Interaction picture summary

S.Sora

2023년 7월 14일

Schrodinger picture

$$\text{Wavefunction :} \quad \psi_s = e^{-i\hat{H}t}\psi$$
$$\text{Operator :} \quad \hat{A}_s = \hat{A}$$

Heisenberg picture

$$\text{Wavefunction :} \quad \psi_h = \psi$$
$$\text{Hamiltonian :} \quad \hat{A}_h(t) = e^{-i\hat{H}t}Ae^{i\hat{H}t}$$

상호작용 묘사(Interaction picture)에서, 해밀토니안은 계(System) 자체를 서술하는 H_0 과 시간에 무관하게 주변 입자들간의 작용을 나타내는 상호작용 해밀토니안 H_{int} 으로 나뉘어집니다. 또한 시간에 따른 파동함수는 계의 시간 연산자가 곱해지며($\psi_i(t) = e^{i\hat{H}_0 t}\psi(\mathbf{r})$), 슈뢰딩거 묘사의 시간에 따른 파동함수($\psi(t) = e^{-i\hat{H}t}\psi(\mathbf{r})$)와 같은 형태를 가지게 됩니다.
이상의 내용을 수식으로 표현하면 다음과 같습니다.(아래부터 연산자에 ˆ 기호를 생략함)

Interaction picture

$$\text{Hamiltonian :} \quad H = H_0 + H'$$
$$\text{Wavefunction :} \quad \psi_i = e^{iH_0 t}\psi$$
$$\text{Interaction Hamiltonian :} \quad A(t)_{int} = e^{-iH_0 t}A_{int}e^{iH_0 t}$$

이 때의 시간에 따른 파동함수의 변화와 상호작용 해밀토니안은 다음과 같은 방정식으로 표현됩니다.

$$i\frac{\partial \psi_i}{\partial t} = A_{int}(t)\psi_i \tag{1}$$
$$A_{int}(t) = e^{iH_0 t}A_{int}e^{iH_0 t} \tag{2}$$

각 방정식의 유도는 다음과 같은 과정을 따릅니다:

$$\begin{aligned}
\text{Derivation of time-dependent Wavefunction :} \quad i\frac{\partial \psi_i}{\partial t} &= i\frac{\partial}{\partial t}e^{iH_0 t}\psi \\
&= i(iH_0 e^{iH_0 t}\psi + e^{iH_0 t}\frac{\partial \psi}{\partial t}) \\
&= i(iH_0 e^{iH_0 t}\psi - ie^{iH_0 t}H\psi) \\
&= i(iH_0 e^{iH_0 t}\psi - ie^{iH_0 t}(H_0 + H_{int})\psi) \\
&= e^{iH_0 t}H_{int}\psi \\
&= e^{iH_0 t}H_{int}e^{-iH_0 t}\psi_i
\end{aligned}$$

이 때 상호작용 묘사와 슈뢰딩거 묘사에서의 파동함수 관계식인 $\psi_i = e^{iH_0 t}\psi$ 와, 슈뢰딩거 방정식 $i\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$ 를 이용하였습니다. 따라서 (1)과 (2)의 식이 유도됩니다.

S matrix derivation

이제 상호작용하는 해밀토니안에 의한 파동함수의 시간에 따른 변화를 구하기 위해, 미분방정식 $i\frac{\partial\psi_i}{\partial t} = e^{iH_0t}H_{int}e^{-iH_0t}\psi_i$ 의 해를 찾아보기로 합니다. 미분방정식의 양변을 시간 t에 대해 적분하면 다음과 같은 적분방정식이 됩니다.

$$\psi_i(t) = \psi_i(t_0) - i\int_{t_0}^{t} H_{int}(t')\psi_i(t')dt' \tag{3}$$

이 적분방정식의 해를 다음과 같이 근사식들을 이용한 급수해라고 가정합니다.

$$\psi_i(t) = \psi_i^0(t) + \psi_i^1(t) + \cdots + \psi_i^n(t) \tag{4}$$

0차 근사는 다음과 같은 가정에서 이루어집니다 : 어떤 시간에서의 $\psi_i(t)$ 값을 이미 잘 알고 있다고 한다면,

$$\psi_i(t_0) = \psi_i^0(t) \tag{5}$$

과 같이 쓸 수 있고, 1차근사를 계산하기 위해 슈뢰딩거 방정식에 주어진 파동함수를 대입하면,

$$i\frac{\partial}{\partial t_1}\psi_i(t_1) = H_{int}(t_1)\psi_i(t_1) \tag{6}$$

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 i\frac{\partial}{\partial t_1}\psi_i('t) = -i\int_{t_0}^{t} dt_1 H_{int}(t_1)\psi_i^0(t_0) \tag{7}$$

$$\psi_i(t) - \psi_i(t_0) = -i\int_{t_0}^{t} dt_1 H_{int}(t_1)\psi_i(t_1) \tag{8}$$

$$\psi_i(t) = \psi_i(t_0) - \underbrace{i\int_{t_0}^{t} dt_1 H_{int}(t_1)\psi_i^0(t_0)}_{\text{1st approximation}} \tag{9}$$

2차 근사를 계산하기 위해 슈뢰딩거 방정식에 적분방정식을 다시 대입하면,

$$i\frac{\partial}{\partial t_1}\psi_i(t_2) = H_{int}(t_1)\psi_i(t_1) \tag{10}$$

$$= H_{int}\Big(\psi_i(t_0) - i\int_{t_0}^{t} dt_1 H_{int}(t_1)\psi_i^0(t_0)\Big) \tag{11}$$

$$= H_{int}\psi_i(t_0) - iH_{int}\int_{t_0}^{t} dt_1 H_{int}(t_1)\psi_i^0(t_0) \tag{12}$$

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 i\frac{\partial}{\partial t_1}\psi_i('t) = \int_0^t dt_1 H_{int}\psi_i(t_0) - i\int_0^t H_{int}\int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_{int}(t_1)\psi_i^0(t_0) \tag{13}$$

$$\psi_i(t) - \psi_i(t_0) = -i\int_0^t dt_1 H_{int}\psi_i(t_0) - \int_0^t H_{int}\int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_{int}(t_1)\psi_i^0(t_0) \tag{14}$$

$$\psi_i(t) = \psi_i(t_0) - i\int_0^t dt_1 H_{int}\psi_i(t_0) - \underbrace{\int_0^t H_{int}\int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_{int}(t_1)\psi_i^0(t_0)}_{\text{2nd approximation}} \tag{15}$$

위와 같은 방법으로 n차 근사를 구하면 다음과 같이 구해집니다.

$$\psi_i^n(t) = (-i)^n\int_{t_0}^{t} H_{int}(t_1)dt_1\int_{t_0}^{t_1} H_{int}(t_2)dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}} H_{int}(t_n)dt_n\psi_i(t_0) \tag{16}$$

따라서 상호작용 해밀토니안에 의한 시간에 따른 파동함수의 변화는 S-matrix를 사용하여:

$$\psi_i(t) = S(t,t_0)\psi_i(t_0) \tag{17}$$

이 때의 S-matrix는 다음과 같습니다:

$$S(t,t_0) = 1 - \underbrace{i\int_{t_0}^{t} H_{int}(t_1)dt_1}_{\text{1st term}} + \cdots + \underbrace{(-i)^n\int_{t_0}^{t} H_{int}(t_1)dt_1\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}} H_{int}(t_n)dt_n}_{\text{nth term}} \tag{18}$$

이제 시간의 구간을 나열하는 경우의 수를 생각해봅니다. n번째 항에서 시간 구간이 들어갈 수 있는 곳을 $O_i, i = (1, 2, ..., n)$으로 표시하면 다음과 같습니다.

$$\underbrace{(i)^n \int_{O_1}^{O_1} H_{int}(t_{O_1})dt_{O_1} \cdots \int_{O_n}^{O_n} H_{int}(t_{O_n})dt_{O_n}}_{\text{총 n개의 O}} \tag{19}$$

즉 O_i 안에 들어갈 수 있는 시간 구간을 나열하는 경우의 수는 n!개가 됩니다. 따라서 S matrix를 구성하는 각 항에 대해 시간 구간을 나열하는 경우의 수를 표시하면,

$$S(t, t_0) = 1 - \underbrace{i \int_O^O H_{int}(t_O)dt_O}_{\text{1개의 시간구간}} - \underbrace{\frac{1}{2!} \int_O^O H_{int}(t_O)dt_O \int_O^O H_{int}(t_O)dt_O}_{\text{2개의 시간구간}} \tag{20}$$

$$+ i\underbrace{\frac{1}{3!} \int_O^O H_{int}(t_O)dt_O \int_O^O H_{int}(t_O)dt_O \int_O^O H_{int}(t_O)dt_O}_{\text{3개의 시간구간}} \tag{21}$$

$$+ \cdots \underbrace{\frac{1}{n!}(-i)^n \int_O^O H_{int}(t_O)dt_O \cdots \int_O^O H_{int}(t_O)dt_O}_{\text{n개의 시간구간}} \tag{22}$$

이 때 시간을 나열할 수 있는 경우의 수 중 왼쪽에서 오른쪽으로 갈 수록 더 큰 시간의 상한선을 나타내게끔 하기 위해 배열 연산자 T를 도입하면, 예를 들어, S matrix의 n차 항을 $S^{(n)}$이라 하면

$$S^{(n)} = \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^{t} \cdots \int_{t_0}^{t} T\{H_{int}(O) \cdots H_{int}(O)\} dt_O \cdots dt_O \tag{23}$$

$$= \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^{t} \cdots \int \{H_{int}(t_1) \cdots H_{int}(t_n)\} dt_1 \cdots dt_n \quad \text{where} \quad (t_1 < t_2 < \cdots < t_n) \tag{24}$$

그리고 이 때 S matrix는 다음과 같이 쓸 수 있습니다:

$$S(t, t_0) = Te^{-i\int_{t_0}^{t} H_{int}(t')dt'} \tag{25}$$

Operators using S matrix

첫번째로, S matrix는 다음과 같은 성질을 가집니다.

$$S(t_2, t_1)S(t_1, t_0) = S(t_2, t_0), \quad t_2 > t_1 > t_0 \tag{26}$$

위 식을 풀어쓰면,

$$S(t_2, t_1)S(t_1, t_0) = e^{-i\int_{t_2}^{t_1} H_{int}(t')dt'} e^{-i\int_{t_0}^{t_1} H_{int}(t')dt'} \tag{27}$$

$$= e^{-i\int_{t_2}^{t_0} H_{int}(t')dt'} \tag{28}$$

$$= S(t_2, t_0) \tag{29}$$

이제 식 (17) $\psi_i(t) = S(t, t_0)\psi_i(t_0)$ 에서, 파동함수를 변화시키는 S matrix 연산자와 같은 성질의 다른 연산자 $Q(t) = S(t, t_0)Q(t_0)$를 가정해봅시다. 식 (17)은 따라서:

$$\psi_i = Q(t)\psi \tag{30}$$

가 됩니다. 시간 t는 S matrix operator의 적분 상한선인 t값에만 영향을 받으므로, 임의의 시간에 무관한 연산자 P를 이용해 $Q(t)$를 고쳐쓰면 다음과 같습니다.

$$\psi_i = S(t, \alpha)P\psi \tag{31}$$

P의 값을 알아내기 위해
1. $\psi = e^{i\hat{H}t}\psi_s$, $H = H_0 + H_{int}$ 에서 $\psi_i = e^{iH_{int}t}\psi_s$ 를 이용하면 :

$$e^{iH_0 t} = S(t,\alpha)Pe^{iHt} \tag{32}$$

2. $S(\alpha,\alpha) = 1$ 을 이용하면:

$$P = e^{iH_0\alpha}e^{-iH\alpha} = e^{-iH_{int}\alpha} \tag{33}$$

이 됩니다.
이제 중요한 가정인, 어떠한 이벤트(상호작용)이 일어나기 오래 전의 시간을 $-\infty$ 로 둡니다. 이 시점에서 입자간의 상호작용이 일어나지 않았다고 가정할 경우, 시간 t에서 입자의 상호작용은 다음과 같이 표현할 수 있습니다.

$$\psi_i = S(t,\alpha)P\psi, \quad P \to 1 \tag{34}$$

$$\leftrightarrow S(t)\psi, \quad \text{where} \quad S(t) = S(t,-\infty) \tag{35}$$

이 결과로부터 S matrix Operator의 성질 두번째를 이끌어낼 수 있습니다.

$$S(t_2,t_1)S(t_1,-\infty) = S(t_2,t_1)S(t_1) = S(t_2,-\infty) = S(t_2) \tag{36}$$

$$\leftrightarrow S(t_2,t_1) = S(t_2)S^{-1}(t_1) \tag{37}$$

Time-ordering and Groundstate Average

하이젠베르크 묘사에서의 연산자를 상호작용 묘사에서의 S matrix Operator를 이용해 표현하면 다음과 같습니다.

$$\hat{A}_h(t) = S^{-1}(t)A(t)S(t) \tag{38}$$

어떤 계가 있을 때, 계의 바닥상태를 나타내는 파동함수를 $|\nu\rangle$ 라고 합시다. 시간에 따른 계의 변화를 계의 바닥상태를 기준으로 기댓값을 구하면 다음과 같습니다.

$$\langle\nu| T[\hat{A}(t)\hat{B}(t')\hat{C}(t'')\cdots] |\nu\rangle \tag{39}$$

이 때의 T는 Time-ordering operator로, $t > t' > t'' > \cdots$ 의 순서로, 높은 시간 상한선일 수록 왼쪽으로 가게 나열해줍니다.