QM week 6_1

중간고사는 4/16 목요일 3-6 PM.

$i\hbar \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} = \mathcal{H}\mathcal{U}$ 를 유도하는 법을 다시 공부해 보자.

$\mathcal{U}(dt+t,0) = \mathcal{U}(dt+t,t)\,\mathcal{U}(t,0)$ 을 이용한다.

$$\mathcal{U}(dt+t,0) = \exp\left(-i\frac{1}{\hbar}\mathcal{H}(t)\,dt\right)\mathcal{U}(t,0)$$
$$= \left(1 - i\frac{1}{\hbar}\mathcal{H}(t)\,dt\right)\mathcal{U}(t,0)$$

$$\mathcal{U}(dt+t,0) - \mathcal{U}(t,0) = -i\frac{1}{\hbar}\mathcal{H}\,dt\,\mathcal{U}(t,0)$$
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}(t,0) = \mathcal{H}\mathcal{U}(t,0).$$

증명 완료. 아마도.

아무튼, 이 time translation operator 에 대한 미분방정식은 슈뢰딩거의 wave equation 으로 이어진다. $\mathcal{U}|\alpha,0\rangle = |\alpha,t\rangle$ 를 이용.

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t\rangle = \mathcal{H}|\alpha,t\rangle$, ~~$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x'|\alpha,t\rangle = \mathcal{H}\langle x'|\alpha,t\rangle$~~

~~$\langle x'|\mathcal{H}|\alpha,t\rangle$ 가 정당하지~~

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x'|\alpha,t\rangle = \langle x'|\mathcal{H}|\alpha,t\rangle$. $\mathcal{H}$를 어떻게 밖으로 꺼내나.

$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}p^2 + V(x)$ 의 형태라면,

$V(x) = \langle x'|V(x)|x''\rangle = V(x')\,\delta(x'-x'')$

그리고 익히, $\langle x'|p|\alpha\rangle = -i\hbar\nabla\langle x'|\alpha\rangle$ 라고 알고 있다.

이전에 증명한 적 있으니 다시 공부하기, $\langle x'|\frac{1}{2m}p^2|\alpha\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\langle x'|\alpha\rangle$

결국은, $\langle x'|\mathcal{H}|\alpha,t\rangle = \langle x'|\frac{1}{2m}p^2 + V|\alpha,t\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\langle x'|\alpha,t\rangle$

이렇게 슈뢰딩거의 wave equation이 나온다.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_\alpha + V\psi_\alpha.$$

$\mathcal{H}$ 에 대한 eigenstate, $\langle x'|a\rangle = u(x')$, $\langle\mathcal{H}|a\rangle = E_a|a\rangle$

슈방에 넣으면 간단한 미방이 나온다. $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)u(x') = E_a u(x') = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u$

Wave function의 해석.

$\mathcal{U}$가 unitary 하기 때문에, $\mathcal{U}^{\dagger}(t)\,\mathcal{U}(t) = 1$ 이다.

따라서 normalized 된 상태는 시간진화를 해도 계속 normalized 되어있다.

probability density, $\rho = |\psi|^2$ 이라 둘 때,

$\int \rho\, dx = \int |\psi|^2 dx$ 는 시간이 지나도 변치 않는다. 이게 probability conservation.

$$\frac{d}{dt}\int \rho\, dx = \frac{d}{dt}\int dx^3\, \psi^* \psi = \int dx^3 \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)\psi + \psi^*\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right) = 0.$$

슈뢰딩거 방정식을 이용해 시간 미분된 wave function term을 정리.

$$\frac{d}{dt}\psi = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \rho\, dx = \frac{1}{i\hbar}\int dx^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* - V\psi^*\right)\psi + \psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi\right)$$

ψ 와 ψ^*, V는 연산자가 아니라 함수라서 교환이 성립한다.

$V\psi^*\psi$ 와 $\psi^* V\psi$ 가 cancle out.

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \rho\, dx = \frac{\hbar}{2mi}\int dx^3 \left(\nabla^2\psi^*\right)\psi - \psi^*\left(\nabla^2\psi\right)$$

여기에, $\nabla\cdot[\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi] = \psi\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2\psi + (\nabla\psi)\cdot(\nabla\psi^*) - (\nabla\psi^*)\cdot(\nabla$

$$= \psi\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2\psi.$$

이것을 이용.

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \rho\, dx = \frac{i\hbar}{2m}\int dx^3\, \nabla\cdot\left[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right]$$

이렇게 probability ~~current~~ flux 를 정의한다. $J = -\left(\frac{i\hbar}{2m}\right)\left[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right]$

$\therefore \int \frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot J \; dx^3 = 0.$ 이게 바로 continuity equation 이다.

양자역학 공식에서 무엇 바꿔야 고전역학이 될까?

Hamilton Jacobi equation. 을 먼저 알아야 된다.

나는 Tong 의 고전역학 강의노트를 기준으로 공부했다.

① 운동의 시작점, q^i, 운동의 끝점 q^f, 그리고 총 운동 시간 T가 주어졌을 때,
이 조건을 만족하며 오일러-라그랑주 방정식을 만족하는 경로 $q^{classical}$ 이 있다 치자.
어떤 함수 W는 q^i, q^f, T 가 주어졌을 때 $q^{classical}$의 액션을 반환한다.

$$W(q^i_j, q^f_j, T) = S(q^{classical}) = \int_0^T \mathcal{L}(q^{classical}, \dot{q}^{classical}, t)\,dt.$$

② δS를 구하면 오일러-라그랑주 방정식 쪽은 0 이 된다.

$$\delta S = \int_0^T \delta q\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}\right)\right]dt + \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}\delta q\right]_0^T = \left.\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}\right|_{final}\delta q^{final} - \left.\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}\right|_{initial}\delta q^{initial}$$

~~따라서 W 를~~ $\therefore\ \delta S = p^{final}\,\delta q^{final} - p^{initial}\,\delta q^{initial}.$

따라서 W를 q^f에 대해 미분하면 마지막 점에서 운동량 p^{final}이 나온다.

$$\frac{\partial W}{\partial q^{final}} = \frac{\delta S}{\delta q^{final}} = p^{final}.$$

이제 W의 T에 대한 전미분을 구해 보자. $\frac{dW}{dT}$ 자체는 마지막 시점에서 라그랑지안이다

$$\frac{dW}{dT} = \mathcal{L}(q^{final}_j, \dot{q}^{final}, T).$$

그런데 $\frac{dW}{dT}$를 편미분으로 쪼갤 수 있다.

$$\frac{dW}{dT} = \frac{\partial W}{\partial T} + \frac{\partial W}{\partial q^{final}_j}\dot{q}^{final}_j = \frac{\partial W}{\partial T} + p^{final}_j\dot{q}^{final}_j = \mathcal{L}^{final}.$$

어라? 르장드르 변환이 가능하다.

$$\frac{\partial W}{\partial T} = \mathcal{L}^{final} - p^{final}_j\dot{q}^{final}_j = -\mathcal{H}(q^{final}_j, p^{final}_j, T)$$

아까 p^{final}도 W로 나타낼 수 있었으므로,

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\mathcal{H}\left(q_j, \frac{\partial W}{\partial q_j}, t\right)$$ 이게 바로 Hamilton-Jacobi eq.

정리하면,

$$\frac{\partial W}{\partial q_j^f} = p_j^f \quad , \quad \frac{\partial W}{\partial t} = -\mathcal{H}$$

우리는 W를 어떻게 이해해야 할까? 운동의 시작점은 고정해 두고, 끝점 q^f와 t만 변수로 받는 함수로 보자. 이것은 configuration space에 펼쳐져 있고, 시간에 따라 변화하는 스칼라 장이다. $\nabla W_{(t)} = \mathbb{P}_{(t)}$이기 때문에, 이 스칼라장의 기울기가 한 순간, 그 지점에서 운동을 결정한다. 한 시점에서, W 값이 같은 점을 모은 면을 생각한다면 (마치 ~~전기장~~ 전기포텐셜에서 등전위 면처럼) 입자는 그 면에 수직한 방향으로 움직인다.

최소 작용의 원리에 따라, 입자는 액션을 줄이기 위해 W의 기울기를 따라 운동한다.

즉, $W(q,t)$는 "입자가 t시간에 q위치에 있기위해 지금까지 운동한 액션"이다.

해밀토니안이 일정하다면, $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = 0$ 이라면,

$$\frac{\partial^2 W}{\partial t^2} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = 0 \quad , \quad \frac{\partial W}{\partial t} = \text{constant}.$$

, W는 t에 대한 일차 항을 가진다

어떤 상수 E를 이용해, $W(q,t)$를 위치와 시간에 대한 함수로 분리할 수 있다.

$W = W^0(q) - Et$. , 여기서 E는 초기 상태에 의해 정해지는 값이며, 곧 있으면 이게 total energy 라는 점을 알게 된다.

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V = \frac{1}{2m}\sum_j \left(\frac{\partial W}{\partial q_j}\right)^2 + V = \frac{1}{2m}|\nabla W|^2 + V$$

를 $W(q,t)$와 해밀턴-자코비 방정식에 대입

$$\frac{\partial}{\partial t}(W^0 - Et) = -\frac{1}{2m}|\nabla(W^0 - Et)|^2 + V$$

$$-E + \frac{1}{2m}|\nabla W^0|^2 + V = 0 \quad , \quad |\nabla W^0| = \sqrt{2m(E-V)} = |\mathbb{P}|$$

$$\mathbb{P} = \nabla W(q,t) = \nabla W^0$$

이 점을 감안하면, $E-V$가 바로 $\frac{|\mathbb{P}|^2}{2m}$, 운동 에너지, E는 곧 총 에너지다. $W(q,t)$를 결정할 때 E를 초기 상태에 따라 총 에너지로 지정해 주고, ∇W^0를 풀어주면, 그것은 총 에너지 E를 보존하는 입자의 운동을 기술하는 W가 되는 것이다.

특정한 W' 값을 가지는 면을 시간에 따라 추적할 수 있다.
이것은 ~~E의 속력은~~ 이동속도의 크기가 E이고, 마치 파동의 파면의 phase velocity에 비유할 수 있다.

이제 양자역학과 연관지어 보자. 파동함수를 복소수 극좌표 계로 나타낼 것이다.

어떤 함수 $\Theta(x,t)$ 에 대해, $\psi = e^{i\Theta/\hbar}$ 라고 나타내자.

이걸 슈뢰딩거 방정식에 넣어보자. $\nabla^2 \psi = \nabla^2 e^{i\Theta/\hbar}$ 를 계산하는 게 관건.

1차원에서 계산해서 가닥을 잡자.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\partial \Theta}{\partial x}\right)\psi\right] = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2}\right)\psi - \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial \Theta}{\partial x}\right)^2 \psi.$$

$$\nabla^2 \psi = \frac{i}{\hbar}(\nabla^2 \Theta)\psi - \frac{1}{\hbar^2}|\nabla \Theta|^2 \psi.$$

이를 이용해 슈방을 풀고 정리하면 Θ 에 대한 미방을 얻을 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial t}\Theta + \frac{1}{2m}|\nabla \Theta|^2 + V = \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 \Theta$$

만약 $\hbar \to 0$ 이라면, W 대신 Θ 에 대한

Hamilton Jacobi equation 이 되는 것이다.

양자역학 방정식이 고전적으로 되는 것이다.

$\psi = \exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\cdot \text{고전적 작용}\right)$. 양자역학에서는 작용이 phase를 돌린다.

Θ 를 $\hbar$ 에 대해 expand 해보자. 0차항이 고전적 W 가 되리라 기대한다.

$$\Theta \simeq W + \frac{\hbar}{i}W_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 W_2 + \cdots$$

이 식에서 보았을 때, $\hbar|\nabla^2 W| << |\nabla W|^2$ 일 때,

즉 W 의 변화가 $\hbar$ 보다 클 때, $\psi = \exp(i\Theta/\hbar)$ 의 phase가 위치에 따라 확확 돌아갈 때 고전적이게 된다.

드 브로이 물질파가 좋은 예시다.

$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$ (수업 때 필기를 잘못 쓴 거 같음)

Θ 를 $\hbar$ 에 대해 expand 한 걸 Θ 에 대한 미방에 넣어보자. W_1 을 구할 수 있다.

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}W_1 + \frac{1}{2m}\cdot\frac{\hbar}{i}\cdot 2\times(\nabla W \nabla W_1) = i\hbar\frac{1}{2m}\nabla^2 W$$

대체 어떻게 유도한 건지 확인할 필요 있다.

W_1 까지 구하면 이건 probability density ρ를 결정.

$$\psi = e^{iS/\hbar} = e^{i(W + \frac{\hbar}{i}W_1)/\hbar} = e^{W_1} e^{iW/\hbar}$$

$$|\psi|^2 = e^{2W_1} = \rho(x,t)$$

"고전적 액션에서 벗어난 항이 probability distribution를 만든다."