QM week 6 - 2.

지난 시간 복습) $\hbar |\nabla^2 S| << |\nabla S|^2$ 이면 고전적이게 된다.

질문) $p = \nabla S$ 였다. 그러면 위 내용은 '운동량이 크면 고전적이게 된다.'와 같은 말인가

오늘은 파인만의 경로적분을 공부해 보자.

Propagators and Feymann Path integral

선형 미방은 모두 적분 방정식으로 변환 할 수 있다.

이미 알고 있는 것; $|\alpha, t\rangle$ 를 구하고 싶다. 특정 basis $|a\rangle$ 로의 계수 $\langle a|\alpha, t_0\rangle$ 를 알고 있을 때, $|a\rangle$ 의 시간진화의 합으로 $|\alpha, t\rangle$ 를 구할 수 있다.

shrodinger picture 이다.

$$|\alpha, t\rangle = \sum_a \mathcal{U}(t, t_0)|a\rangle\langle a|\alpha, t_0\rangle$$
$$= \sum_a \exp\left(-i\frac{\mathcal{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|a\rangle\langle a|\alpha, t_0\rangle$$

$|a\rangle$ 가 $\mathcal{H}$ 에 대한 eigen ket 이라면, $\mathcal{H}|a\rangle = E_a|a\rangle$

$$\psi(x'', t) = \langle x''|\alpha, t\rangle = \sum_a \exp\left(-i\frac{E_a}{\hbar}(t-t_0)\right)\langle x''|a\rangle\langle a|\alpha, t_0\rangle$$

나는 t_0 에서 ψ 와 t 에서 ψ 를 연결하고 싶다.

$\langle a|\alpha, t_0\rangle$ 사이에 $\int dx' |x'\rangle\langle x'|$ 를 끼워 넣자.

$$\psi(x'', t) = \int dx' \sum_a \exp\left(-i\frac{E_a}{\hbar}(t-t_0)\right)\langle x''|a\rangle\langle a|x'\rangle\langle x'|\alpha, t_0\rangle$$

$$= \int dx' \underbrace{\sum_a \exp\left(-i\frac{E_a}{\hbar}(t-t_0)\right)\langle x''|a\rangle\langle a|x'\rangle}\psi(x', t_0)$$

위치 x' 와 x'', 시간 t_0 와 t 를 이어주는 propagator 를 이렇게 정의한다.

$$K(x'', x'; t, t_0) = \sum_a \exp\left(-i\frac{E_a}{\hbar}(t-t_0)\right)\langle x''|a\rangle\langle a|x'\rangle$$

$$\psi(x'', t) = \int dx' K(x'', x'; t, t_0)\psi(x', t_0)$$

propagator 를 어떻게 외우면 좋을까. E_a 의 크기 만큼, 시간이 지난 만큼 phase 가 돌아간 채로 $\psi_a^*(x')$ 가 $\psi_a(x'')$ 로 전환된다.

$$K(x'', x'; t, t_0) = \sum_a \langle x''|a\rangle \exp\left(-i\frac{E_a}{\hbar}(t-t_0)\right)\langle a|x'\rangle$$
$$= \sum_a \exp\left(-i\frac{E_a}{\hbar}(t-t_0)\right)\psi_a(x'')\psi_a^*(x')$$

propagator의 특성.

첫번째 특성) final variable 에서 슈뢰딩거 방정식이 성립.

초기 상태, (x', t_0) 를 고정으로 두고 K 를 x'' 와 t 에 대한 함수로만 볼 때, K 는 슈방을 만족한다.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K = \mathcal{H}(x'') K$$

두번째 특성) $t \to t_0$ 이면 $\psi(x'', t)$ 와 $\psi(x', t_0)$ 이므로, K 가 디락 델타다.

$$\psi(x'', t_0) = \int dx' \, \underbrace{\delta(x'' - x')}_{\lim_{t \to t_0} K(x'', t; x', t_0) = \delta(x'' - x')} \psi(x', t_0) = \psi(x'', t_0)$$

증명. $\lim_{t \to t_0} K(x'', t; x', t_0) = \lim_{t \to t_0} \langle x'' | a \rangle \exp\left(-i \frac{E_a}{\hbar}(t - t_0)\right) \langle a | x' \rangle$

$$= \sum_a \langle x'' | a \rangle \langle a | x' \rangle = \delta(x'' - x')$$

$$K = \sum_a \langle x'' | a \rangle \exp\left(-i \frac{1}{\hbar} E_a (t - t_0)\right) \langle a | x' \rangle$$

$$= \langle x'' | \exp\left(-i \frac{1}{\hbar} \mathcal{H}(t - t_0)\right) | x' \rangle$$

즉 propagator 는 time evolution operator 를 position basis 로 나타내었을 때 matrix element 였다.

K 는 초기 wavefunction 이 dirac delta 일 때 슈방의 해 이다. 즉, Green function

Green function 을 쓴다는 점에서, 전정기학에서 푸아송 방정식과 propagator 을 이용한 슈뢰딩거 방정식의 풀이는 비슷하다.

	전하분포와 포텐셜	wave function.
신호	x' 위치 전하분포 $\rho(x')$	과거 wave function x' 위치 값 $\psi(x', t_0)$
반응	x'' 위치 포텐셜 $\phi(x'')$	현재 wave function x'' 위치 값 $\psi(x'', t)$
Green function.	점전하 포텐셜 $G(x'', x') = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{1}{\lvert x'' - x' \rvert}$	propagator $K(x'', t; x', t_0) = \langle x'' \| \mathcal{U}(t, t_0) \|$
general solution	$\phi(x'') = \int dx' \, G(x'', x') \rho(x')$	$\psi(x'', t) = \int dx' \, K(x'', x'; t, t_0) \psi(x', t_0)$
Green function의 정체.	$\nabla^2 G = -\delta(x'')$	t_0 에서 wave function 이 디락델타 일 때 t 에서 wave function.

K 가 t_0 에서 wavefunction 이 디락 델타 일 때 t 에서 슈뢰딩거 방정식의 해 라면, 아래 방정식이 성립. → 왜 그런지 납득이 안 된다.

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2 + V - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right] K = -i\hbar \quad \delta(x' - x') \, \delta(t' - t)$$

example) free particle propagator.

$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m}$, 이러면 해밀토니안의 eigenket은 그저 $|p'\rangle$이다.

$\mathcal{H}|p'\rangle = \frac{1}{2m} p'^2 |p'\rangle$.

$$K(x'', t; x', t_0) = \sum_{p'} \langle x''|p'\rangle \exp\left(-i\frac{\mathcal{H}}{\hbar}(t'-t_0)\right)\langle p'|x'\rangle$$

$\langle x''|p'\rangle$
$= \exp(i\frac{p'}{\hbar}x'')\frac{1}{2\pi\hbar}$

$$= \int dp' \exp\left(-i\frac{p'^2}{2m\hbar}(t'-t_0)\right)\langle x''|p'\rangle\langle p'|x'\rangle$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp' \exp\left[i\frac{p'}{\hbar}(x''-x')\right] \cancel{\times} \exp\left[-i\frac{p'^2}{2m\hbar}(t'-t_0)\right]$$

$$= \frac{1}{2m\hbar}\int dp' \exp\left[i\frac{p'}{\hbar}(x''-x') - i\frac{p'^2}{2m\hbar}(t-t_0)\right]$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}\exp\left(\frac{im(x''-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right)$$

p'에 대한 완전제곱식으로 바꾼 뒤, Gaussian integral 하면 될 거다.

양자역학에서 action은 phase를 돌린다 →.
고전역학적으로 free particle의 action은 뭘까.
라그랑지안은 단순히 운동에너지. $\mathcal{L}(x(t'), \dot{x}(t')) = \frac{m}{2}\{\dot{x}(t')\}^2$.
고전적으로, 입자는 시간 t_0에서 x' 위치에 있다가 등속운동하며 시간 t에 x''에 도달할 것이다.

$$x(t') = x' + \frac{x''-x'}{t-t_0}(t'-t_0), \quad \dot{x}(t') = \frac{dx(t')}{dt'} = \frac{x''-x'}{t-t_0}$$

$$\mathcal{L} = \frac{m(x''-x')^2}{2(t-t_0)^2}, \quad S = \int_{t_0}^{t} dt' \mathcal{L} = \frac{m(x''-x')^2}{2(t-t_0)^2}\cdot(t-t_0) = \frac{m(x''-x')^2}{2(t-t_0)}$$

앞에서 구한 free particle propagator의 exponential 부분이 정확하게 $\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$ 이다. 부호에 유의하자!

propagator의 trace를 구해 보자. propagator는 time evolution operator를 position basis로 나타낸 matrix, $\langle x''|\mathcal{U}(t, t_0)|x'\rangle$ 이므로, 이것의 trace는 $x''=x'$일 때 값을 모두 더한 것이다. 즉, 그 위치의 파동함수가 그대로 유지될 확률이 trace다

이 trace를 $G(t)$ 라고 쓰자. $t_0=0$ 이라 고정했다.

$$G(t) = \int dx' \, K(x', t ; x', 0)$$
$$= \int dx' \sum_a \langle x' | a \rangle \langle a | x' \rangle \exp\left(-\frac{iE_a}{\hbar} t\right)$$
$$= \sum_a \exp\left(-\frac{iE_a}{\hbar} t\right) \int dx' \langle x' | a \rangle \langle a | x' \rangle \quad \rightarrow \text{normalization으로 적분값이 1.}$$
$$= \sum_a \exp\left(-\frac{iE_a}{\hbar} t\right)$$

어쩐지 t 가 붙었다는 점을 제외하면 통계역학의 partition function과 비슷해 보인다. 그렇다! $\beta = \frac{it}{\hbar}$ 였다. t를 imaginary로 만들면 β가 실수가 된다.

질문) $\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{it}{\hbar}$ 이다. 시간 · 플랑크상수 · 온도 · 볼츠만 상수 사이의 관계는?

이제 G를 라플라스 변환 해 보자. 사실 푸리에 변환 하고 싶었는데, $t>0$로 인과율에 의해 범위가 제한되어 있어 라플라스 변환이 되는 것이다.

시간에 대한 공간에서 에너지에 대한 공간으로 변환!

$$\tilde{G}(E) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \, G(t) \exp(iEt/\hbar)$$

앞에 $-\frac{i}{\hbar}$가 붙은 이유 뭐지.

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \sum_a \exp(-iE_a t/\hbar) \exp(iEt/\hbar)$$

이대로 적분하면 발산한다. 대신 $E \rightarrow E + i\varepsilon$ 라고 두고, $\varepsilon \rightarrow 0$으로 보내버리면 $\lim_{\varepsilon \to 0} \sum_a -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \exp(-\varepsilon E t/\hbar) \exp(i(E-E_a)t/\hbar) = \sum_a \frac{1}{E-E_a}$

$$\tilde{G}(E) = \sum_a \frac{1}{E - E_a}$$

을 얻을 수 있다. 계산 과정을 확인할 필요가 있다! $\tilde{G}(E)$는 에너지 스펙트럼, E_a의 값의 분포를 simple pole 의 형태로 내포하고 있다.

Propagators as a transition amplitude.

하이젠베르크 관점에서 propagator의 정체를 알아보자.

$$\mathcal{U}(t, 0) = \mathcal{U}(t, t_0) \, \mathcal{U}(t_0, 0) \quad \longrightarrow \quad \mathcal{U}(t, 0) \, \mathcal{U}^\dagger(t_0, 0) = \mathcal{U}(t, t_0)$$

를 대입,

$$K(x'', t ; x', t_0) = \langle x'', 0 | \, \mathcal{U}(t, t_0) \, | x', 0 \rangle = \langle x'', 0 | \, \mathcal{U}(t, 0) \, \mathcal{U}^\dagger(t_0, 0) \, | x', 0 \rangle$$

$\therefore \quad K(x'', t; x', t_0) = \langle x'', t | x', t_0 \rangle$

이는 t_0 에서 한 위치 basis와 t에서 다른 위치 basis 사이의 내적, 두 basis가 비슷한 정도를 나타낸다. 즉, $|x', t_0\rangle$ 상태가 $|x'', t\rangle$ 로 될 probability amplitude 이다.

Feynmann's formulation

~~K (N~~ $K(x_N, t_N; x_0, t_0)$ 를 아주 짧은 N개의 시간 간격으로 쪼갠 뒤, 각 time segment 에서 K 들의 곱으로 나타내자.

$$K(x_N, t_N; x_0, t_0) = \int dx_{N-1}\, dx_{N-2} \cdots dx_2\, dx_1\, K(x_N, t_N; x_{N-1}, t_{N-1})\, K(x_{N-1}, t_{N-1}; x_{N-2}, t_{N-2}) \cdots K(x_2, t_2; x_1, t_1)\, K(x_1, t_1; x_0, t_0)$$

$dx_{N-1}\ d_{N-2} \cdots dx_2\ dx_1$ 을 적분한다는 것은, (x₀, t₀) 에서 (x_N, t_N) 으로 가는 사이에 일어날 수 있는 모든 경로에 대해 적분한다는 뜻이다.

짧은 시간 동안의 K는 액션만큼 phase를 돌리는 기능을 한다.

$$K(x+\Delta x, t+\Delta t; x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x+\Delta x, t+\Delta t; x, t)\right)$$

$$\langle x_N, t_N | x_0, t_0 \rangle = \sum_{\text{모든 경로}} \prod_{\text{한 경로의 segment}} \exp\left(i \frac{1}{\hbar} S_{segment}\right)$$

모든 경로가 K 계산에 동등한 가중치를 가진다.

다만, 비고전적인 경로일 경우 스스로 빠르게 phase가 상쇄되어 잘 보이지 않게 된다.

해보기) 질량이 커질 수록, 고전적인 경로만 남게 된다는 걸 파인만 적분으로 보이자.