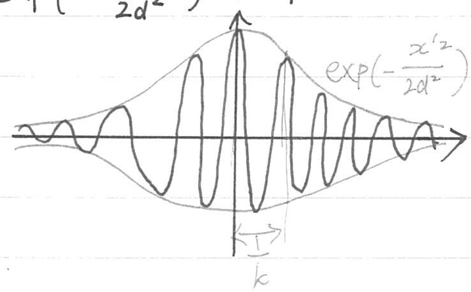
chapter 1 을 마무리하자

Gaussian wave packets. — x-space 에서 wave function 이 이렇게 생긴 상태이다. Gaussian 모양의 envelop 속에 phase 가 진동하는 형태이다.

$$\psi_\alpha(x') = \langle x' | \alpha \rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}} \exp\left(ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right)$$

$\exp(ikx')$ 가 진동하는 phase 를 나타내고,

$\exp\left(-\frac{x'^2}{2d^2}\right)$ 가 phase 들의 외각을 Gaussian 으로 결정한다.



$\langle x^2 \rangle$ 을 계산해 보자. $\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{d^2}\right) = d\sqrt{\pi}$ 임을 이용

$\psi_\alpha \psi_\alpha^* = \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x'^2}{d^2}\right)$ modulus 는 예상했듯이 그냥 Gaussian 으로 나온다.

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left(-\frac{x'^2}{d^2}\right) x'^2$$

$K = \frac{1}{d^2}$ 로 두면, $\exp\left(-\frac{x'^2}{d^2}\right)x'^2 = \exp(-Kx'^2)x'^2 = -\frac{d}{dK}\exp(-Kx'^2)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left(-\frac{x'^2}{d^2}\right)x'^2 = -\frac{d}{dK}\int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp(-Kx'^2) = -\frac{d}{dK}\sqrt{\frac{\pi}{K}} = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\,K^{-\frac{3}{2}}$$

$$\therefore \langle x^2 \rangle = d^{-1}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{2}\sqrt{\pi}\,d^3\right) = \frac{1}{2}d^2$$

자연스럽게 (그리고 Gaussian distribution 의 특성상.) $\langle x \rangle = 0$, $\langle \Delta x^2 \rangle = \frac{1}{2}d^2$ 이다.

$\langle p \rangle$ 와 $\langle p^2 \rangle$ 은 어떨까? 푸리에 변환하면 더 아름답게 구할 수 있지 않을까? $\phi_\alpha(p')$ 를 구해 보자. 참고로, 가우시안은 푸리에 변환하면 다시 가우시안이 나온다. wave packet 의 경우는 어떨까?

푸리에 변환할 때 쓰는 $\exp(-ik'x')$ 대신에 $\exp\left(-i\frac{1}{\hbar}p'x'\right)$ 를 이용하자

$1/\sqrt{\pi 2\hbar}$ 곱하는 거 까먹었음.

$$\phi_\alpha(p') = \left[\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{d}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left(-i\frac{1}{\hbar}p'x'\right)\exp(ikx')\exp\left(-\frac{x'^2}{2d^2}\right)\right]\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$\phi_\alpha(p') = \left[\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{d}} \int dx' \exp\left[-i\left(\frac{p'}{\hbar}-k\right)x'\right] \exp\left(-\frac{x'^2}{2d^2}\right)\right]\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$\rho = \hbar\left(\frac{p'}{\hbar} - k\right)$ 라고 두어 적분을 계속 진행. 적분 부분만 계산하면.

$$\int dx' \exp\left(-i\frac{\rho}{\hbar}x'\right)\exp\left(-\frac{x'^2}{2d^2}\right)$$

그냥 가우스 함수를 푸리에 변환하는 꼴이다. exp 내부를 완전제곱식으로 만들어 준다.

$$-i\frac{1}{\hbar}\rho x' - \frac{1}{2d^2}x'^2 = -\frac{1}{2d^2}\left(x'^2 + i\frac{2\rho d^2}{\hbar}x'\right)$$

$$= -\frac{1}{2d^2}\left(x' + i\frac{\rho d^2}{\hbar}\right)^2 - \frac{1}{2d^2}\frac{\rho^2 d^4}{\hbar^2}$$

$$= -\frac{1}{2d^2}\left(x' + i\frac{\rho d^2}{\hbar}\right)^2 - \frac{\rho^2 d^2}{2\hbar^2}$$

위의 적분항은 결국,

$$\exp\left(-\frac{\rho^2 d^2}{2\hbar^2}\right)\int dx' \exp\left[\frac{1}{2d^2}\left(x' + i\frac{\rho d^2}{\hbar}\right)^2\right]$$

$i\frac{\rho d^2}{\hbar}$은 x'를 허수축으로 평행이동한 것, 적분에 영향주지 않는다.

$$\int dx' \exp\left(\frac{x'^2}{2d^2}\right) = d\sqrt{2\pi}.$$

$$\phi_\alpha(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{d\sqrt{\pi}}}\, d\sqrt{2\pi}\, \exp\left[-\frac{d^2}{2\hbar^2}\cdot\hbar^2\left(\frac{p'}{\hbar} - k\right)^2\right]$$

$$\phi_\alpha(p') = \sqrt{\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}}\exp\left[-\frac{d^2}{2\hbar^2}(p' - \hbar k)^2\right]$$

놀랍게도, $\hbar k$ 만큼 p'에 대해 평행이동한 Gaussian distribution 이 나온다.

그리고 진동하는 phase 가 전혀 없다.

expectation value는 $\langle p' \rangle = \hbar k$, $\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2$

이제 chapter 2 다. Time-evolution operator 에 대해 알아보자.

t_0 에서 $|\alpha\rangle$의 상태를 $|\alpha, t_0\rangle$ 이고, t 에서 $|\alpha\rangle$의 상태를 $|\alpha, t\rangle$ 라고 표기.

time evolution operator $\mathcal{U}(t, t_0)$ 는 t_0시점의 상태를 t 시점의 상태로

mapping 하는 함수, 혹은 상태를 미래의 상태로 만드는 operator 라고 볼 수 있다.

$$|\alpha, t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0)\,|\alpha, t_0\rangle$$

Time evolution operator는 세 가지 특징을 가진다.

(i) Unitarity

이는 probability conservation 에 의해 요구된다.

$|\alpha, t_0\rangle$가 normalized 되어 있어 $\langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0\rangle = 1$ 이라면,

$|\alpha, t\rangle$ 또한 1로 normalized 여야 한다.

$$\langle \alpha, t | \alpha, t\rangle = \langle \alpha, t_0 |\, \mathcal{U}^\dagger(t, t_0)\, \mathcal{U}(t, t_0)\, | \alpha, t_0\rangle = 1$$

$$\mathcal{U}^\dagger(t, t_0)\, \mathcal{U}(t, t_0) = \mathbb{1}.$$

시간에 따라 변화하는 expectation value 를 고려해도,

$\mathcal{U}(t, t_0)$ 의 unitary 특성은 의미심장하다.

$$\langle A\rangle_t = \langle \alpha, t | A | \alpha, t\rangle \quad , \quad |\alpha, t\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a' | \alpha, t\rangle$$

라면, $\langle A\rangle_t$ 를 두 가지 방식으로 나타낼 수 있다.

$$\langle A\rangle_t = \langle \alpha, t | A | \alpha, t\rangle = \sum_{a'} a' \,|\langle a' | \alpha, t\rangle|^2 .$$

이것은 A의 eigenvalue a'는 변하지 않았지만, $|\alpha\rangle$를 $|a'\rangle$ basis로

나타낼때 계수가 변화하였다는 뜻이다.

$$\begin{aligned}\langle A\rangle_t &= \langle \alpha, t_0 |\, \mathcal{U}^\dagger(t, t_0)\, A\, \mathcal{U}(t, t_0)\, | \alpha, t_0\rangle \\ &= \langle \alpha, t_0 | A'' | \alpha, t_0\rangle \\ &= \sum_{a''} a'' \,|\langle a'' | \alpha, t_0\rangle|^2\end{aligned}$$

이때, a''는 A''의 eigenvalue. $A'' = \mathcal{U}^\dagger(t, t_0)\, A\, \mathcal{U}(t, t_0)$

이건 $|\alpha\rangle$는 변하지 않았으나, t에서 A가 A''으로 변하고,

eigenket 이 $|a'\rangle$ 에서 $|a''\rangle$로 변했다는 뜻 이다.

이때 A''는 A의 unitary transform 이며,

eigenvalue는 둘이 동일하다. $\mathcal{U}$가 unitary 가 아니었으면,

서로 다른 시간 의 ~~observable~~ 관측량이 다른 eigen value를 가지게 되고,

이건 말이 안 된다.

이어서, time evolution operator의 특징.

(ii) composition.

$t_0 \to t_1$ evolution하고 $t_1 \to t_2$ evolution 한 결과는
$t_0 \to t_2$ evolution 과 동일해야 한다.

따라서 $\mathcal{U}(t_2, t_0) = \mathcal{U}(t_2, t_1)\,\mathcal{U}(t_1, t_0)$

(iii) Identity.

아주 짧은 시간만 time evolution 하면, 변한 전후의 차이가 없어야 함

$$\lim_{dt \to 0} \mathcal{U}(t+dt, t) = \mathbb{1}.$$

그래서 $\mathcal{U}$ 또한 generator를 가진다. 일단 generator를 Ω라 부르자.

$$\mathcal{U}(t+dt, t) = \mathbb{1} - i\,dt\,\Omega$$

Ω가 무엇인지는, 고전역학의 개념을 이용하자. 이건 해밀토니안이다.
이미 해석역학에서 $\frac{d}{dt} = \{\cdot, \mathcal{H}\}$ 이란 걸 알고 있다.

$\cancel{\mathcal{U}(t+dt, t) = (\mathbb{1} - i\,dt\,\Omega)\,\mathcal{U}(t, t)}$

$$\mathcal{U}(t+dt, t) = \mathbb{1} - i\frac{1}{\hbar}\mathcal{H}\,dt$$

$\mathcal{U}$의 composition 성질에 따라,

$$\mathcal{U}(t+dt, t_0) = \mathcal{U}(t+dt, t)\,\mathcal{U}(t, t_0)$$
$$= \left(\mathbb{1} - i\frac{1}{\hbar}\mathcal{H}\,dt\right)\mathcal{U}(t, t_0)$$

$$\mathcal{U}(t+dt, t_0) - \mathcal{U}(t, t_0) = -i\frac{1}{\hbar}\mathcal{H}\,dt\,\mathcal{U}(t, t_0)$$

$$\frac{d\,\mathcal{U}(t, t_0)}{dt} = -i\frac{1}{\hbar}\mathcal{H}\,\mathcal{U}(t, t_0)$$

즉, 양자에서는 $\frac{d}{dt} = -i\frac{1}{\hbar}\mathcal{H}$ 인 것.

위 식에서 양 변에 $|\alpha, t_0\rangle$를 곱하면,

$$\frac{d}{dt}|\alpha, t\rangle = -i\frac{1}{\hbar}\mathcal{H}|\alpha, t\rangle$$

이게 슈뢰딩거 방정식이다.

Energy eigen state and stationary state.

energy eigenket이 $\mathcal{H}|\psi_{E,t}\rangle = E|\psi_{E,t}\rangle$. 라면, $(E \in \mathbb{R})$

$\mathcal{H} = +i\hbar\frac{d}{dt}$ 이므로, $+i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_{E,t}\rangle = E|\psi_{E,t}\rangle$

t에 대한 간단한 미방이다.

해는 $|\psi_{E,t}\rangle = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)|\psi_{E,0}\rangle$

Energy eigenket 은 시간이 지나도 phase 만 바뀐다.

Energy eigenket 을 basis 로 사용하여, time evolution 을 모든 ket 에 대해 일반화 해 보자.

$$|\alpha\rangle = \sum_E C_\alpha(E)\,|\psi_E\rangle \quad \text{at } t=0. \quad , \quad C_\alpha(E) = \langle \psi_E | \alpha \rangle$$

$$|\alpha, t\rangle = \mathcal{U}(t,t_0)|\alpha,0\rangle = \sum_E C_\alpha(E)\,\mathcal{U}(t,t_0)|\psi_{E,0}\rangle$$

$$= \sum_E C_\alpha(E)\,|\psi_{E,t}\rangle$$

$$= \sum_E C_\alpha(E)\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)|\psi_{E,0}\rangle$$

서로다른 energy eigenket 들의 phase 변화가 제각기 다르다.

observable 을 다른 energy eigenket 사이 샌드위치 해 보자.

$$\langle \psi_{E,t}|A|\psi_{E',t}\rangle = \langle \psi_{E,0}|\exp\left(i\frac{E}{\hbar}t\right) A \exp\left(-i\frac{E'}{\hbar}t\right)|\psi_{E',0}\rangle$$

$$= \exp\left(-i\frac{(E'-E)}{\hbar}t\right)\langle \psi_{E,0}|A|\psi_{E',0}\rangle.$$

두 에너지의 차이에 따른 각속도로 phase 가 바뀐다.

여러 케이스에 따른 슈뢰딩거 방정식 풀기.

$i\hbar\frac{d}{dt}\mathcal{U} = \mathcal{H}\,\mathcal{U}$ 를 어떻게 푸는가?

case 1) $\mathcal{H}$ 가 시간에 대해 독립적일 때.

$$\mathcal{U}(t,t_0) = \exp\left[-i\frac{\mathcal{H}}{\hbar}(t-t_0)\right]$$

이건 composition property 와 부합하기도 한다

$$\mathcal{U}(t,t_0) = \lim_{N\to\infty}\left(\mathbb{1} - i\frac{\mathcal{H}}{\hbar}\frac{t-t_0}{N}\right)^N = \exp\left[-i\frac{\mathcal{H}}{\hbar}(t-t_0)\right]$$

case 2) $\mathcal{H}$ 가 시간에 의존적이지만, $[\mathcal{H}(t_1), \mathcal{H}(t_2)] = 0$

for $\forall\, t_1, t_2$ ~~except t_1~~

$$i\hbar\frac{d}{dt}\mathcal{U}(t,t_0) = \mathcal{H}(t)\,\mathcal{U}(t,t_0)$$

그래도 간단하다.

$$\frac{1}{\mathcal{U}}d\mathcal{U} = -i\frac{1}{\hbar}\mathcal{H}(t)\,dt.$$

$$\mathcal{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,\mathcal{H}(t')\right]$$

이걸 테일러 전개해서 표현한다면,

$$\mathcal{U}(t,t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^N \left(\int_{t_0}^{t} dt\, \mathcal{H}(t')\right)^N.$$

Case 3) $\mathcal{H}$가 시간에 의존적이면서 $[\mathcal{H}(t_1), \mathcal{H}(t_2)] \neq 0$

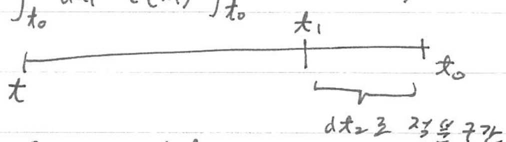
적분할 때 $\mathcal{H}$의 서로 다른 시간들 순서가 절대 바뀌면 안 된다.

아까 본 $\frac{1}{n!}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^N \left(\int_{t_0}^{t} dt'\, \mathcal{H}(t')\right)^N$

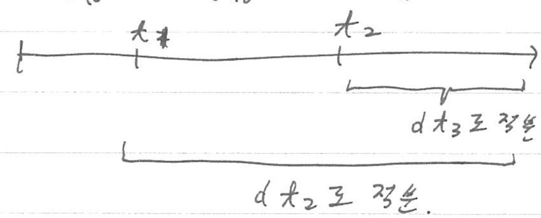
의 모든 N에 대한 각 항들이 시간 순서에 따른 $\mathcal{H}$의 순서를 고려하는 적분으로 바뀌어야 한다.

n=1 부터 대입하면서 차례로 비교해 보자.

	$[\mathcal{H}(t_1), \mathcal{H}(t_2)] = 0$	$[\mathcal{H}(t_1), \mathcal{H}(t_2)] = 0$
n=1	$\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \mathcal{H}(t')$	$\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, \mathcal{H}(t_1)$
n=2	$\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \frac{1}{2}\left(\int_{t_0}^{t} dt'\, \mathcal{H}(t')\right)^2$	$\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1\, \mathcal{H}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \mathcal{H}(t_2)$
	$\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \frac{1}{3!}\left(\int_{t_0}^{t} dt'\, \mathcal{H}(t')\right)^3$	$\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} dt_1\, \mathcal{H}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \mathcal{H}(t_2) \int_{t_0}^{t_2} dt_3\, \mathcal{H}(t_3)$



t_1은 t_0부터 t까지 전부 한번씩 넘어봄.



$N \to \infty$ 까지 모든 N에 대해 적분항을 더하면,

$$\mathcal{U}(t,t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1\, \mathcal{H}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \mathcal{H}(t_2) \cdots \int_{t_0}^{t_{N-1}} dt_N\, \mathcal{H}(t_N)$$

이걸 Dyson series 라고한다.

Energy - time uncertainty

position - momentum uncertainty 와는 다르게,

시간은 관측량이 아니기 때문에 좀 다르게 접근해야 한다.

~~측정 시간과 에너지 사이의~~

경과 시간과 에너지 분포 사이의 관계를 보자.

어떤 상태 $|\alpha\rangle$ 가 t 시간이 지난 뒤에, 처음의 자신과

얼마나 닮아 있는가?

correlation amplitude 를 이렇게 정의하자.

$$C(t) = \langle\alpha|\alpha, t\rangle = \langle\alpha| \mathcal{U}(t,0) |\alpha\rangle$$

그럼 $|\alpha\rangle$ 가 t 시간 뒤에도 $|\alpha\rangle$ 로 남아 있을 확률은

$$|C(t)|^2 = |\langle\alpha| \mathcal{U}(t,0) |\alpha\rangle|^2$$

아까 $|\alpha, t\rangle$ 를 에너지의 eigenket 으로 나타냈다.

$$|\alpha, t\rangle = \sum_E c_\alpha(E) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) |\psi_{E,0}\rangle$$

$$\langle\alpha| = \sum_E c_\alpha^*(E) \langle\psi_{E,0}|$$

$$C(t) = \sum_{E'}\sum_E c_\alpha^*(E') c_\alpha(E) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \langle\psi_{E',0}|\psi_{E,0}\rangle$$

$$C(t) = \sum_E |c_\alpha(E)|^2 \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

에너지 레벨이 연속적으로 분포하고 있다고 가정하면,

summation을 integral 로 나타낼 수 있다.

$\rho(E)$ 가 density of energy eigenket 이고,

$c_\alpha(E)$ 의 역할을 $g(E)$ 가 대신할 때,

$$\sum_E \to \int dE \rho(E) \qquad c_\alpha(E) \to g(E)$$

$$C(t) = \int dE \rho(E) |g(E)|^2 \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

에너지 분포가 E_0 에 집중되어 있다 치자. $\Delta E = E - E_0$ 일 때,

$t \simeq \frac{\hbar}{\Delta E}$ 이상의 order로 시간이 바뀌면 phase가 빠르게 돌아가는 상태.

즉, $\frac{\hbar}{\Delta E}$ 이상의 시간이 지나면 원래의 형태를 잃어버리기 시작한다. $\Delta t \Delta E \sim \hbar$