat{\rho} = - \sum_{n=1}^N p_n \ln p_n$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

폰 노이만 엔트로피 von Neumann entropy

폰 노이만은 다음과 같은 방법으로 엔트로피를 정의했습니다.

$$S_{vN} \equiv -\text{tr} \hat{\rho} \ln \hat{\rho} = - \sum_{n=1}^N p_n \ln p_n$$

이것은 새년Shannon이 정의한 정보information의 기댓값과도 같습니다.

$$I_n \equiv -\ln p_n$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$



존 폰 노이만



클로드 새넨

정보란?

$$I_n \equiv -\ln p_n$$

확률이 낮을 수록 정보의 양도 증가합니다.

양자역학에서 통계역학으로

폰 노이만 엔트로피의 최대값은 모든 상태가 같은 확률을 가질 때 얻어진다는 것을 보일 수 있습니다.

즉, $p_n = 1/N$ 을 요청합니다. 이 때 우리는 최대의 엔트로피, 즉 볼츠만 엔트로피 Boltzmann entropy를 얻게 됩니다.

$$-\sum_{n=1}^N p_n \ln p_n = \ln N \equiv S_B$$

양자역학에서 통계역학으로

폰 노이만 엔트로피의 최대값은 모든 상태가 같은 확률을 가질 때 얻어진다는 것을 보일 수 있습니다.

즉, $p_n = 1/N$ 을 요청합니다. 이 때 우리는 최대의 엔트로피, 즉 볼츠만 엔트로피 Boltzmann entropy를 얻게 됩니다.

$$-\sum_{n=1}^N p_n \ln p_n = \ln N \equiv S_B$$

통계역학 및 열역학의 이론적 기초가
여기에서부터 시작됩니다.

양자역학에서 통계역학으로

유니터리 변환의 경우 폰 노이만 엔트로피는 변하지 않습니다.

$$\delta S_{vN} = 0$$

그러나 열역학적 시스템에서 볼츠만 엔트로피는
증가할 수 있습니다.

$$\delta S_B \geq 0$$

양자역학에서 통계역학으로

유니터리 변환의 경우 폰 노이만 엔트로피는 변하지 않습니다.

$$\delta S_{vN} = 0$$

그러나 열역학적 시스템에서 볼츠만 엔트로피는
증가할 수 있습니다.

$$\delta S_B \geq 0$$

이것은 **정보의 손실** 또는 **파동함수의 붕괴**가 일어나는 경우에
일어납니다. 통계역학적 가정(최대 엔트로피의 가정)도
이와 같은 맥락에서 이해할 수 있습니다.

그러면 과연 자연에는
비유니터리한 과정이 존재할까요?

감사합니다