운동량 연산자 유도하기

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

푸리에 변환

임의의 파동함수 $\psi(\mathbf{r})$를 위치공간에서 다음과 같이 표현해보자.

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\left(\sqrt{2\pi}\right)^3}\int d^3k\,\phi(\mathbf{k})\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{1}$$

여기서 적분범위는 공간 전체이다. 다음은 푸리에 역 변환을 이용하여 파수공간에서 파동을 나타내보자.

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{1}{\left(\sqrt{2\pi}\right)^3}\int d^3r\,\psi(\mathbf{r})\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{2}$$

파수공간에서 확률밀도는 $\left|\phi(\mathbf{k})\right|^2$ 이다.

운동량 공간

파수와 운동량은 $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ 와 같은 관계에 있으므로 운동량의 기대 값은 다음과 같다.

$$\langle\mathbf{p}\rangle = \hbar\langle\mathbf{k}\rangle = \hbar\int d^3k\,\phi^*(\mathbf{k})\,\mathbf{k}\,\phi(\mathbf{k}) \tag{3}$$

(3)식에 $\phi(\mathbf{k})$를 (2)식의 푸리에 역 변환 형태로 고쳐 써보자.

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{p}\rangle &= \hbar\int d^3k\,\phi^*(\mathbf{k})\,\mathbf{k}\,\phi(\mathbf{k}) \\ &= \hbar\int d^3k\left(\frac{1}{\left(\sqrt{2\pi}\right)^3}\int d^3r'\,\psi(\mathbf{r}')\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}\right)^*\mathbf{k}\left(\frac{1}{\left(\sqrt{2\pi}\right)^3}\int d^3r\,\psi(\mathbf{r})\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right) \\ &= \hbar\int d^3k\,\mathbf{k}\left(\frac{1}{\left(\sqrt{2\pi}\right)^3}\int d^3r'\,\psi^*(\mathbf{r}')\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}\right)\left(\frac{1}{\left(\sqrt{2\pi}\right)^3}\int d^3r\,\psi(\mathbf{r})\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right) \\ &= \frac{\hbar}{(2\pi)^3}\iiint d^3r'd^3rd^3k\,\psi^*(\mathbf{r}')\,\psi(\mathbf{r})\,\mathbf{k}\,e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}\end{aligned} \tag{4}$$

여기서 다음의 관계를 이용한다.

$$\mathbf{k}\,e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} = -\frac{1}{i}\nabla_r\left(e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}\right) \tag{5}$$

이 관계를 이용하여 식 (4)를 정리하면,

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p} \rangle &= \frac{\hbar}{(2\pi)^3} \iiint d^3r' d^3r d^3k\, \psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{i} \nabla_r \left(e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \right) \right) \\ &= \frac{i\hbar}{(2\pi)^3} \iint d^3r d^3k\ \psi^*(\mathbf{r}') \int d^3r\, \psi(\mathbf{r}) \nabla_r \left(e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \right)\end{aligned} \tag{6}$$

여기서 r' 에 관한 적분을 부분적분을 이용해서 계산한다.

$$\begin{aligned}\int d^3r\, \psi(\mathbf{r}) \nabla_r \left(e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \right) &= \left[\psi(\mathbf{r}) \cdot e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \right] - \int d^3r\, \nabla_r \left(\psi(\mathbf{r}) \right) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \\ &= -\int d^3r\, \nabla_r \left(\psi(\mathbf{r}) \right) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}\end{aligned} \tag{7}$$

식 (7)에서 $\psi(\mathbf{r})$ 은 무한히 먼 곳에서 0으로 수렴하므로 두 번째 식의 첫째 항이 사라진다. 다시 원래 식에 대입하자.

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p} \rangle &= -\frac{i\hbar}{(2\pi)^3} \iint d^3r d^3k\ \psi^*(\mathbf{r}') \int d^3r\, \nabla_r \left(\psi(\mathbf{r}) \right) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \\ &= -i\hbar \iint d^3r d^3r'\ \psi^*(\mathbf{r}') \nabla_r \left(\psi(\mathbf{r}) \right) \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \\ &= -i\hbar \iint d^3r d^3r'\ \psi^*(\mathbf{r}') \nabla_r \left(\psi(\mathbf{r}) \right) \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) \\ &= \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla_r) \psi(\mathbf{r})\end{aligned} \tag{8}$$

여기서 다음의 delta 함수의 다음과 같은 관계를 이용하였다.

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} = \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) \tag{9}$$

결과를 정리하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p} \rangle &= \int d^3r \psi^*(\mathbf{r})\, \hat{\mathbf{p}}\, \psi(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla_r) \psi(\mathbf{r})\end{aligned} \tag{10}$$

따라서, 운동량 연산자 $\hat{\mathbf{p}}$ 는 다음과 같이 나타내어진다.

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla_r \tag{11}$$