파동함수의 연속성과 미분가능성에 대한 고찰

mr.choijh@gmail.com ^0^)/

파동함수는 항상 연속이어야 한다. 하지만 미분은 가능해도 되고 안 되도 된다. 즉, 파동함수는 부드러운 함수가 아니고 중간에 꺾여있는 형태의 함수도 가능하다는 말이다.

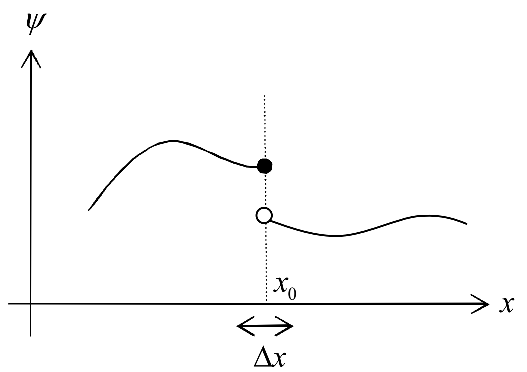
파동함수의 연속성에 대한 고찰

$$\left|\psi(x,t)\right|^2 = \psi(x,t)^* \psi(x,t)$$

양자역학에서의 기본적인 요청(postulate)중에 하나는 위의 식이 입자의 존재 확률'밀도'로서 해석되는 것이다. 위의 식이 확률밀도 이기 때문에 Δx 사이에서 입자가 발견될 확률은 다음과 같다.

$$\left|\psi(x,t)\right|^2 \Delta x$$

이제 다음의 그림과 같이 파동함수 $\psi(x,t)$ 가 x_0 에서 불연속일 경우를 생각해보자.



이제 Δx 에서 입자가 존재할 확률을 생각해보자. 입자의 존재확률은 $\left|\psi(x,t)\right|^2 \Delta x$ 이다. 하지만 x_0 에서는 $\psi(x,t)$ 이 정의 되지 않으므로 양자의 기본적인 요청인 입자의 확률에 대한 해석을 만족할 수 없게 된다. 즉 파동함수는 연속이어야 한다.

그럼 파동함수는 미분이 가능할까 불가능할까? 즉, 부드러운 함수인가 아닌가?!

파동함수의 미분가능성에 대한 고찰

정상상태에서의 Schrodinger eq.는 다음과 같이 나타내어진다.

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

($\psi(x)$:정상상태의 파동함수, $V(x)$:포텐셜 에너지, E:에너지 고유치)

파동함수는 위에서 알아봤듯이 모든 x에 대해서 연속이다. 위의 Schrodinger eq.을 $x=x_0-\varepsilon$에서 $x=x_0+\varepsilon$까지 적분하고, $\varepsilon\to 0$의 극한을 취해보자.
일단 Schrodinger eq.을 다음과 같이 정리하고 적분을 하자!

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\left(E-V(x)\right)\psi(x)$$

(좌변)= $-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0+\varepsilon}-\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0-\varepsilon}\right]$

(우변)= $\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\left(E-V(x)\right)\psi(x)dx$

$$\approx\psi(x_0)\left[2\varepsilon E-\int_{x_0}^{x_0+\varepsilon}V(x)dx-\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0}V(x)dx\right]$$

$$\approx\psi(x_0)\left[2\varepsilon E-\varepsilon V(x_0+\varepsilon)-\varepsilon V(x_0-\varepsilon)\right]$$

$$=\varepsilon\psi(x_0)\left[2E-V(x_0+\varepsilon)-V(x_0-\varepsilon)\right]$$

좌변우변을 정리하면 다음과 같다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0+\varepsilon}-\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0-\varepsilon}\right]=\varepsilon\psi(x_0)\left[2E-V(x_0+\varepsilon)-V(x_0-\varepsilon)\right]$$

i) 포텐셜 $V(x)$가 x_0에서 연속 혹은 불연속이라도 그 크기가 유한일 경우 ($V(x_0+\varepsilon)-V(x_0-\varepsilon)=$ 유한의 값)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0+\varepsilon}-\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0-\varepsilon}\right]=\varepsilon\psi(x_0)\left[2E-V(x_0+\varepsilon)-V(x_0-\varepsilon)\right]\xrightarrow{\varepsilon\to 0}0$$

즉, 위의 식의 좌변이 0이 되므로, 다음과 같이 정리된다.

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0+\varepsilon} = \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0-\varepsilon}$$

이는 곧 파동함수가 미분 가능함, 즉 파동함수가 부드러운 함수 임을 의미한다.

ii) 포텐셜 $V(x)$가 x_0에서 무한대크기의 불연속일 경우
($V(x_0+\varepsilon)=\infty \ or \ V(x_0-\varepsilon)=\infty$)

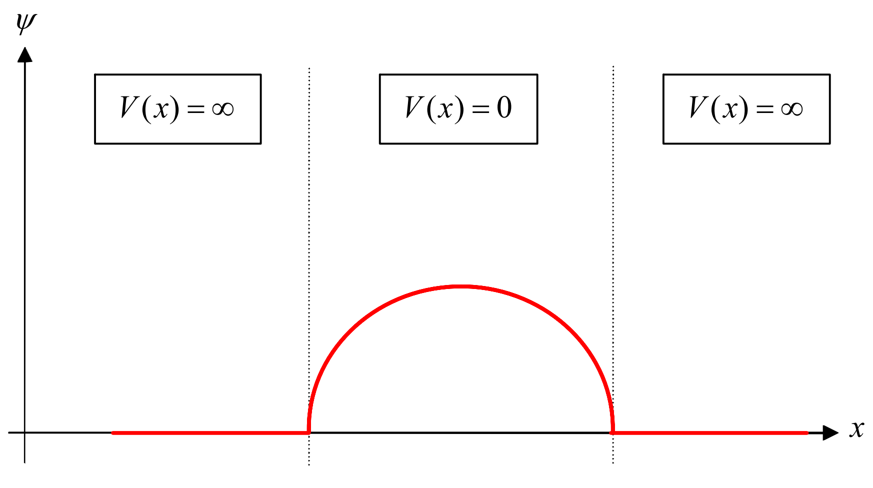
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0+\varepsilon} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0-\varepsilon}\right] = \varepsilon\psi(x_0)\left[2E - V(x_0+\varepsilon) - V(x_0-\varepsilon)\right] \xrightarrow{\varepsilon\to 0} 0\bullet\infty$$

즉 위의 식의 우변이 0이 되지 않으므로 좌변은 다음과 같이 정리된다.

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0+\varepsilon} \neq \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=x_0-\varepsilon}$$

이는 곧 포텐셜이 무한대의 불연속인 곳에서 파동함수는 미분불가능, 즉 부드러운 함수가 아님을 의미한다.

예를 들어, 무한하게 깊은 포텐셜 우물의 기저상태의 경우를 보자.



일단은 파동함수는 연속이다. 그리고 포텐셜이 무한대크기의 불연속인 곳에서는 미분이 정의 되지 않으므로 부드러운 함수가 아닌 꺾인 함수의 형태가 되어 있음을 알 수 있다.