QM week 4 HW.

2026 2182
김신리.

Sakurai 1.35.

(a) Gaussian wave packet 에서 $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$ 구하라.

→ 풀이.

⟨Gaussian integral formula⟩

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

→ 증명은 수업때 했으니 넘어감.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\left[x^2 \exp(-kx^2)\right] = \frac{1}{2}k^{-\frac{3}{2}}\sqrt{\pi}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d}{dk}\exp(-kx^2)$$

$$= -\frac{d}{dk}\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-kx^2) = -\frac{d}{dk}\left(k^{-\frac{1}{2}}\sqrt{\pi}\right) = \frac{1}{2}k^{-\frac{3}{2}}\sqrt{\pi}$$

$$x^2\exp(-kx^2) = -\frac{d}{dk}\exp(-kx^2)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\left[\frac{x^2}{d^2}\exp\left(-\frac{x^2}{d^2}\right)\right] = \frac{1}{2}d\sqrt{\pi}.$$

⟨Gaussian wave packet⟩

$$\psi(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{d}}\exp\left(-\frac{x^2}{2d^2}\right)\exp(ikx)$$

$$\langle p\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* \frac{\partial}{\partial x}\psi$$

$$= -i\hbar\left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\left(-\frac{x}{d^2}+ik\right)e^{-\frac{x^2}{d^2}}$$

$$= -i\hbar\frac{1}{d\pi^{1/2}}\left[ikd\sqrt{\pi}+0\right]$$

$$\therefore \langle p\rangle = \hbar k$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}}\frac{\partial}{\partial x}\exp\left(-\frac{x^2}{2d^2}+ikx\right)$$

$$= \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}}\left(-\frac{x}{d^2}+ik\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2d^2}+ikx\right)$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial x}\psi = \left(-\frac{x}{d^2}+ik\right)\psi$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\left[x\exp\left(-\frac{x^2}{d^2}\right)\right] = 0.$$

$x\exp(-x^2)$ 은 odd function 이므로

$$p^2\psi = -\hbar^2\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$

$$= -\hbar^2\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{x}{d^2}+ik\right)\psi$$

$$= -\hbar^2\left[-\frac{1}{d^2}\psi+\left(-\frac{x}{d^2}+ik\right)\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]$$

$$= -\hbar^2\left[-\frac{1}{d^2}+\left(-\frac{x}{d^2}+ik\right)^2\right]\psi$$

$$p^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \; -\hbar^2 \left[-\frac{1}{d^2} + \left(ik - \frac{x}{d^2} \right)^2 \right] \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{d^2} \right)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{d\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\left(-\frac{1}{d^2} \right) \exp\left(-\frac{x^2}{d^2} \right) + \left(-k^2 - 2ik \frac{1}{d^2} x + \frac{1}{d^4} x \right) \exp\left(-\frac{x^2}{d^2} \right) \right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{d\sqrt{\pi}} \left(-\frac{1}{d^2} \cdot d\sqrt{\pi} - k^2 \cdot d\sqrt{\pi} + \frac{1}{d^2} \cdot \frac{1}{2} d\sqrt{\pi} \right)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{d\sqrt{\pi}} \left(-\frac{\sqrt{\pi}}{2d} - k^2 d\sqrt{\pi} \right)$$

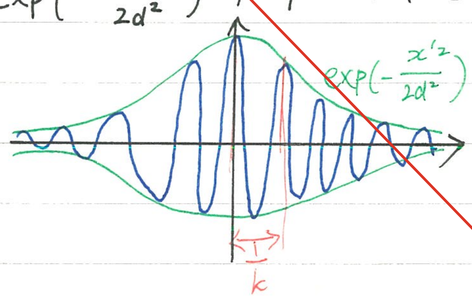
$$= \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2$$

Chapter 1을 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 phase들의 외각을 Gaussian으로 결정한다.



문제 풀이와는 상관 없는 강의 필기 정리 부분

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

$\psi_\alpha\psi_\alpha^* = \frac{1}{d\sqrt{\pi}}\exp\left(-\frac{x'^2}{d^2}\right)$ modulus는 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 packet의 경우는 어떨까?

푸리에 변환할 때 쓰는 $\exp(-ik'x')$ 대신에 $\exp(-i\frac{1}{\hbar}p'x')$ 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 적분 항은 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.

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

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

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

놀랍게도, $\hbar k$ 만큼 p'에 대해 평행이동한 Gaussian distribution 이 나온다. 그리고 진동하는 phase 가 전혀 없다.

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

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

이는 p'를 관찰할 확률분포다.

Gaussian distribution의 기본형은

$$N(\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(p'-\mu)^2\right]$$

이때, σ^2은 standard deviation, μ는 mean.

$|\phi_\alpha(p')|^2$과 비교하면,

$\langle p' \rangle = \mu = \hbar k$, $\quad \langle (\Delta p')^2 \rangle = \langle p'^2 \rangle - \langle p' \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2}$.

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

Sakurai 1.36

(a) $\langle p'|x|\alpha\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p'|\alpha\rangle$ 증명.

$|A\rangle = x|\alpha\rangle$ 라고 두자. wave function을 정의.

$\psi_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle$ $\phi_\alpha(p') = \langle p'|\alpha\rangle$

$\psi_A(x') = \langle x'|A\rangle = \langle x'|x|\alpha\rangle$ $\phi_A(p') = \langle p'|A\rangle = \langle p'|x|\alpha\rangle$

증명할 것은 $\phi_A(p') = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')$.

$\cancel{\psi_A(x') = x}$ $|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, \psi_\alpha(x') \, |x'\rangle$

$$x|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi_\alpha(x') \, x|x'\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi_\alpha(x') \, x' |x'\rangle$$

$$|A\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi_A(x') \, |x'\rangle$$

$\therefore \psi_A(x') = x' \psi_\alpha(x')$.

위 식을 직접 푸리에 변환해서 $\phi_A(p') = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')$ 임을 보인다.

$$\phi_A(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, \exp\left(-i\frac{p'}{\hbar}x'\right) \psi_A(x')$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, \exp\left(-i\frac{p'}{\hbar}x'\right) x' \psi_\alpha(x')$$

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

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, \exp\left(-i\frac{p'}{\hbar}x'\right) \psi_\alpha(x')$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi_\alpha(p').$$

$\therefore \phi_A(p') = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi_\alpha(p').$

Sakurai 1:36

(b) (ii) $\langle\beta|x|\alpha\rangle = \int dp'\, \phi_\beta^*(p')\, i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')$ 증명.

앞선 문제에서 $\langle p'|x|\alpha\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p'|\alpha\rangle$ 를 증명함.

$= i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')$

$$x|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp'\ |p'\rangle \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')\right).$$

$$|\beta\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp''\ |p''\rangle\ \phi_\beta(p'')$$

$$\langle\beta|x|\alpha\rangle = \int dp'' \int dp'\ \langle p''|p'\rangle\ \phi_\beta^*(p'')\ i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')$$

$$= \int dp'' \int dp'\ \delta(p''-p')\ \phi_\beta^*(p'')\ i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')$$

$$= \int dp'\ \phi_\beta^*(p')\ i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')$$

(b) $\exp\left(i \frac{1}{\hbar} x \boxed{H'}\right)$ 의 중요성은 뭔가?

- x-space와 p-space의 변환 인자. 즉 $|x'\rangle$과 $|p'\rangle$ 사이 내적 관계를 나타낸다.

특히 $\langle x|\boxed{H'}\rangle = \exp\left(i \frac{1}{\hbar} x \boxed{H'}\right)$ 인데,

이는 $\boxed{H'}$의 운동량을 가지는 eigenket을 x-space에서 보면

$\cancel{\frac{\boxed{H'}}{\hbar}}$ $\frac{\boxed{H'}}{\hbar}$의 wave number를 가지는 평면파라는 뜻이다.