2026 PHYS501 Midterm Paper

Hypergeometric Function Quantization

Student Name: 김신지

Student ID: 20262182

Date: 2026.04.26.

Department of Physics

POSTECH

문제 원문

1. Find two coupled 1st order ordinary differential equations from the 2nd order ordinary differential equation of the hypergeometric function

$$t(1-t)\frac{d^2y}{dt^2} + [c - (a+b+1)t]\,\frac{dy}{dt} - ab\,y = 0 \tag{0}$$

(1) Find the corresponding Lagrangian to give the 2nd order hypergeometric equation via the Euler Lagrange equation of motion.

(2) Performing the Legendre transformation, find the corresponding Hamiltonian and the Hamiltonian equation of motion.

(3) Through the canonical transformation, find the Hamilton Jacobi equation for the hypergeometric equation.

2. Quantize the hypergeometric equation.

(1) Find the corresponding Schrödinger equation for the hypergeometric equation. Show that the semiclassical approximation ($\hbar \to 0$) reduces this Schrödinger equation to the above Hamilton Jacobi equation. Can you find the eigenfunctions? You can use the Mathematica.

(2) Find the corresponding Heisenberg equation of motion for the hypergeometric equation. Can you introduce creation & annihilation operators to diagonalize the Hamiltonian operator? Construct the Hilbert space.

(3) Find the path integral formulation to show that it is a solution of the above Schrödinger equation. Can you perform the path integral explicitly, certainly possible in principle?

1-(1) 라그랑지안 찾기

전략: **Sturm–Liouville** 변환

식 (0)에서 바로 라그랑지안을 찾는 것은 어렵다. 따라서 먼저 **Sturm–Liouville Differential Equation** 형태로 변환하여 미분 연산자의 자기수반성을 확보한다.

Sturm–Liouville DE는 아래와 같은 형태이다:

$$\frac{d}{dx}\left[m(x)\frac{dy}{dx}\right] - g(x)y(x) + \lambda\, r(x)\, y(x) = 0 \tag{1}$$

이때, λ는 고유값(eigenvalue), $r(x)$는 가중 함수(weighting function)이다.

일반적인 2차 ODE를 Sturm–Liouville 형태로 변환하는 방법을 먼저 알아보고, 초기하 함수를 다뤄보자. 일반적인 2차 ODE가 다음과 같이 주어졌을 때:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + P(x)\frac{dy}{dx} + Q(x)y = 0 \tag{2}$$

이것을 식 (1)의 형태로 변환하는 계수 $m(x)$를 구해보자.

식 (1)을 전개하면:

$$m\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{dm}{dx}\frac{dy}{dx} - gy + \lambda ry = 0 \tag{4}$$

식 (2)의 양변에 m을 곱하면:

$$m\frac{d^2y}{dx^2} + mP\frac{dy}{dx} + mQy = 0 \tag{5}$$

식 (4)와 (5)가 같아야 하므로, $\frac{dy}{dx}$ 항을 비교하면: $mP = \frac{dm}{dx}$.

양변을 정리 후 적분하면:

$$\int P(x)\,dx = \int \frac{1}{m}\,dm = \ln(m(x)) \tag{6}$$

$$\boxed{m(x) = \exp\left(\int P(x)\,dx\right)} \tag{7}$$

이렇게 m은 P로 완전히 결정된다.

또한 y 항을 비교하면:

$$Q = \frac{\lambda r - g}{m} \tag{8}$$

연산자를 정의하자:

$$L(y) = \frac{d}{dx}\left[m\frac{dy}{dx}\right] - gy + \lambda ry = 0 \tag{9}$$

$$D(y) = -\frac{d}{dx}\left[m\frac{dy}{dx}\right] + gy \tag{10}$$

$$L(y) = [-D + \lambda r]\, y = 0 \tag{11}$$

결국 $L(y) = 0$은 $D(y) = \lambda ry$와 동치이다. y는 D 연산에 대한 고유함수, λ는 고유값, r은 가중 함수이다. D는 자기수반 연산자이다. 식 (10)을 보면 오일러–라그랑주 방정식과 비슷한 형태임을 알 수 있다.

초기하 방정식의 **Sturm–Liouville** 변환

문제에서 주어진 초기하 미분방정식 (0)을 정리하면:

$$\frac{d^2y}{dt^2} + \frac{c-(a+b+1)t}{t(1-t)}\frac{dy}{dt} - \frac{ab}{t(1-t)}y = 0 \tag{12}$$

식 (2)와 비교하면:

$$P(t) = \frac{c-(a+b+1)t}{t(1-t)}, \qquad Q(t) = -\frac{ab}{t(1-t)} \tag{13}$$

$m(t)$를 구하기 위해 $P(t)$를 적분한다:

$$\int P(t)\,dt = c\ln t - c\ln(1-t) + (a+b+1)\ln(1-t) \tag{14}$$

식 (7)을 이용해 $m(t)$를 구한다:

$$m(t) = t^c(1-t)^{a+b-c+1} \tag{15}$$

식 (12)의 양변에 $m(t)$를 곱해서 식 (4)의 형태로 맞춰준다.

$$m(t)\frac{d^2y}{dt^2} + m(t)\frac{c-(a+b+1)t}{t(1-t)}\frac{dy}{dt} - m(t)\frac{ab}{t(1-t)}y = 0 \tag{16}$$

$\frac{dm}{dt}$를 계산해 보면:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{c-(a+b+1)t}{t(1-t)}\,m \tag{17}$$

(17)의 좌변을 식 (16)과 비교하면:

$$m(t)\frac{d^2y}{dt^2} + \frac{dm}{dt}\frac{dy}{dt} = \frac{d}{dt}\left[m\frac{dy}{dt}\right] \tag{18}$$

정리하면 Sturm–Liouville DE가 나온다:

$$\frac{d}{dt}\left[m\frac{dy}{dt}\right] - ab\,t^{c-1}(1-t)^{a+b-c}\,y = 0 \tag{19}$$

y 앞에 붙은 계수를 $g(t)$라고 두면:

$$g(t) = ab\,t^{c-1}(1-t)^{a+b-c} \tag{20}$$

$$\frac{d}{dt}\left[m\frac{dy}{dt}\right] - g(t)y = 0 \tag{21}$$

라그랑지안 구성

식 (21)이 어떤 $\mathcal{L}(y,\dot{y},t)$에 대한 오일러–라그랑주 방정식임을 알아본다.

오일러–라그랑주 방정식을 아래와 같이 표현한다면:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{y}} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial y} = 0 \tag{22}$$

식 (21)과 비교하면:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}} = m(t)\dot{y}, \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} = g(t)y \tag{23}$$

따라서:

$$\mathcal{L}(y, \dot{y}, t) = \frac{1}{2}m(t)\dot{y}^2 + \frac{1}{2}g(t)y^2 \tag{24}$$

m과 g를 대입하면:

$$\boxed{\mathcal{L}(y, \dot{y}, t) = \frac{1}{2}t^c(1-t)^{a+b-c+1}\dot{y}^2 + \frac{1}{2}ab\,t^{c-1}(1-t)^{a+b-c}y^2} \tag{25}$$

일반화된 조화진동자(harmonic oscillator)의 형태이다. 단, 질량 $m(t)$와 스프링 상수 $-g(t)$가 모두 시간 (t)에 의존한다. 조화진동자의 방정식과 부호를 맞추기 위해, $k(t) = -g(t)$라고 두고 앞으로 식을 전개한다.

$$k(t) = -g(t) = -ab\,t^{c-1}(1-t)^{a+b-c} \tag{20-a}$$

$$\boxed{\mathcal{L}(y, \dot{y}, t) = \frac{1}{2}m(t)\dot{y}^2 - \frac{1}{2}k(t)y^2} \tag{24-a}$$

1-(2) 해밀토니안과 운동방정식

Conjugate momentum

Conjugate momentum p를 정의한다:

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}} = m(t)\dot{y} = t^c(1-t)^{a+b-c+1}\dot{y} \tag{26}$$

라그랑지안을 p로 나타내면 ($\dot{y} = p/m(t)$):

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2m(t)}p^2 - \frac{1}{2}k(t)y^2 \tag{27}$$

르장드르 변환

$$\mathcal{H}(y,p,t) = p\dot{y} - \mathcal{L} = \frac{p^2}{m(t)} - \left[\frac{1}{2m(t)}p^2 - \frac{1}{2}k(t)y^2\right]$$

$$\boxed{\mathcal{H}(y,p,t) = \frac{1}{2}\frac{p^2}{m(t)} + \frac{1}{2}k(t)y^2} \tag{28}$$

$m(t)$와 $k(t)$를 명시적으로 대입하면:

$$\boxed{\mathcal{H}(y,p,t) = \frac{1}{2}t^{-c}(1-t)^{-a-b+c-1}p^2 - \frac{1}{2}ab\,t^{c-1}(1-t)^{a+b-c}y^2} \tag{29}$$

조화진동자와 비슷한 꼴이지만, 질량 $m(t)$와 $k(t)$가 모두 t에 의존한다.

해밀턴 운동방정식

$$\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y} = -k(t)y, \qquad \dot{y} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p}{m(t)} \tag{30}$$

$m(t)$와 $k(t)$를 명시적으로 대입하면:

$$\begin{cases} \dot{p} = ab\,t^{c-1}(1-t)^{a+b-c}\,y \\ \dot{y} = t^{-c}(1-t)^{-a-b+c-1}\,p \end{cases} \tag{31}$$

1-(3) 해밀턴–야코비 방정식

전략: Generating function으로 해밀토니안을 0으로 만들기

Canonical transform $y \to Y$, $p \to X$를 도입한다. 이 변환이 이루어질 때 **type 2**generating function이자 액션인 $W(y, X, t)$는 다음을 만족한다:

$$p = \frac{\partial W}{\partial y}, \qquad Y = \frac{\partial W}{\partial X} \tag{32}$$

이 generating function W에 대해 해밀턴–야코비 방정식은:

$$\mathcal{H}\left(y, \frac{\partial W}{\partial y}, t\right) + \frac{\partial W}{\partial t} = 0 \tag{33}$$

이를 만족하는 W에 대해 $\dot{Y} = 0$, $\dot{X} = 0$이 된다. 즉 새 좌표에서 운동이 trivial해진다.

초기하 방정식의 해밀턴–야코비 방정식

식 (28)에 $p = \frac{\partial W}{\partial y}$를 대입하면:

$$\frac{1}{2}\frac{1}{m(t)}\left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2 + \frac{1}{2}k(t)y^2 + \frac{\partial W}{\partial t} = 0 \tag{34}$$

$m(t)$와 $k(t)$를 명시적으로 대입하면:

$$\boxed{\frac{1}{2}t^{-c}(1-t)^{-a-b+c-1}\left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2 - \frac{1}{2}ab\,t^{c-1}(1-t)^{a+b-c}y^2 + \frac{\partial W}{\partial t} = 0} \tag{35}$$

이것이 초기하 방정식에 대응하는 해밀턴–야코비 방정식이다.

2-(1) 슈뢰딩거 방정식과 WKB 극한

Canonical quantization

정준 양자화의 기본 규칙은 포아송 괄호를 commutator로 대응시키는 것이다:

$$\{y, p\}_{\mathrm{PB}} = 1 \quad \longrightarrow \quad [\hat{y}, \hat{p}]_{\mathrm{DB}} = i\hbar \tag{36}$$

p는 y에 대한 generator이기에, y에 대한 미분 연산자이다:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \tag{37}$$

이라면, 식 (36)의 commutation relation을 만족한다. y에 대한 어떤 함수 $f(y)$에 대해,

$$[y, \hat{p}]\, f(y) = -i\hbar \left(y\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}(yf) \right) = i\hbar\, f(y) \qquad \therefore\ \left[y,\, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right] = i\hbar$$

해밀토니안 연산자와 슈뢰딩거 방정식

고전 역학에서 해밀토니안에 대한 식 (28)에 연산자 $\hat{y}$와 $\hat{p}$를 대입:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m(t)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} k(t) y^2 \tag{38}$$

$m(t)$와 $k(t)$를 넣어 명시적으로 나타내면,

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2} t^{-c} (1-t)^{a+b-c+1} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{1}{2} ab\, t^{c-1} (1-t)^{a+b-c} y^2 \tag{39}$$

Wave function $\Psi(y, t)$에 대한 슈뢰딩거 방정식은 $\frac{d}{dt}\Psi = \frac{1}{i\hbar}\hat{\mathcal{H}}\Psi$이다. 여기에 식 (39)의 해밀토니안을 넣고 정리하면,

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi + \frac{\hbar^2}{2} t^{-c} (1-t)^{a+b-c+1} \frac{\partial^2}{\partial y^2}\Psi + \frac{1}{2} ab\, t^{c-1} (1-t)^{a+b-c} y^2 \Psi = 0} \tag{40}$$

이것이 초기하 함수에 대한 슈뢰딩거 방정식이다.

WKB approximation

Ψ를 복소 극좌표계로 나타낸다. $\Theta(y, t) \in \mathbb{C}$에 대해,

$$\Psi(y, t) = \exp\left(\frac{i\, \Theta(y, t)}{\hbar} \right) \tag{41}$$

이것을 슈뢰딩거 방정식 (40)에 대입해, $\Theta(y, t)$에 대한 방정식으로 바꾼다. 먼저 필요한 미분을 계산한다:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} \Psi - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial \Theta}{\partial y} \right)^2 \Psi \tag{42}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial \Theta}{\partial t}\Psi \tag{43}$$

식 (42)와 (43)을 슈뢰딩거 방정식에 대입하고 Ψ로 나누어 Θ에 대해 정리하면:

$$-\frac{\partial \Theta}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m(t)}\frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} - \frac{1}{2m(t)}\left(\frac{\partial \Theta}{\partial y}\right)^2 - \frac{1}{2}k(t)y^2 = 0 \tag{45}$$

위에서 $\hbar \to 0$의 극한으로 보내고, 양변에 -1을 곱하면:

$$\frac{1}{2}\frac{1}{m(t)}\left(\frac{\partial \Theta}{\partial y}\right)^2 + \frac{1}{2}k(t)y^2 + \frac{\partial \Theta}{\partial t} = 0 \tag{46}$$

식 (46)은 해밀턴–야코비 방정식 (34)와 같으며, 특히 식 (34)에서 액션 W의 역할을 $\Theta(y,t)$가 하고 있다.

고유함수를 구할 수 있는가?

앞서 구한 슈뢰딩거 방정식 (40)의 해밀토니안은 $m(t)$와 $k(t)$가 모두 시간에 의존한다. 2-(2)에서 보이겠지만, $[\hat{\mathcal{H}}(t_1), \hat{\mathcal{H}}(t_2)] \neq 0$이므로, 무엇보다 해밀토니안이 시간에 대해 명시적으로 의존하므로 에너지가 보존량이 아니다. 따라서 일반적인 의미의 stationary state가 존재하지 않는다. 시간에 무관한 고유함수를 엄밀히 구하는 것은 불가능하다고 생각한다.

그러나 각 고정된 시점 t에서 instantaneous eigenvalue problem을 세울 수는 있다. 특히 나중에 문제 2-(2)에서 확인하겠지만, 해밀토니안에서 t-dependent term인 $m(t)$와 $k(t)$가 아주 느리게 변화하는 adiabatic condition이라면 instantaneous eigenstate를 찾는 시도가 의미있을 것이다.

$$\hat{\mathcal{H}}(t)\,\phi_n(y;t) = E_n(t)\,\phi_n(y;t) \tag{40-a}$$

이때 순간 해밀토니안은

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m(t)}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}k(t)y^2$$

이며, $\hbar = 1$로 놓겠다. 지금 푸는 문제는 SHO와 거의 다를 바가 없다.

Instantaneous eigenvalue problem에서 bound state가 존재하려면 포텐셜 $V(y) = \frac{1}{2}k(t)y^2$이 confining potential, 즉 $k(t) > 0$이어야 한다.

대표로 $0 < t < 1$ 구간에서만 살펴보면, $t^{c-1} > 0$이고 $(1-t)^{a+b-c} > 0$이므로,

$$k(t) = -ab\,t^{c-1}(1-t)^{a+b-c}$$

의 부호는 ab의 부호로 결정된다. $ab < 0$인 경우가 bound state가 존재할 조건이다.

예를 들어, 초기하 함수 ${}_2F_1(1,1;2;-z) = \frac{\ln(1+z)}{z}$에 대응하는 $a=1$, $b=1$, $c=2$에서는

$$m(t) = t^2(1-t), \qquad k(t) = -t$$

이므로 $k(t) < 0$이다. 이 경우 포텐셜이 $V(y) = -\frac{t}{2}y^2$로 아래로 볼록하며, 물리적 bound state가 존재하지 않는다.

반면 $a=2$, $b=-1$, $c=2$로 놓으면

$$k(t) = 2t(1-t)^{-1} > 0 \quad (0 < t < 1)$$

이 되어 속박 포텐셜을 형성하고, 이산적인 고유함수가 존재한다.

$\hbar = 1$로 놓고, 수치적 계산을 위해 유한 영역 $[-y_{\max}, y_{\max}]$에 Dirichlet 경계조건 $\phi(\pm y_{\max}) = 0$을 부과하여 `NDEigensystem`으로 순간 고유값 문제를 수치적으로 풀었다. 아래는 $a=2$, $b=-1$, $c=2$, $t=0.5$에서의 처음 4개 고유함수를 구하는 Mathematica 코드이다.

```
Module[{a = 2, b = -1, c = 2, t0 = 0.5, nEig = 4, ymax = 5,
        mt, kt, evals, efuncs},
  mt = t0^c (1 - t0)^(a + b - c + 1);
  kt = -a b t0^(c - 1) (1 - t0)^(a + b - c);
  {evals, efuncs} = NDEigensystem[
    {-1/(2 mt) \[Phi]''[y] + (1/2) kt y^2 \[Phi][y],
     DirichletCondition[\[Phi][y] == 0, True]},
    \[Phi][y], {y, -ymax, ymax}, nEig
  ];
  Print["m(t) = ", mt, "   k(t) = ", kt];
  Print["eigenvalue: ", evals];
  Plot[Evaluate[efuncs], {y, -ymax, ymax},
    PlotLegends -> Table["n=" <> ToString[n], {n, 0, nEig - 1}],
    PlotLabel -> "instantaneous eigenfunction (a=2,b=-1,c=2,t=0.5)",
    AxesLabel -> {"y", "\[Phi](y)"},
    ImageSize -> Large
  ]
]
```

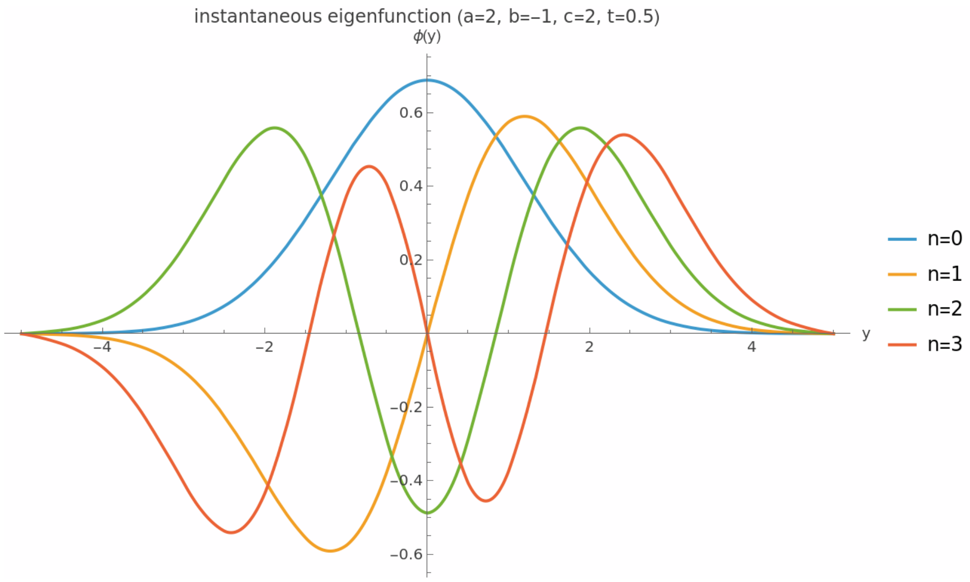

Figure 1: instantaneous eigen functions $(a = 2, b = -1, c = 2,\ t = 0.5)$

SHO와 유사한 discrete eigenfunction들이 나타난다. n이 증가함에 따라 node 수가 하나씩 늘어나며, 이는 조화진동자의 에르미트 함수와 정성적으로 일치한다.

2-(2) 하이젠베르크 운동방정식과 생성/소멸 연산자

준비: SHO에서의 ladder operator 복습

SHO에서 해밀토니안은:

$$\mathfrak{H} = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

p와 x에 대한 하이젠베르크 운동방정식을 구하면:

$$\frac{dx^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}U^\dagger[x,\mathfrak{H}]U = \frac{1}{i\hbar}\cdot\frac{1}{2m}U^\dagger[x,p^2]U = \frac{1}{i\hbar}\cdot\frac{1}{2m}U^\dagger(2i\hbar p)U = \frac{1}{m}p^H \tag{47}$$

$$\frac{dp^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}U^\dagger[p,\mathfrak{H}]U = \frac{1}{i\hbar}\cdot\frac{m\omega^2}{2}U^\dagger[p,x^2]U = \frac{1}{i\hbar}\cdot\frac{m\omega^2}{2}(-2i\hbar)U^\dagger yU = -m\omega^2 x^H \tag{48}$$

Matrix representation

이 coupled differential equation을 행렬 표현으로 나타내면, 파울리 행렬 $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$를 이용할 때:

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} p^H/m\omega \\ x^H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega \\ \omega & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p^H/m\omega \\ x^H \end{pmatrix} = -i\omega\,\sigma_y\begin{pmatrix} p^H/m\omega \\ x^H \end{pmatrix} \tag{49}$$

위는 벡터 $\begin{pmatrix} p^H/m\omega \\ x^H \end{pmatrix}$의 시간에 대한 간단한 1차 미분 방정식이다. 이것의 해는:

$$\begin{pmatrix} p^H(t)/m\omega \\ x^H(t) \end{pmatrix} = \exp(-i\omega t\,\sigma_y)\begin{bmatrix} p^H(0)/m\omega \\ x^H(0) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \sin(\omega t) \\ -\sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p^H(0)/m\omega \\ x^H(0) \end{pmatrix} \tag{50}$$

대각화와 creation annihilation operator 도출

식 (49)는 벡터 $\begin{pmatrix} p^H/m\omega \\ x^H \end{pmatrix}$에 대한 슈뢰딩거 방정식 $\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} p^H/m\omega \\ x^H \end{pmatrix} = \frac{\mathfrak{H}}{i\hbar}\begin{pmatrix} p^H/m\omega \\ x^H \end{pmatrix}$이면, 행렬 $\begin{pmatrix} 0 & -\omega \\ \omega & 0 \end{pmatrix}$가 $\frac{1}{i\hbar}\mathfrak{H}$이다. 따라서 해밀토니안을 대각화하는 것은 이 행렬이 대각행렬이 되도록 하는 similarity transform을 적용하는 것이다.

운동방정식 (49)의 양변을 무차원으로 만들기 위해 scale factor $\chi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$를 이용. $\mathbf{z} = \frac{1}{\chi}\begin{pmatrix} p^H/m\omega \\ x^H \end{pmatrix}$라 두고, 시간도 scaling $\tau = \omega t$를 적용하면:

$$\frac{d\mathbf{z}}{d\tau} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\mathbf{z} \tag{51}$$

이제 $\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ 를 대각화하는 변환행렬 V 를 찾으면:

$$\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = V^{-1} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} V \tag{52}$$

$$V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i & -i \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \qquad V^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i & 1 \\ i & 1 \end{pmatrix} \tag{53}$$

이를 식 (51)에 적용해 $\mathbf{z}$를 변환하면:

$$\frac{d}{d\tau} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i & 1 \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p^H/\chi m\omega \\ x^H/\chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i & 1 \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p^H/\chi m\omega \\ x^H/\chi \end{pmatrix}$$

양변에 행렬 연산을 한 결과물이 바로 ladder operator이다.

$$\frac{d}{d\tau} \begin{bmatrix} a^\dagger \\ a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^\dagger \\ a \end{bmatrix}$$

이때:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(i \frac{p^H}{m\omega} + x^H \right) \qquad \leftarrow \text{lowering operator (annihilation operator)}$$
$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(-i \frac{p^H}{m\omega} + x^H \right) \qquad \leftarrow \text{raising operator (creation operator)}$$

우리가 잘 알던 그 연산자이다.

초기하 함수에서의 하이젠베르크 방정식

이제 초기하 함수로 넘어와서, 시간에 따라 m과 k가 바뀌는 시스템에서도 비슷한 대각화 방식이 통할 것인지 확인할 것이다. y^H 에 대한 하이젠베르크 운동 방정식을 계산하자. SHO의 식 (47)을 오마주한다.

$$\frac{dy^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \mathcal{U}^\dagger(t) \left[y, \mathcal{H}(t) \right] \mathcal{U}(t) = \frac{1}{i\hbar} \mathcal{U}^\dagger(t) \left[y, \frac{1}{2m(t)} p^2 + \frac{1}{2} k(t) y^2 \right] \mathcal{U}(t) = \frac{1}{i\hbar} \cdot \mathcal{U}^\dagger(t) \frac{1}{2m(t)} \left[y, p^2 \right] \mathcal{U}(t) \tag{47-a}$$

이때, $\mathcal{U}^\dagger(t) \frac{1}{2m(t)} \left[y, p^2 \right] \mathcal{U}(t)$ 에서 $\frac{1}{m(t)}$ 를 두 time evolution operator 바깥으로 꺼내도 되는지 의문이다. 초기하 해밀토니안에서 비롯된 time evolution operator가 어떻게 정의되는지 확인할 필요가 있다.

시간 발전 연산자와 **Time-ordering**

이 시스템에서 $\mathcal{U}(t)$ 의 형태를 파악하기 위해, 서로 다른 시점에서 해밀토니안끼리 commute하는지 계산한다.

$$[\mathcal{H}(t_1), \mathcal{H}(t_2)] = \left[\frac{1}{2} \frac{p^2}{m(t_1)} + \frac{1}{2} k(t_1) y^2,\ \frac{1}{2} \frac{p^2}{m(t_2)} + \frac{1}{2} k(t_2) y^2 \right]$$

Bilinearity로 전개하면 $[p^2, p^2] = 0$, $[k(t_1)y^2, k(t_2)y^2] = 0$ 인 두 항은 소거되고:

$$= \frac{1}{4}\frac{k(t_1)}{m(t_2)}[y^2, p^2] + \frac{1}{4}\frac{k(t_2)}{m(t_1)}[p^2, y^2]$$

$[y^2, p^2] = 2i\hbar\{y, p\}$ 이고 $[p^2, y^2] = -[y^2, p^2]$ 이므로:

$$= \frac{i\hbar}{2}\{y, p\}\left(\frac{k(t_1)}{m(t_2)} - \frac{k(t_2)}{m(t_1)}\right) \tag{54}$$

$k(t)$ 와 $m(t)$ 의 공통 인수 $A(t) = t^c(1-t)^{a+b-c}$ 를 이용하면:

$$m(t) = (1-t)A(t), \qquad k(t) = -ab\, t^{-1}A(t) \tag{55}$$

$$\frac{k(t_1)}{m(t_2)} - \frac{k(t_2)}{m(t_1)} = ab\left(\frac{t_1(t_2-1)A^2(t_2) - t_2(t_1-1)A^2(t_1)}{t_1t_2(t_1-1)(t_2-1)A(t_1)A(t_2)}\right) \tag{56}$$

일반적인 $t_1 \neq t_2$ 에서 식 (56)은 값이 0이 아니므로:

$$\boxed{[\mathcal{H}(t_1),\, \mathcal{H}(t_2)] \neq 0 \quad \text{when } t_1 \neq t_2}$$

따라서, SHO와 다르게 초기하 해밀토니안은 time evolution operator를 Dyson series로 구해야 한다.

$$\mathcal{U}(t) = \mathbb{I} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1\, \mathcal{H}(t_1) \int_0^{t_1} dt_2\, \mathcal{H}(t_2) \cdots \int_0^{t_{N-1}} dt_N\, \mathcal{H}(t_N) \tag{58}$$

c-number 분리와 하이젠베르크 운동방정식

다시 y^H 에 대한 하이젠베르크 운동방정식을 구하는 식 (47-a)로 돌아와, $\mathcal{U}^\dagger(t)\frac{1}{2m(t)}[y, p^2]\mathcal{U}(t)$ 를 계산하다가 멈췄었다.

비록 $\mathcal{U}(t)$ 가 단순한 exponential이 아니라 Dyson series로 정의되기는 하지만, $\frac{1}{m(t)}$ 는 operator가 아니라 t 로 결정되는 스칼라 값(c-number)이기에, 여러 겹의 해밀토니안 연산자를 뚫고 나올 수 있다. 식 (47-a)를 마저 계산하면,

$$\frac{dy^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\cdot\mathcal{U}^\dagger(t)\,\frac{1}{2m(t)}[y, p^2]\,\mathcal{U}(t) = \frac{1}{i\hbar}\cdot\frac{1}{2m(t)}\mathcal{U}^\dagger(t)\,(2i\hbar\, p)\,\mathcal{U}(t) = \frac{1}{m(t)}\,p^H \tag{47-h}$$

이어서 p에 대한 운동방정식을 풀면

$$\frac{dp^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\mathcal{U}^\dagger(t)\,[p, \mathcal{H}(t)]\,\mathcal{U}(t) = \frac{1}{i\hbar}\cdot\frac{1}{2}k(t)\,(-2i\hbar)\,\mathcal{U}^\dagger(t)\,y\,\mathcal{U}(t) = -k(t)\,y^H \tag{48-h}$$

Coupled differential equation을 matrix representation으로 나타내면,

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} p^H \\ y^H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -k(t) \\ \frac{1}{m(t)} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p^H \\ y^H \end{pmatrix}$$

차원 맞추기와 대각화 시도

행렬 내부 요소의 물리적 차원을 맞추기 위해 상수 α를 도입한다. α의 물리적 차원은 $m\omega$와 같다. $\frac{k(t)}{\alpha} = \omega^k(t)$, $\frac{\alpha}{m(t)} = \omega^m(t)$라고 정의하면,

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega^k(t) \\ \omega^m(t) & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix} \tag{49-h}$$

$\begin{pmatrix} 0 & -\omega^k(t) \\ \omega^m(t) & 0 \end{pmatrix}$의 고유값 $\lambda(t)$는

$$\lambda(t) = \pm i\sqrt{\omega^k(t)\,\omega^m(t)} \tag{59}$$

$\begin{bmatrix} 0 & -\omega^k(t) \\ \omega^m(t) & 0 \end{bmatrix}$를 대각화 시키는 변환행렬 또한 t에 따라 변화해야 할 것이다. 아래 식을 만족하는 변환행렬 $\mathcal{W}(t)$를 찾아본다.

$$\sqrt{\omega^k(t)\,\omega^m(t)}\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = \mathcal{W}^{-1}(t)\begin{pmatrix} 0 & -\omega^k(t) \\ \omega^m(t) & 0 \end{pmatrix}\mathcal{W}(t) \tag{52-h}$$

$$\mathcal{W}(t) = \frac{1}{\sqrt{\omega^m - \omega^k}}\begin{pmatrix} i\sqrt{\omega^k} & -i\sqrt{\omega^k} \\ \sqrt{\omega^m} & \sqrt{\omega^m} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{W}^{-1}(t) = \frac{\sqrt{\omega^m - \omega^k}}{2\sqrt{\omega^m\omega^k}}\begin{pmatrix} -i\sqrt{\omega^m} & \sqrt{\omega^k} \\ i\sqrt{\omega^m} & \sqrt{\omega^k} \end{pmatrix} \tag{53-h}$$

진짜로 대각화가 되는지 검증해 보면,

$$\mathcal{W}^{-1}(t)\begin{bmatrix} 0 & -\omega^k \\ \omega^m & 0 \end{bmatrix}\mathcal{W}(t) = \frac{1}{2\sqrt{\omega^m\omega^k}}\begin{bmatrix} -i\sqrt{\omega^m} & \sqrt{\omega^k} \\ i\sqrt{\omega^m} & \sqrt{\omega^k} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & -\omega^k \\ \omega^m & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} i\sqrt{\omega^k} & -i\sqrt{\omega^k} \\ \sqrt{\omega^m} & \sqrt{\omega^m} \end{bmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -\omega^k \\ \omega^m & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} i\sqrt{\omega^k} & -i\sqrt{\omega^k} \\ \sqrt{\omega^m} & \sqrt{\omega^m} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\omega^k\sqrt{\omega^m} & -\omega^k\sqrt{\omega^m} \\ i\omega^m\sqrt{\omega^k} & -i\omega^m\sqrt{\omega^k} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -i\sqrt{\omega^m} & \sqrt{\omega^k} \\ i\sqrt{\omega^m} & \sqrt{\omega^k} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\omega^k\sqrt{\omega^m} & -\omega^k\sqrt{\omega^m} \\ i\omega^m\sqrt{\omega^k} & -i\omega^m\sqrt{\omega^k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2i\,\omega^k\omega^m & 0 \\ 0 & -2i\,\omega^k\omega^m \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{W}^{-1}(t)\begin{pmatrix} 0 & -\omega^k \\ \omega^m & 0 \end{pmatrix}\mathcal{W}(t) = \sqrt{\omega^k\omega^m}\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \quad \checkmark$$

대각화를 운동방정식에 적용

대각화된 행렬을 운동방정식 (49-h)에 적용해 본다.

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{bmatrix} = \mathcal{W}(t)\begin{bmatrix} i\sqrt{\omega^k\omega^m} & 0 \\ 0 & -i\sqrt{\omega^k\omega^m} \end{bmatrix}\mathcal{W}^{-1}(t)\begin{bmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{bmatrix}$$

$$\mathcal{W}^{-1}(t)\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\sqrt{\omega^k\omega^m} & 0 \\ 0 & -i\sqrt{\omega^k\omega^m} \end{pmatrix}\mathcal{W}^{-1}(t)\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix} \tag{62}$$

우리는 운동방정식이

$$\frac{d}{dt}\,\mathcal{W}^{-1}(t)\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\sqrt{\omega^k\omega^m} & 0 \\ 0 & -i\sqrt{\omega^k\omega^m} \end{pmatrix}\mathcal{W}^{-1}(t)\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix} \tag{63}$$

의 꼴로 수정되어 $\mathcal{W}^{-1}(t)\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix}$ 에 대한 운동방정식이 되길 기대했으나, 실제론 식 (62)에서 알 수 있듯, 변환 행렬 $\mathcal{W}^{-1}(t)$ 이 time-dependent하여 시간 미분 연산자 $\frac{d}{dt}$ 와 교환하지 않아 기대가 이루어지지 않는다.

만약 식 (63)을 억지로 풀어 본다면, 좌변이 아래 식과 같이 된다.

$$\frac{d}{dt}\,\mathcal{W}^{-1}(t)\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix} = \left(\frac{d\mathcal{W}^{-1}(t)}{dt}\right)\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix} + \mathcal{W}^{-1}(t)\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix}$$

식 (62)에는 없는 추가항 $\left(\frac{d\mathcal{W}^{-1}(t)}{dt}\right)\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix}$ 가 생긴다.

그러나 만약 $\omega^k(t)$ 와 $\omega^m(t)$ 의 시간 변화율이 그것의 값보다 작아 무시할 만하다면, 즉 $\frac{\dot{\omega}^{k,m}(t)}{\omega^{k,m}(t)} \ll \omega^{k,m}(t)$ 의 극한에서는, $\frac{d\mathcal{W}^{-1}(t)}{dt} \simeq 0$ 으로 무시할 수 있다. 이것이 **adiabatic approximation**이다. 이 근사를 적용하면 $\mathcal{W}^{-1}(t)\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix}$ 에 대한 운동방정식이 유효하며, 이 벡터의 각 요소가 ladder operator의 역할을 할 것이다.

계산해 보면,

$$\mathcal{W}^{-1}(t)\begin{pmatrix} p^H/\alpha \\ y^H \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{\omega^m - \omega^k}}{2\sqrt{\omega^m\omega^k}}\begin{pmatrix} -i\sqrt{\omega^m}\,\frac{p^H}{\alpha} + \sqrt{\omega^k}\,y^H \\ i\sqrt{\omega^m}\,\frac{p^H}{\alpha} + \sqrt{\omega^k}\,y^H \end{pmatrix}$$

1행은 정규화되지 않은 $a_h^\dagger$, 2행은 정규화되지 않은 a_h 이다. 따라서,

$$a_h^\dagger = \mathcal{N}(t)\left(-i\sqrt{\omega^m}\,\frac{p}{\alpha} + \sqrt{\omega^k}\,y\right) \qquad \cdots \text{creation operator for hypergeometric equation}$$
$$a_h = \mathcal{N}(t)\left(i\sqrt{\omega^m}\,\frac{p}{\alpha} + \sqrt{\omega^k}\,y\right) \qquad \cdots \text{annihilation operator for hypergeometric equation}$$

$\mathcal{N}(t)$ 는 정규화 인자, 역시 시간에 따라 변화한다. $[a_h, a_h^\dagger] = 1$ 을 이용해 $\mathcal{N}(t)$ 의 값을 구한다.

$$\begin{aligned}
[a_h, a_h^\dagger] &= \mathcal{N}^2(t)\left\{\left(i\sqrt{\omega^m}\,\frac{p}{\alpha} + \sqrt{\omega^k}\,y\right)\left(-i\sqrt{\omega^m}\,\frac{p}{\alpha} + \sqrt{\omega^k}\,y\right) - \left(-i\sqrt{\omega^m}\,\frac{p}{\alpha} + \sqrt{\omega^k}\,y\right)\left(i\sqrt{\omega^m}\,\frac{p}{\alpha} + \sqrt{\omega^k}\,y\right)\right\} \\
&= \mathcal{N}^2(t)\left\{i\sqrt{\omega^m\omega^k}\,\frac{1}{\alpha}\,py - i\sqrt{\omega^k\omega^m}\,\frac{1}{\alpha}\,yp + i\sqrt{\omega^m\omega^k}\,\frac{1}{\alpha}\,py - i\sqrt{\omega^m\omega^k}\,\frac{1}{\alpha}\,yp\right\} \\
&= \mathcal{N}^2(t)\,\frac{-2i}{\alpha}\sqrt{\omega^m\omega^k}\,[y,p] \\
&= \mathcal{N}^2(t)\,\frac{2\hbar}{\alpha}\sqrt{\omega^m\omega^k} = 1
\end{aligned}$$

그래서 정의된 정규화 인자와 ladder operator는 아래와 같다.

$$\mathcal{N}(t) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\hbar\sqrt{\omega^m(t)\omega^k(t)}}}$$

$$\begin{aligned}
a_h^\dagger(t) &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\hbar\sqrt{\omega^m(t)\omega^k(t)}}}\left(-i\sqrt{\omega^m(t)}\,\frac{p}{\alpha} + \sqrt{\omega^k(t)}\,y\right) \\
a_h(t) &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\hbar\sqrt{\omega^m(t)\omega^k(t)}}}\left(i\sqrt{\omega^m(t)}\,\frac{p}{\alpha} + \sqrt{\omega^k(t)}\,y\right)
\end{aligned}$$

힐베르트 공간 구성

Adiabatic 근사 하에서 $[a_h, a_h^\dagger] = 1$이 성립하므로, 각 고정된 시점 t에서 SHO와 동일한 힐베르트 공간을 구성할 수 있다. Number operator가 $a_h^\dagger a_h = N$으로 정의될 때, number operator에 eigenvalue n을 가지는 eigenket $|n\rangle$을 basis ket으로 삼는 것이다. 단, 고정된 시점 t에 따라 number operator가 변화하고, eigenket도 변화하므로 $N(t)\,|n;t\rangle = n\,|n;t\rangle$라고 표기한다.

바닥 상태 $|0;t\rangle$을 $a_h(t)|0;t\rangle = 0$으로 정의하고, number basis를

$$|n;t\rangle = \frac{(a_h^\dagger(t))^n}{\sqrt{n!}}|0;t\rangle, \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$

으로 구성하면, 시점 t에서 순간적인 힐베르트 공간은 $\mathcal{F}(t) = \overline{\text{span}}\{|n;t\rangle\}$이다.

SHO와의 차이점은 이 기저 자체가 t에 의존한다는 것이며, 이는 adiabatic 근사의 한계이다. 정확한 해를 위해서는 $\frac{d\mathcal{W}^{-1}}{dt}$ 항에 의한 보정이 필요하다.

2-(3) 경로적분

Propagator 정의와 action 분리

초기 상태 (y_a, t_a)에서 최종 상태 (y_b, t_b)로 전이할 probability amplitude인 propagator K는 파인만 경로적분으로 다음과 같이 정의된다.

$$K(y_b, t_b; y_a, t_a) = \int_{y(t_a)=y_a}^{y(t_b)=y_b} \mathcal{D}[y(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[y]\right) \tag{64}$$

앞선 문제에서 구한 라그랑지안 $\mathcal{L}(y, \dot{y}, t) = \frac{1}{2}m(t)\dot{y}^2 - \frac{1}{2}k(t)y^2$은 y와 $\dot{y}$에 대한 2차 항으로만 이루어져 있다. 임의의 경로 $y(t)$를 고전적 경로 $y_c(t)$와 양자적으로 고전 경로에서 벗어난 효과를 나타내는 $\eta(t)$로 분리한다.

$$y(t) = y_c(t) + \eta(t) \qquad (\text{단 boundary condition에 의해, } \eta(t_a) = \eta(t_b) = 0) \tag{65}$$

이를 작용 $S[y]$에 대입하여 전개하면:

$$S[y] = S[y_c] + S[\eta] + \int_{t_a}^{t_b} [m(t)\dot{y}_c\dot{\eta} - k(t)y_c\eta]\, dt \tag{66}$$

가운데 1차항을 부분적분하고 경계 조건 $\eta(t_a) = \eta(t_b) = 0$을 적용하면,

$$\int_{t_a}^{t_b} m(t)\dot{y}_c\dot{\eta}\, dt = \Big[m(t)\dot{y}_c\eta\Big]_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} \frac{d}{dt}(m(t)\dot{y}_c)\eta\, dt = -\int_{t_a}^{t_b} \frac{d}{dt}(m(t)\dot{y}_c)\eta\, dt$$

따라서 식 (66) 우변에 있던 적분항은 $-\int\left[\frac{d}{dt}(m(t)\dot{y}_c) + k(t)y_c\right]\eta\, dt$와 같다. 이때 $\frac{d}{dt}(m(t)\dot{y}_c) + k(t)y_c$가 바로 오일러–라그랑주 방정식에 y_c를 넣은 것이며, 고전적 경로는 고전적 운동 방정식의 해이므로, $\frac{d}{dt}(m(t)\dot{y}_c) + k(t)y_c = 0$이다. 따라서 식 (66)의 적분 항은 없어진다. 결국 작용은 고전적 경로에 의한 작용과 양자적 요동에 의한 작용으로 완전히 분리된다.

$$S[y] = S[y_c] + S[\eta] \tag{67}$$

명시적 경로적분 수행

작용이 분리됨에 따라 propagator 역시 명시적으로 계산할 수 있다. $S[y_c]$는 η에 대한 적분과 무관하므로 적분 기호 밖으로 빠져나온다.

$$K(y_b, t_b; y_a, t_a) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[y_c]\right) \underbrace{\int_{\eta(t_a)=0}^{\eta(t_b)=0} \mathcal{D}[\eta(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[\eta]\right)}_{F(t_b, t_a)} \tag{68}$$

여기서 남은 $\eta(t)$에 대한 경로적분의 특성을 살펴보자. 요동 작용 $S[\eta] = \int\left[\frac{1}{2}m(t)\dot{\eta}^2 - \frac{1}{2}k(t)\eta^2\right] dt$은 η와 $\dot{\eta}$에 대한 quadratic form으로만 이루어져 있다. 따라서 $\mathcal{D}[\eta]$에 대한 경로적분은 본질적으로 무한 번의 Gaussian integral을 수행하는 것과 같다. 가우시안 적분은 해석적으로 완벽하게 적분값을 구해낼 수 있으므로, 섭동 이론 등의 근사를 도입할 필요 없이 명시적인 계산이 가능하다. 또한, 이 가우시안 적분을 모두 수행하고 나면 적분 변수인 공간 좌표 η는 소거된다. 양 끝의 경계 조건 역시 $\eta = 0$으로 고정되어 있으므로, 적분 결과에는 시스템의 매개변수인 $m(t), k(t)$와 양 끝의 시간 t_a, t_b만 남게 된다. 즉, 공간 좌표 y와는 완벽하게 독립적인

시간만의 진폭 함수 $F(t_b, t_a)$가 튀어나온다. 결론적으로 시간에 의존하는 조화진동자 형태의 라그랑지안에서는 propagator를 이렇게 구할 수 있다.

$$\boxed{K(y_b, t_b; y_a, t_a) = F(t_b, t_a) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{\text{cl}}(y_b, t_b; y_a, t_a)\right)} \tag{69}$$

미소 시간 propagator를 통한 슈뢰딩거 방정식 도출

이제 이 경로적분 정식화가 2-(1)에서 구한 슈뢰딩거 방정식과 동치임을 미소 시간 Δt로 쪼개어 증명한다. 시간이 아주 짧은 간격 Δt 동안 입자는 일정한 질량 $m(t)$와 퍼텐셜 $V(y,t) = \frac{1}{2}k(t)y^2$ 하에서 직선 운동한다고 근사할 수 있다. 이때 $\xi = y - y_i$ 라 하면 미소 시간 propagator는 다음과 같다.

$\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$ 를 먼저 계산하자면, 초기하 라그랑지안을 넣고 직선 운동 근사를 적용할 때,

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_t^{t+\Delta t} \mathcal{L}(t')\,dt'\right) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta t\left\{\frac{1}{2}m(t)\frac{\xi^2}{\Delta t^2} - \frac{1}{2}k(t)y^2\right\}\right) \\ &= \exp\left(\frac{im(t)\xi^2}{2\hbar\Delta t} - \frac{i}{2\hbar}k(t)y^2\Delta t\right) \end{aligned}$$

Normalization까지 취하면 propagator $K(y, t+\Delta t; y-\xi, t)$를 구할 수 있다.

$$K(y, t+\Delta t; y-\xi, t) \simeq \sqrt{\frac{m(t)}{2\pi i\hbar\Delta t}} \exp\left[\frac{im(t)\xi^2}{2\hbar\Delta t} - \frac{i}{2\hbar}k(t)y^2\Delta t\right] \tag{70}$$

파동함수의 시간 발전은 propagator의 적분 방정식으로 주어진다.

$$\Psi(y, t+\Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, K(y, t+\Delta t; y-\xi, t)\, \Psi(y-\xi, t) \tag{71}$$

좌변을 Δt에 대해 1차까지 테일러 전개한다.

$$\Psi(y, t+\Delta t) \simeq \Psi(y,t) + \Delta t\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{72}$$

우변의 피적분 함수에서 가우시안 분산의 특성상 $\xi \sim \sqrt{\Delta t}$로 스케일되므로, Δt의 1차 정확도를 얻기 위해 파동함수 $\Psi(y-\xi, t)$를 ξ에 대해 2차까지 전개한다.

$$\Psi(y-\xi, t) \simeq \Psi(y,t) - \xi\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \frac{\xi^2}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} \tag{73}$$

또한 퍼텐셜에 의한 위상 인자 역시 1차 근사한다. $\exp\left(-\frac{i\Delta t}{2\hbar}k(t)y^2\right) \simeq 1 - \frac{i\Delta t}{2\hbar}k(t)y^2$. 홀수 차수인 ξ 항은 odd function이므로 가우시안 적분 시 0이 되어 소거된다. 전개한 식들을 우변의 적분식 (71)에 대입하고 $\int e^{-ax^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$, $\int x^2 e^{-ax^2}dx = \frac{1}{2a}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ 공식을 이용하여 적분을 수행하면 다음과 같다.

$$\text{RHS} = \left[1 - \frac{i\Delta t}{2\hbar}k(t)y^2\right]\left[\Psi(y,t) + \frac{i\hbar\Delta t}{2m(t)}\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}\right] \tag{74}$$

Δt에 대한 1차 항까지만 남기고 좌변 (72)와 우변 (74)를 같다고 두면,

$$\Psi + \Delta t \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \Psi + \frac{i\hbar \Delta t}{2m(t)} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} - \frac{i\Delta t}{2\hbar} k(t) y^2 \Psi \tag{75}$$

양변에서 Ψ를 소거하고 Δt로 나눈 뒤 $i\hbar$를 곱하여 정리하면,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m(t)} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{1}{2} k(t) y^2 \Psi \tag{76}$$

여기에 1-(1)에서 정의한 $m(t) = t^c (1-t)^{a+b-c+1}$와 $k(t) = -ab\, t^{c-1} (1-t)^{a+b-c}$를 대입하고 모든 항을 좌변으로 이항하면,

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi + \frac{\hbar^2}{2} t^{-c} (1-t)^{a+b-c+1} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi + \frac{1}{2} ab\, t^{c-1} (1-t)^{a+b-c} y^2 \Psi = 0} \tag{77}$$

이 결과는 2-(1)에서 정준 양자화를 통해 얻은 초기하 함수의 슈뢰딩거 방정식, 식 (40)과 정확히 일치한다.

참고문헌

[1] 김기석 교수님 강의 필기

[2] J. J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, 3rd edition, Chapter 2

[3] 김희재 교수님 2026년 양자역학1 강의 필기 노트

[4] https://peeterjoot.com/2015/08/19/quantum-sho-ladder-operators-as-a-diagonal-change-of-basis-for-the-heisenberg-eoms/