
SUPPLEMENTARY FOR

QUANTUM MECHANICS

WRITTEN BY

J.H. YIM

C.W. LEE

Sung Kyun Kwan University



Contents

Preface

I PRELUDE	3
1 Electrodynamics and Classical Mechanics	5
1.1 Electromagnetic Waves	5
1.2 Gauge Transformation	8
1.3 Velocity Dependent Potential	10
1.4 Canonical Transformation	13
1.5 Hamilton-Jacobi Equation and Action-Angle variables	15
1.6 Problems	20
2 Some Fundamental Concepts in Quantum Mechanics	21
2.1 The Postulates and Formalism	21
2.2 Position, Translation and Momentum	30
2.2.1 Operators	31
2.2.2 Wave Functions in x and p Space	34
2.3 Problems	39
II MAIN	41
3 Angular Momentum	43
3.1 Angular Momentum as Rotation Generator and Commutation Relations	43
3.2 Eigenvalues and Eigenstates	46
3.3 Orbital and Spin Angular Momentum	48
3.4 Addition of Angular Momentum	52
3.5 Problems	58
4 Time Independent Perturbation	59
4.1 Formalism	59
4.2 Fine Structure of Hydrogen Atom	63
4.2.1 Relativistic correction	64
4.2.2 Spin-orbit coupling	66
4.3 Zeeman Effect	67
4.3.1 Weak-Field Zeeman Effect	68
4.3.2 Strong-Field Zeeman Effect	69
4.4 Problems	70

5 WKB Method	73
5.1 Classical Quantum Theory	73
5.2 WKB Formulation	77
5.3 Airy Function and Connection Formulas	80
6 Time Dependent Perturbation	85
6.1 Formalism	85
6.1.1 Example: Harmonic Perturbation	87
6.2 Perturbative Quantum Process: When Electromagnetic Wave is applied	90
6.3 Selection Rule	92
6.4 Problems	96
III POSTLUDE	97
7 Some Calculations From Previous Chapters	99
7.1 Section 1.1	99
7.2 Section 1.3	100
7.3 Section 2.2	103
7.4 Section 3.4	110
7.5 Section 4.2	113
7.6 Section 6.1	118
7.7 Section 6.2	120
Appendix A Physical Constants and Dimension Analaysis	121
Appendix B Clebsch Gordon Coefficients	125
INDEX	129

Preface

이 문서는 양자역학2 과목을 수강하시는 학생들께 공부하는데 도움을 드리기 위해 David J. Griffiths, R. Shankar, J. Sakurai, Goldstein, 송희성 저 교재 등을 참고하여 만들었습니다. 아무래도 개인이 쓴 문서이다 보니 개인적인 어투, 필체가 반영되었을 수도 있고 수식의 설명이 이해가 가지 않는 부분이 간혹 있을 수 있는데 이 부분 양해드립니다. 참고로, 저자 C.W.Lee 는 chapter 1.4, 1.5, chapter 5를, J.H.Yim 는 나머지 chapter 들을 작성해서, 책을 읽다보면 문체가 갑자기 달라지는 부분이 있을 수 있습니다.

이 책은 전자기학에서의 Electromagnetic Wave, Velocity Dependant Potential, Gauge Transform 부분을, 고전역학에서의 Canonical Transformation, Action Angle Variables 을 간단히 다루며, 양자역학 1학기 부분중에서는 formalism을, 2학기 부분에서 Angular momentum, Time Independent Perturbation, WKB method, Time Dependent Perturbation을 다루고 있습니다. 따라서 독자들이 Griffiths 저 Introduction to Quantum Mechanics 2e 기준으로 1, 2, 3, 4 단원을, 그리고 고전역학에서 Lagrangian과 Hamiltonian을 공부하고 오셨다고 전제하에 내용을 구성했습니다. 이 책에서 3단원부터가 양자역학2 내용입니다. 1, 2단원에 고전역학, 전자기학, 양자역학1 내용이 들어가 있긴 하지만 양자역학2 내용만 공부하고 싶으시다면 3단원부터 공부하면서 필요할 때 마다 1, 2단원을 읽으셔도 크게 상관 없습니다.

본문(1~6단원)에서 설명하기에 너무 긴 수식들은 Chapter 7에 넣었습니다. 중간에 생략되어 있는 계산과정들을 알고 싶으시면 여기를 참고하시기 바랍니다. 또한, 대부분의 계산과정에서 벡터의 외적 및 curl 계산시 Levi-Civita symbol 이 빈번히 등장하므로 읽기전에 이 부분을 익히셨으면 바랍니다. 또, 본인은 스칼라, 벡터, 연산자를 구별하기 위해 대·소문자 및 bold text 표시를 엄격히 하였습니다. Bold 문자는 벡터를 나타냅니다. 예를 들어 \mathbf{x} 는 $x\hat{e}_x + y\hat{e}_y + z\hat{e}_z$ 인 position vector입니다. Electric, magnetic field 의 경우 \mathbf{E} , \mathbf{B} 로 대문자, bold 표시를 하였으나, position 과 momentum 을 \mathbf{X} 나 \mathbf{P} 처럼 대문자로 쓴 것은 각각의 observable 들을 operator 로써 표시한 것입니다.

다른 과목들도 마찬가지 이겠지만 양자역학을 공부하실 때, 여러 저자의 교재들을 같이 봐 가면서 공부하시는거를 강력히 권합니다. 교재 하나만으로 양자역학의 지식들을 충분히 습득하기 힘듭니다. (다르게 말하자면, 이 책한테만 너무 의존하지 마세요ㅠㅠ 책 제목처럼 이건 supplementary 한 책이지, 온전한 내용을 담고 있는 책이 아닙니다.)

마지막으로 이 책이 읽는이들께 많은 도움이 되었으면 합니다.



Part I

PRELUDE

CHAPTER 1

Electrodynamics and Classical Mechanics

양자역학2에 대한 설명을 시작하기 전에 알고 가셨으면 하는 전자기학, 고전역학의 내용들을 일부 넣었다. 다음 chapter를 읽다가 모르는 부분이 있으면 이 chapter로 다시 돌아와서 읽으셔도 되고, 여기부터 읽고 가도 된다.

1.1 Electromagnetic Waves

전자기학2를 배웠다면 여러분들은 맥스웰 방정식의 해 중 하나가 전기장과 자기장이 평면파인 경우라고 알고 있으실 텐데, 왜 평면파인지 자세히 설명하려고 한다. 먼저, 전하 분포가 $\rho(\mathbf{x}, t)$ 이고 전류 밀도가 $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ 인 공간에서 맥스웰 방정식은 다음과 같다.

$$\boxed{\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{B} &= \mu_0 \mathbf{j} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}\end{aligned}} \quad (1.1)$$

하지만, 진공, 혹은 전하와 전류가 아예 없는 공간에서 식(1.1)는 다음과 같이 적을 수 있다.

$$\boxed{\nabla \cdot \mathbf{E} = 0} \quad (1.2a)$$

$$\boxed{\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}} \quad (1.2b)$$

$$\boxed{\nabla \cdot \mathbf{B} = 0} \quad (1.2c)$$

$$\boxed{\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}} \quad (1.2d)$$

$\mu_0\epsilon_0$ 은 진공에서의 빛의 속도의 역수의 제곱에 해당하므로 바로 $1/c^2$ 라고 적었다. 위의 4개의 식을 이용해서 $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E})$ 과 $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{B})$ 을 이용해서 계산하면 다음과 같은 식을 얻을 수 있다.¹

$$\boxed{\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E} &= 0 \\ \nabla^2 \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{B} &= 0 \end{aligned}} \quad (1.3a)$$

이 방정식의 해는 wave vector $\mathbf{k} = \langle k_x, k_y, k_z \rangle$, displacement $\mathbf{x} = \langle x, y, z \rangle$, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} = k_x x + k_y y + k_z z$ 에 대해서 다음과 같이 나타낼 수 있다.²

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \pm \omega t + \phi_E) \quad (1.4a)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{B}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \pm \omega t + \phi_B) \quad (1.4b)$$

여기서 ϕ_E, ϕ_B 는 두 field의 위상(phase)각도이고, wave vector \mathbf{k} 는 wave number $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ 의 크기를 가지면서 wave 가 propagate하는 방향을 indicate 하는 벡터이고, ω 는 wave의 propagation velocity c 에 대해서 식(1.5)의 dispersion relation을 만족하는 angular frequency 이다. \cos 안의 ±부호에서 +는 wave가 \mathbf{k} 의 방향대로 진행하고, -는 wave가 \mathbf{k} 의 정반대방향으로 진행하고 있는 상태를 나타낸다고 보면 된다.

$$\omega = c|\mathbf{k}| \quad (1.5)$$

또, 식(1.4)에서 $\mathbf{E}_0 = \langle E_{0x}, E_{0y}, E_{0z} \rangle$, $\mathbf{B}_0 = \langle B_{0x}, B_{0y}, B_{0z} \rangle$ 는 시간 t 와(과) 공간 \mathbf{x} 에 의존하지 않는 constant vector로 각각 electric field \mathbf{E} 와 magnetic field \mathbf{B} 가 진동하는 방향을 나타내고, polarization vector, 편광 벡터라고도 부른다.

이제 식(1.4)에서 보인 해가 왜 평면파인지 살펴보자. 평면파의 뜻부터 알아보면, 파면, 즉, wave에서 위상(phase)가 같은 지점들을 이은 surface가 평면인 wave를 평면파, plane wave라고 부른다. 식(1.4a)에서 시간이 $t = T_s$ 에서 정지하고 있는 상황을 생각해보자. 여기서 우리는 electric field에서 위상이 ϕ_0 인 지점을 찾을 것이다. 위상이 ϕ_0 인 것은 $\cos()$ 안에 있는 term 이 ϕ_0 인 곳을 찾으면 된다.

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega T_s + \phi_E = \phi_0 \quad (1.6a)$$

$$\langle k_x, k_y, k_z \rangle \cdot \langle x, y, z \rangle - \omega T_s = \phi_0 - \phi_E \quad (1.6b)$$

$$k_x x + k_y y + k_z z - \omega T_s = \phi_0 - \phi_E \quad (1.6c)$$

$$k_x x + k_y y + k_z z = \omega T_s + \phi_0 - \phi_E \quad (1.6d)$$

식(1.6d)은 고등학교 기하와 벡터 시간에 배운 평면의 방정식($ax + by + cz = d$)과 같은 형태를 가지고 있다. 우리는 여기서 시간이 $t = T_s$ 로 정지한 순간에서 파면이 평면임을 보였는데, 시간에 따라 field가 변하고 있는 상황을 생각해 보시라. 식(1.6d)의 우변에서 T_s 대신 t 을 넣으면 $ax + by + cz = d$ 에서 d 에 해당하는 부분이 시간에 따라 변함을 알 수 있다. 즉, electric field에서 위상이 ϕ_0 인 지점을 이은 파면은 평면인데, 이 평면이 움직이고 있는 상황을 생각하면 된다. magnetic field의 경우, electric field와 같으 방법으로 plane wave 임을 보일 수 있다. 그러므로, 식(1.4)의 electric field와 magnetic field는 plane wave이다. 이 평면의 법선 벡터는, 즉 평면과 수직인 벡터는 $\mathbf{k} = \langle k_x, k_y, k_z \rangle$ 이다.

이 평면파에 대해 좀 더 살펴보자. $t = 0$ 일 때, 그리고 $t = T$ 식(1.4a)은 다음과 같이 된다.

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + \phi_E) \quad (1.7a)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, T) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \pm \omega T + \phi_E) \quad (1.7b)$$

¹ 계산과정 알고 싶으면 Chapter 7. 참고하셈

² 이 해는 monochromatic wave이다. 실제로 우리가 관찰하거나 실생활에서 사용되는 전자기파는 진행, 진동 방향과 진동수가 다른 여러 전자기파가 섞여 있다. monochromatic wave는 진동수가 하나뿐인 파장을 뜻한다. 가시광선으로 따지자면 단색광을 생각하면 된다.

식 (1.7a)과 (1.7b)에서 위상(phase)이(가) ϕ_E 인 지점을 잇는 파면은 각각

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + \phi_E = \phi_E \quad (1.8a)$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + \phi_E = \phi_E \mp \omega T \quad (1.8b)$$

이다. (1.8a)는 원점($O = (0, 0, 0)$)을 포함하고 있다. (1.8a)와 (1.8b) 사이의 거리를 계산해보자. 이 거리는 원점($O = (0, 0, 0)$)과 (1.8b) 사이의 거리와 같다. $(0, 0, 0)$ 과 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + \phi_E = \phi_E \mp \omega T$ 의 거리를 고등학교 때 배우신 점과 평면 사이의 공식 distance = $\sqrt{ax_0^2 + bx_0^2 + cx_0^2}$ 을 이용해서 계산해보자. $x_0 = y_0 = z_0 = 0$ 이고, $a = k_x$, $b = k_y$, $c = k_z$ 이므로 구하는 거리는 $s = \frac{|\omega T|}{|\mathbf{k}|}$ 이다. 이 파동이 벡터 $\mathbf{k} = \langle k_x, k_y, k_z \rangle$ 의 방향으로 propagate하였으면, 시간간격 $\Delta t = T$ 동안 거리 $\Delta d = s = \omega T / |\mathbf{k}|$ 만큼 이동한 것이므로, 속도를 계산하면

$$\text{velocity} = \frac{\Delta d}{\Delta t} = \frac{\omega T / |\mathbf{k}|}{T} = \frac{\omega}{|\mathbf{k}|} \quad (1.9)$$

인데, 식(1.5)의 dispersion relation에 의해서 이 electric field의 propagation speed 가 c 임을 확인할 수 있다. 이 사실은 magnetic field에 대해서도 같은 방법으로 확인해 볼수 있다.

이 평면파에 대해 좀 더 살펴보자. 식(1.4)의 해를 식(1.2)의 4개의 Maxwell's Equations에 대입해보자.

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \langle E_{0x} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E), E_{0y} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E), E_{0z} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E) \rangle \quad (1.10a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\langle (k_y E_{0z} - k_z E_{0y}) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E), (k_z E_{0x} - k_x E_{0z}) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E), (k_x E_{0y} - k_y E_{0x}) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E) \rangle \quad (1.10b)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} = -\langle (\omega B_{0x}) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_B), (\omega B_{0y}) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_B), (\omega B_{0z}) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_B) \rangle \quad (1.10c)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \langle B_{0x} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_B), B_{0y} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_B), B_{0z} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_B) \rangle \quad (1.10d)$$

맥스웰 방정식 (1.2b)에 따르면 (1.10b)와 (1.10c)의 세 성분이 모두 같아야 한다. 먼저, $\phi_E = \phi_B$, 진공에서 두 field의 위상이 같아야 하고, (1.10b)와 (1.10c)의 우변에서 $\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E)$ 를 나누면 다음과 같은 결과를 얻을 수 있다.

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E}_0 = \omega \mathbf{B}_0 \quad (1.11)$$

여기서 $\omega = c|\mathbf{k}|$ 이고 $\mathbf{k} = \hat{\mathbf{k}}|\mathbf{k}|$ 이므로³

$$\frac{1}{c} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E}_0 = \mathbf{B}_0 \quad (1.12)$$

식(1.12)에서 \mathbf{E}_0 와 \mathbf{B}_0 는 크기가 $\frac{1}{c}$ 배 만큼 차이나고 방향은 서로 수직임을 알 수 있다. 마찬가지로 식(1.10a)와 식(1.10d)을 식(1.2d)에 대입하면

$$\mathbf{k} \times \mathbf{B}_0 = -\frac{1}{c^2} \omega \mathbf{E}_0 \quad (1.13)$$

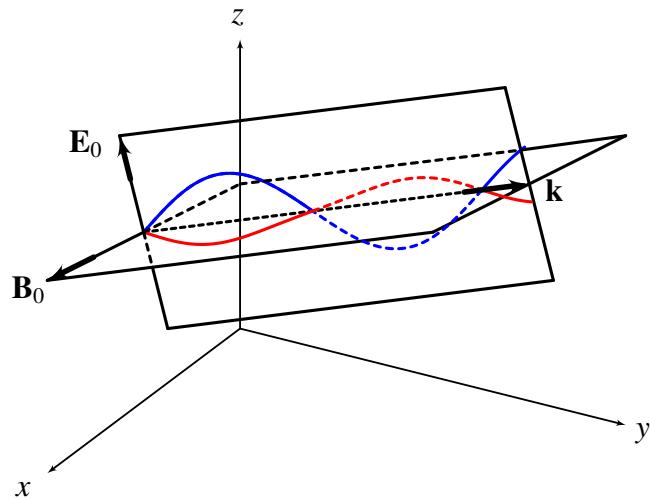
을 알 수 있다. Maxwell's Equations를 풀어서 알게된 전기장과 자기장의 관계를 식, 그림으로 나타내면 아래와 같다.

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{c} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E}_0 \right) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E)$$

(1.14)

³ $\hat{\mathbf{k}}$ 는 \mathbf{k} 의 단위벡터, 즉 \mathbf{k} 와 방향은 같고 크기가 1인 벡터

Figure 1.1: \mathbf{E}_0 와 \mathbf{B}_0 의 관계

이 section에서 지금까지 다룬 것을 요약하자면, Maxwell's Equations를 정리해서 만든 wave equation의 해로 plane wave를 들 수 있고, plane wave인 전기장과 자기장은 진동방향이 그림1에서 볼 수 있듯이 서로, 그리고 wave vector \mathbf{k} 과 수직이며, $c = \omega/|\mathbf{k}|$ 의 속도로 $\hat{\mathbf{k}}$ 와 parallel 혹은 anti parallel하게 propagate 한다.

1.2 Gauge Transformation

section 1.1에서 우리는 다음과 같은 맥스웰 방정식 4개를 다루고 진공인 경우에 대하여 이것들의 해를 살펴보았다.

$$\boxed{\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{B} &= \mu_0 \mathbf{j} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}\end{aligned}} \quad (1.15)$$

맥스웰 방정식에서는 전하밀도 $\rho(\mathbf{x},t)$ 와 전류밀도 $\mathbf{j}(\mathbf{x},t)$ 가 전기장 \mathbf{E} 와 자기장 \mathbf{B} 에 관한 미분 방정식으로 나타나져 있다. 여기서 이 미분방정식을 field가 아닌 potentials로 나타내보겠다. 먼저, 식(1.15c)에서 \mathbf{B} 의 divergence는 항상 0 임을 알 수 있다. 어떤 vector field에 divergence를 취해서 0 이 되면, 이 field는 또 다른 vector field의 curl이다. 즉, 자기장 \mathbf{B} 의 vector potential \mathbf{A} 에 대해서

$$\boxed{\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}} \quad (1.16)$$

이 성립한다. 다음으로 식 (1.15b)에 식(1.16)을 대입하자.

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{A}) = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \nabla \times \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} \right) = 0$$

$$\nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} \right) = 0$$

어떠한 scalar field의 gradient에 curl을 취하면 0이 되기 때문에 바로 위의 식의 좌변을 scalar potential $-\Phi$ 의 gradient라고 하면

$$\begin{aligned} \mathbf{E} + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} &= -\nabla \Phi(\mathbf{x}, t) \\ \boxed{\mathbf{E} = -\nabla \Phi - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}} \end{aligned} \quad (1.17)$$

이라고 나타낼 수 있다.

고등학교 때 미적분 시간에 배웠던 지식을 떠올려보자. 어떤 함수 $f(x)$ 의 한 부정적분을 $F(x)$ 라고 하자. 당연히 $(d/dx)F(x) = f(x)$ 은 성립한다. 실수 값과 가지는 임의의 상수 C 에 대해서 $F'(x) = F(x) + C$ 도 x 에 대해서 미분시, 결과는 $f(x)$ 로 똑같다. 사실상, x 에 대해서 미분해서 $f(x)$ 가 나오게 하는 $F(x)$ 는 무수히 많다. 벡터 미분 연산자를 생각해보자. 임의의 scalar field $\Lambda(\mathbf{x}, t)$ 에 대해 $\nabla \Lambda$ 에 curl 연산을 하면 결과는 no matter what, 0이 나옴을 알고 있다. 앞 section에서 $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$ 라고 했다. 그런데, $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \Lambda$ 에 curl 연산을 취해도 똑같은 magnetic field \mathbf{B} 를 얻을 수 있다. 마찬가지로, $\mathbf{E} = -\nabla \Phi - (\partial/\partial t) \mathbf{A}$ 인데, $\Phi' = \Phi - (\partial t/\partial t)\Lambda$ 에 대해서 $\mathbf{E} = -\nabla \Phi' - (\partial/\partial t)\mathbf{A}'$ 도 성립한다.

$$\begin{aligned} \mathbf{A}' &= \mathbf{A} + \nabla \Lambda \\ \Phi' &= -\Phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.18)$$

즉, 식(1.18)처럼 potentials(Φ, \mathbf{A})를 (Φ', \mathbf{A}')로 바꾸어도 똑같은 electric and magnetic field (\mathbf{E}, \mathbf{B})를 yield 한다. 위 같은 potential의 change를 게이지 변환(Gauge Transformation)이라고 한다. 이 부분에서 핵심은 앞 문단에서 언급한 부정적분과 같이 x 에 대해서 미분해서 $f(x)$ 가 나오게 하는 $F(x)$ 가 무수히 많듯이, 벡터 미분연산을 취해서 특정한 electric and magnetic field (\mathbf{E}, \mathbf{B})가 나오게 하는 potential (Φ, \mathbf{A})도 무수히 많다는 것이다. 이렇게도 생각할 수 있다. **우리가 어떤 potential (Φ, \mathbf{A})를 잡았는데 그것이 우리가 원하는 field (\mathbf{E}, \mathbf{B})가 yield 한다면 그 potential을 문제없이 사용해도 된다.**

식 (1.16)과 (1.17)을 (1.15 a)와 (1.15 d)에 대입하면 다음과 같이 정리된다.

$$\left(\nabla^2 - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{A} - \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \Phi \right) = -\mu_0 \mathbf{j} \quad (1.19a)$$

$$\left(\nabla^2 - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \Phi + \frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \Phi \right) = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (1.19b)$$

보시다시피, 식이 매우 지저분하게 생겼다. 하지만, 이 section의 초반부에서 언급한 것을 생각해보라. 우리는 potentials(Φ, \mathbf{A})를 우리한테 편한 값으로 정할 수 있다. potentials(Φ, \mathbf{A})를 잘 잡으면 식(1.19)의 항들의 일부를 0으로 만들 수 있다. 이를 gauge fixing이라고도 한다. 여기서는 두 가지 gauge fixing, **Coulomb Gauge, Lorenz Gauge**⁴에 대해서 다뤄볼 것이다.

먼저, magnetostatics에서 많이 사용하는 **Coulomb Gauge**에서, 우리는 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ 이라고 잡는다. Coulomb Gauge를 고르면, 식(1.19a, b)가 다음과 같이 간단해진다.

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

$$\left(\nabla^2 - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j} + \mu_0 \epsilon_0 \nabla \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)$$

⁴Lorentz와 Lorenz 헷갈리지 마세요

Coulomb Gauge를 고르면, 식(1.19a)는 Poisson 방정식이 된다. \mathbf{A} 에 관한 방정식도 어느 정도 단순해졌다.

그 다음으로는 Lorenz Gauge이다. 여기서, 우리는 $\nabla \cdot \mathbf{A} + \mu_0 \epsilon_0 (d/dt) \Phi = 0$ 이라고 잡는다. Lorenz Gauge를 고르면 식(1.19a, b)가 다음과 같이 간단해진다.

$$\left(\nabla^2 - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

$$\left(\nabla^2 - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j}$$

Lorenz Gauge 하에 식(1.19)는 위와 같은 inhomogeneous wave equation이 된다.

위의 Gauge Fixing을 활용한 예시 하나만 다루고 다음 section으로 넘어가겠다. 다음의 electric field와 magnetic field를 yield할 수 있는 potentials Φ, \mathbf{A} 를 찾아보자.

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{c} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E}_0 \right) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E)$$

(1.20)

먼저 Coulomb Gauge를 고르겠다. 식(1.20)는 진공에서의 electric, magnetic field이므로 $\rho = 0, \mathbf{j} = 0$ 이다. 그러면 식(1.19)는 다음과 같은 Laplace Equation으로 reduced 된다.

$$\nabla^2 \Phi = 0$$

$$\nabla^2 \mathbf{A} = 0$$

또, $\mathbf{E} = -\nabla \Phi - (\partial/\partial t) \mathbf{A}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ 이므로, 가능한 Φ' 와 \mathbf{A}' 로 다음과 같은 경우를 생각해볼 수 있다.

$$\Phi(\mathbf{x}, t) = 0 \tag{1.21a}$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\omega} \mathbf{E}_0 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E) \tag{1.21b}$$

식(1.21)의 potential들의 Coulomb Gauge를 만족하는지 확인해보자. 먼저 식(1.21b)에 divergence를 취하면

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{\omega} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \phi_E)$$

인데, section 1.1에서 우리는 \mathbf{E}_0 와 \mathbf{k} 가 서로 수직인 것을 보였다. 즉, 위 식의 $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0)$ 는 0이므로 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ 이다. 또, $\Phi = 0$ 에서 $\frac{\partial}{\partial t} \Phi = 0$ 이므로 $\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{\partial}{\partial t} \Phi = 0 + 0 = 0$ 에서 위의 potentials가 Lorenz Gauge 또한 만족시킴을 알 수 있다.

1.3 Velocity Dependent Potential

질량이 m 이고 electric charge가 q 인 입자가 퍼텐셜 에너지가 $V = V(\mathbf{x})$ 인 공간에 있을 때, 이에 해당하는 Lagrangian과 Hamiltonian은 다음과 같다.

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 - V(\mathbf{x})$$

$$H_0 = \sum_{q=x,y,z} \dot{q} p - L = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{x})$$

하지만 이 system의 electromagnetic field가 걸리면 Lagrangian과 Hamiltonian이 달라질 것이다.

입자가 받는 힘부터 생각해보자. 이 입자는 식(1.22)처럼 퍼텐셜 에너지 $V(\mathbf{x})$ 에 의한 힘과, electro-magnetic field에 의한 Lorentz Force도 받을 것이다.

$$\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{x}} = -\nabla V + q(\mathbf{E} + \dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B}) \quad (1.22)$$

여기서 $\mathbf{E} = -\nabla\Phi - (\partial/\partial t)\mathbf{A}$, $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ 이므로 이를 위의 식에 대입하면 다음과 같다.

$$\mathbf{F} = \frac{d}{dt}m\dot{\mathbf{x}} = -\nabla V + q(-\nabla\Phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + \dot{\mathbf{x}} \times (\nabla \times \mathbf{A})) \quad (1.23)$$

위 식을 다시 정리하자. 이 section에서도 많은 수식들을 생략시켰는데 자세한 설명은 Chapter 7. 을 참조하시라.

$$\frac{d}{dt}(m\dot{\mathbf{x}} + q\mathbf{A}) = -\nabla(V + q\Phi - q\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}) \quad (1.24)$$

위 식에서 $m\dot{\mathbf{x}} + q\mathbf{A}$ 를 canonical momentum, \mathbf{p}_{can} , $V + q\Phi - q\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}$ 를 velocity dependent potential, U_{vel} 이라 부른다. 위 식을 우리에게 보다 익숙한 꼴로 정리할 수 있다.

$$\frac{d}{dt}\mathbf{p}_{can} = -\nabla U_{vel} \quad (1.25)$$

U_{vel} 을 Lagrangian $L = T - V$ 의 V 에 대입하여 equation of motion $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$ ($q = x, y, z$)를 계산해 보면 실제로 식 (1.22)와 같은 결과가 나온다.⁵ 그러므로 Electromagnetic field 까지 같이 있는 이 system 의 Lagrangian은 식(1.26)처럼 쓴다.

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - [V(\mathbf{x}) + q\Phi - q\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}] \quad (1.26)$$

이 Lagrangian을 이용해서 Hamiltonian을 구성하기 위해선 x, y, z 에 각각 해당하는 generalized momentum 을 알아야 한다.

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + qA_x \\ p_y &= \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y} + qA_y \\ p_z &= \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z} + qA_z \\ \therefore \mathbf{p} &= m\dot{\mathbf{x}} + q\mathbf{A} \end{aligned} \quad (1.27)$$

식(1.27)에서 구한 generalized momentum \mathbf{p} 는 앞서 언급한 canonical momentum 과 같다. x, y, z 와 p_x, p_y, p_z 를 이용하여 Hamiltonian을 구성하면

$$\begin{aligned} H &= \sum_{q_i=x,y,z} (\dot{q}_i p_i) - L = \dot{x}(m\dot{x} + qA_x) + \dot{y}(m\dot{y} + qA_y) + \dot{z}(m\dot{z} + qA_z) - L \\ &= \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + V + q\Phi = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{x}) + q\Phi \end{aligned} \quad (1.28)$$

퍼텐셜 에너지가 $V(\mathbf{x})$ 인 상황에 electromagnetic field를 가해서 달라지는 Hamiltonian을 구하는 과정은 양자역학에서도 똑같다. 다만, 식 (1.28)의 Hamiltonian에서 position \mathbf{x} 와 generalized momentum \mathbf{p} 를

⁵Least action principle $\delta \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}, t) dt = 0$ 을 풀어서 나온 Lagrangian 운동방정식이 $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}$ 인데, 애와 식(1.24)의 x 성분에 해당하는 식인 $\frac{d}{dt}(m\dot{x} + qA_x) = -\frac{\partial}{\partial x}(V(\mathbf{x}) + q\Phi - q\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A})$ 를 좌변, 우변 비교해보자. 웬지 $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + qA_x$ 이고 $\frac{\partial L}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x}(V(\mathbf{x}) + q\Phi - q\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A})$ 인거 같지 않은가? 이 두 식을 이용해서 각각을 \dot{x}, x 에 대해서 적분하니까 $L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - [V(\mathbf{x}) + q\Phi - q\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}]$ 이 나온 것이다. 그리고 정의상 x 의 conjugate momentum p_x 는 $p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ 이므로 이 경우엔 $p_x = m\dot{x} + qA_x$ 가 나온 것이다.

operator로 바꾸어주기만 하면 된다. 고로, 양자역학에서 쓰이는 Hamiltonian Operator는 다음과 같다.⁶

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{P} - q\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{X}) + q\Phi \quad (1.29)$$

양자역학에서 electromagnetic field가 없을 때 Hamiltonian Operator가 $\hat{H}(\mathbf{X}, \mathbf{P}) = (1/2m)\mathbf{P}^2 + V(\mathbf{X})$ 임을 알고 있다. Chapter 4, 6의 Perturbation에서는 해당 system에 외력, 변화가 주어질 때, 즉 \hat{H} 에 추가적인 term이 더해지거나 변할 때 일어나는 현상들을 다룰 것이다. 식(1.29)의 Hamiltonian은 electromagnetic field가 없을 때의 Hamiltonian Operator에 새로운 term H'

$$H' = \frac{1}{2m}(-q\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{P} \cdot q\mathbf{A} + q^2\mathbf{A}^2) + q\Phi \quad (1.30)$$

이 더해진 것으로 볼 수 있다.

여기서 저자가 덤으로 언급하고 싶은 부분이 있다. Electric Field 가 걸려있지 않다고 생각해보자. ($\Phi = 0$) 균일한 magnetic field \mathbf{B}_h 에 대해 vector potential $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}_h \times \mathbf{x}$ 가 \mathbf{B}_h 를 yield 하고, Coulomb Gauge를 만족한다. (자세한 계산과정을 원하신다면 Chapter 7. 으로 가시길 바란다.) 만약 uniform 하지 않은 magnetic field $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ 가 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ 에서 \mathbf{B}_0 라고 하자. $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ 근처에서만 보면 \mathbf{B} 는 \mathbf{B}_0 로 uniform 하다고 할 수 있고, vector potential 도 $\mathbf{A}(\mathbf{x}) \simeq \frac{1}{2}\mathbf{B}_0 \times \mathbf{x}$ 로 approximate 할 수 있다. 이와 식(1.30)을 이용하여 계산해보면

$$\begin{aligned} H' &= \frac{1}{2m}(-q\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} - q\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} + q^2\mathbf{A}^2) \\ &= \frac{1}{2m}(-2q\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + q(\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}) + q^2\mathbf{A}^2) \\ &= -\frac{q}{m}\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2 \end{aligned} \quad (1.31)$$

식(1.31)의 두번째 줄에서 $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}$ 임이 사용되었다. 이거 역시 계산 과정을 chapter 7.에서 참고하시길 바란다. 또한, 마지막 줄에서 \mathbf{A}^2 term은 보통 omit 해버린다.⁷ 계속해서 식을 정리하면,⁸

$$\begin{aligned} H' &= -\frac{q}{m}\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} \\ &= -\frac{q}{2m}(\mathbf{B}_0 \times \mathbf{X}) \cdot \mathbf{P} \\ &= -\frac{q}{2m}[(B_{0y}z - B_{0z}y)P_x + (B_{0z}x - B_{0x}z)P_y + (B_{0x}y - B_{0y}x)P_z] \\ &= -\frac{q}{2m}[B_{0x}(YP_z - ZP_y) + B_{0y}(ZP_x - XP_z) + B_{0z}(XP_y - YP_x)] \\ &= -\frac{q}{2m}[B_{0x}L_x + B_{0y}L_y + B_{0z}L_z] \\ &= -\frac{q}{2m}\mathbf{B}_0 \cdot \mathbf{L} \end{aligned} \quad (1.32)$$

⁶Preface에서 언급했듯이, momentum, position 을 operator로 쓸 때는 대문자로 표시하였다.

⁷이 term을 omit 하는 이런 이유가 있다. \mathbf{A}^2 term의 order가 $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}$ term에 비해 order가 매우 작게 나와서도 있다. MRI 영상촬영 시 사용되는 magnetic field 정도 세기의 1T의 field를 걸어도 실제로 H' 가 system에 가하는 변화는 매우 작다. (chapter 4의 Zeeman effect에서도 이야기가 나오겠지만 수소원자의 전자의 에너지가 원래 에너지에 비해 10^{-2} 에서 10^{-4} 배 정도 만큼만 달라진다.) 1T의 전자 field를 걸어도 변화가 작은데, 실생활에서 쓰이는 magnetic field가 system에 일으키는 변화는 이보다 훨씬 작을 것이다. $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{x}$ 에서 \mathbf{A}^2 term은 \mathbf{B} 의 2차에 비례한다고 생각하면 매우 약한 \mathbf{B} 에 대해 이 2nd order term이 가져오는 effect는 negligible 할 것이다. 또, 이런 이유에서 이 term을 생략할 수도 있다. 부가적이지만 Simon저 The Oxford Solid State Baasics 책의 215쪽 상단에 이런 설명이 있다. $-\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}$ 은 $-\mu \cdot \mathbf{B}_{ext}$ 로 정리되는데 이 term은 magnetic moment가 external field와 상호작용해서 생기는 paramagnetic term으로 볼 수 있고, moment가 external field와 같은 방향으로 align 되어 있을 시 total energy를 감소시키지만 \mathbf{A}^2 term은 물질이 반자성을 띠게 하는 diamagnetic term으로, total energy를 항상 증가시키는데, 이는 paramagnetic term의 효과와 반대이므로 less important하다고 나와있다.

⁸여기서 \mathbf{L} 은 orbital angular momentum ($\mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}$)

마지막 줄에서 $\mu_L = \frac{q}{2m} \mathbf{L}$ 이라고 하면, $H' = -\mu \cdot \mathbf{B}_0$ 이라고 할 수 있고, magnetic field에 의해서 Hamiltonian에 추가된 term을 magnetic dipole moment μ 와 external field \mathbf{B}_0 가 interaction 해서 생긴 것으로 해석할 수 있다. 사실, 이 interaction은 입자의 orbital angular momentum \mathbf{L} 뿐만 아니라 spin angular momentum \mathbf{S} 한테도 영향을 받는다. 상대론적인 효과를 반영하여 Dirac equation을 풀은 결과 g-factor(≈ 2)가 곱해진 spin term을 더하게 되고, magnetic field가 가해져서 Hamiltonian operator에 더해지는 term은 다음과 같이 나타내게 된다.

$$H' = -\frac{q}{2m_e} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} \quad (1.33)$$

이 Hamiltonian은 Chapter 4.의 fine structure와 zeeman effect에서 다시 등장할 것이다.

1.4 Canonical Transformation

먼저 Hamiltonian 역학에서 cyclic 변수가 무엇인지 기억하는가?

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

여기서 L 이 q_i 에 대한 함수가 아니라면, $\dot{p}_i = 0$ 이고, 그것을 시간에 대한 적분상수 α_i 로 둘 수 있다. 이러한 q_i 들을 cyclic variables라고 한다. 여기서 가장 간단한 Hamiltonian 문제를 하나 풀어보자. 모든 generalized coordinates q_i 가 cyclic이고, H 가 conserved라고 하자. 그럼 Hamiltonian은

$$H = H(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \quad (1.34)$$

이며, 여전히 constant in time이다. Hamilton equation을 풀면,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial \alpha_i} = \omega_i(\alpha) \implies q_i = \omega_i t + \delta_i \quad (1.35)$$

이다. 왜 이런 쉬운거 푸냐고? 여기서 우린 상수로 적분하는 행위에 더이상 죄책감을 느껴선 안됩니다. 쉬운 문제였지만, Hamiltonian formalism에선 원래 변수였고, 그게 우리가 푸는 상황에서는 상수가 되었을 뿐입니다. 앞으로 상수가 되어버린 conjugate momentum은 α 로, generalized coordinate는 β 로 쓰게 될 것인데, 원래 변수였다는 사실을 잊지말라구

이제 진짜 이야기를 시작해보자. 먼저 Euler-Lagrange equation은 total derivative가 더해진 $L' = L + dF(q, t)/dt$ 여도 δS , action의 변분에는 영향을 주지 않으므로, EoM⁹ 역시 변화가 없다는 사실을 기억하자.¹⁰ 이제 진짜 transform 할게. Hamiltonian 역학을 다루니까, phase space (q, p) 에서 point transformation을 통해

$$Q_i = Q_i(q, p, t) \quad \text{and} \quad P_i = P_i(q, p, t) \quad (1.36)$$

로 변환되는 걸 생각할 수 있겠다. 근데 우리는 원래 (q, p) 에서 했던

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{and} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (1.37)$$

를 (Q, P) 에서도 쓸 수 있기를 원하는게 맞겠지. 우리는 아래의 조건을 만족하는 새 Hamiltonian K 가 존재하면, 이 transformation은 Canonical하다고 말한다.

$$K = K(Q, P, t) \quad (1.38a)$$

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \quad \text{and} \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \quad (1.38b)$$

⁹Equation of Motion의 약자임.

¹⁰그러겠지. t에 대해 전미분하고 편미분하면 상수니까, L' 과 L 은 상수만큼의 차이만 있을끼고, 변분을 취하면(δ) 그건 아무 영향도 없지?

정의는 잘한 것 같은뎅.. 그래서 q, p 랑 Q, P 의 관계는 어떻게 되는데?
old Hamiltonian에서 Hamilton's principle을 쓰면

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (p_i \dot{q}_i - H(q, p, t)) dt = 0 \quad (1.39)$$

이고, new Hamiltonian에서는

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t)) dt = 0 \quad (1.40)$$

이겠지. 둘은 같은 시간 interval (t_1, t_2) 에 대해서 같은 EoM을 나타내는 아이들이고 파적분함수들이 같을 리가 없게 생겼으므로, 앞에서 잠깐 설명한 F 를 이용해서 다음의 관계식이 성립한다고 할 수 있겠다.
사실 우리가 쓸 수 있는 유일한 방법이다.ㅋㅋ

$$\lambda(p_i \dot{q}_i - H) = P_i \dot{Q}_i - K + \frac{dF}{dt} \quad (1.41)$$

여기서 λ 에 따라 두 가지 종류의 transformations를 정의할 수 있다.

1. $\lambda = 1$ 인 경우를 canonical transformation이라고 한다.
2. $\lambda \neq 1$ 인 경우를 extended canonical transformation이라 한다. 이렇게 궁금한 독자는 Goldstein 9장을 보라. 여기선 안다룬다.

여기서 F 가 old and new phase space variable들의 합수이면 이것을 *generating function*라고 불러준다. Goldstein에서는 F 의 예시를 4가지 들어주지만, 여기서는 편의상 2개만 소개한다. 사실 두 번째로 소개할 친구가 가장 많이 쓰인다.

1.

$$F = F_1(q, Q, t) \quad (1.42)$$

로 정의하자. 물론 old coordinates q_i 와 new coordinates Q_i 는 독립이다.

$$p_i \dot{q}_i - H = P_i \dot{Q}_i - K + \frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i \quad (1.43)$$

여기서 \dot{q}_i 와 \dot{Q}_i 의 계수를 비교하면 다음을 얻는다.

$$p_i = \frac{\partial F_1(q, Q, t)}{\partial Q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_1(q, Q, t)}{\partial q_i}, \quad K = H + \frac{\partial F_1(q, Q, t)}{\partial t} \quad (1.44)$$

2. 너들은 이제

$$F = F_2(q, P, t)$$

같은거 쓰고 좋아하겠지? 위랑 비슷하게 될 줄 알고. 하하 아니란다. Legendre transform은 이럴때도 씁니다 하하

$$F = F_2(q, P, t) - Q_i P_i \quad (1.45)$$

그래야 식 (1.43)같은 짓거리를 할 수 있다. 해보자.

$$\begin{aligned} p_i \dot{q}_i - H &= P_i \dot{Q}_i - K + \frac{d}{dt}(F_2 - P_i Q_i) \\ &= -K + \frac{\partial F_2}{\partial t} + \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \dot{P}_i - \dot{P}_i Q_i \end{aligned} \quad (1.46)$$

여기서 q_i 과 \dot{P}_i 의 계수를 비교하면 다음을 얻겠지?

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}, \quad K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \quad (1.47)$$

글구 이쯤 되면 아마 어지간한 F_i 에 대해서 다음이 성립할 것이라는 생각을 안이하게 할 수 있다.

$$K = H + \frac{\partial F_i}{\partial t} \quad (1.48)$$

그럼 F_i 가 시간 t 에 대해 independent 하면

$$K = H \quad (1.49)$$

인 것이다. 어차피 Goldstein은 책 끝날때까지 F_2 만 쓰니까 다른 상황은 너무 걱정하지 않으셔도 됩니다. 사실 여기서부터는 poisson bracket을 소개하고, Heisenberg picture와의 연관성, Dirac quantization procedure에 대해 논하고 싶지만, 너무너무 귀찮은 관계로 하지 않겠다. 궁금한 사람은 Goldstein을 직접 읽고 감미해 보도록 하자.

1.5 Hamilton-Jacobi Equation and Action-Angle variables

이쯤 되면 이 장의 존재 의의에 대해 밝힐 때가 된 것 같다. 앞서 말한 것처럼, Heisenberg picture는 Goldstein도 열심히 설명을 해 두었기 때문에 poisson bracket도 생략했다. 하지만 Schrodinger pictue는 어디서 왔을까. WKB계산할 때의 가정들은 대체 어디서 왔는가. 그에 대한 설명을 하는 것이 이 장의 목적이었던 것이다.

먼저 모든 transformed canonical variables가 cyclic이라고 하자. 앞에서 보면 (1.47)를 만족하는 미분 방정식을 풀 수 있기만 하면 되는 것이다. 이것의 실제 해를 찾는 것 따위는 목적이 아니라, 해가 있다고 가정하면 그만이다. 그러면 new Hamiltonian K 는 (Q, P) 에 대해 independent라는 것이므로,

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \quad \text{and} \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0 \quad (1.50)$$

인 것이다. 그럼 사실 constant K 를 보는건데, 가장 간단하게 $K = 0$ 으로 보는게 좋겠지.

Generating function으로 $F = F_2(q, P, t)$ 를 쓰면

$$K = H(q, p, t) + \frac{\partial F_2}{\partial t} = 0 \quad (1.51)$$

으로 transformed 되는 것이다. 그럼 위에서 $p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}$ 이므로, 위의 식을 다음과 같이 다시 쓸 수 있다.

$$H(q_1, \dots, q_n, \frac{\partial F_2}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial F_2}{\partial q_n}, t) + \frac{\partial F_2}{\partial t} = 0 \quad (1.52)$$

우리는 이걸 time dependent Hamilton-Jacobi equation, 혹은 H-J equation이라고 부른다. 이것은 1st order partial differential equation of $n+1$ variables (q_1, \dots, q_n, t) 인 것을 염두에 두자. F_2 푸는게 목적이다. $n+1$ 개의 변수가 있으므로 $n+1$ 개의 constants of integration 이 생긴다.¹¹ 그래서 풀면 요로코롬된다.

$$F_2 \equiv S = S(q_1, \dots, q_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, t) \quad (1.53)$$

여기서 α_i 는 integration constants. 그럼 우린 new momenta $P_i = \alpha$ 로 정의할 수 있다. 그럼 $\dot{P}_i = 0$ 이라서

¹¹왜 이렇게 쓰냐고 물을꺼면 그냥 위키읽고오셈. First-order partial differential equation을 검색하면 레퍼런스로 David Hilbert와 Richard Courant가 쓴 수리물리학 책이 달려있다. 힐베르트공간의 그 힐베르트 맞다. 아주아주 훌륭한 H-J eq의 레퍼런스 되시므로 볼놈은 봐도 좋다. vol1,2로 나뉘어있는데 vol2에서 좀 더 자세히 다룬다.

위의 식 (1.50)과도 잘 맞는 것으로 보인다. 그럼 여기서 우린 new variables를 다음과 같이 얻는다.

$$P_i \equiv \alpha_i \quad \text{and} \quad Q_i \equiv \beta = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial \alpha_i} \quad (1.54)$$

α 와 β 는 상수라는 사실을 기억하기 바란다.

몇가지 첨언을 하면,

1. constant α 를 고르는 법은 유일하지 않다. 누가 보기에 새로운 $\gamma = \gamma(\alpha)$ 가 더 좋으면 α 대신 새로 정의해서 쓰면 된다. 그러니까 H-J eq를 풀 때, 너 맘대로 쉬운거 잘 고라 쓰라 이거야.
2. S의 정체에 대해 논할 것이 있다. 우리는

$$\dot{S} = \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial P_i} \dot{P}_i + \frac{\partial S}{\partial t} \quad (1.55)$$

를 알고 있다. S가 변수를 뭘로 가지는 놈인지 기억한다면 쉽게 유도할 것이다. 그런데 다음을 대입하면

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i, \quad \dot{P}_i = 0 \quad \text{and} \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H \quad (1.56)$$

이런 결과가 나온다. 그거면 괜찮;;;

$$\dot{S} = p_i \dot{q}_i - H = L \Rightarrow S = \int L dt \quad (1.57)$$

사실 S는 action이었떤 거 심 하와와;; 그래서 F_2 로 안쓰고 S로 썼음 ○○

3. 사실 이게 고전양자화와 관련이 있다. 띠용? Heisenberg picture(행렬역학)은 poisson bracket의 dirac procedure를 통해 나온 것이라면, Schrodinger picture(슈뢰딩거 eq부터 시작하는 님들이 양자1때 배운 그거같은거)는 여기서 나온다. 혹은 0th order term in the WKB approximation이라고도 할 수 있겠다. WKB가 뭐인진 뒷단원에도 써놨으니까 그때 보시고. 그럼 이제 아메바도 아는 Schrodinger Equation을 쓰면,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q) \right) \psi \quad (1.58)$$

여기에서 wavefunction $\psi = \exp(iS/\hbar)$ 를 대입하자. 그럼 다음과 같이 정리된다.

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial q^2} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + V(q) \quad (1.59)$$

음.. 아마 양자역학이 시작하기 전이면 분명 $\hbar \rightarrow 0$ 이니까, imaginary term이 0으로 가고, 이렇게 정리되네.

$$0 = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + V(q) = \frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) \quad (1.60)$$

오셨다. Kinetic term $p^2/2m$ 에 대해 H-J eq를 양자역학에서 뽑아냈다. 사실 여기서 \hbar 의 0차항만 고려한 것을 0th order WKB라고 한다. 1st order는 \hbar 의 1차항끼리 고려한거..? 뒤에서 하자.

Example: harmonic oscillator

$$H = \frac{1}{2m} (p^2 + (m\omega q)^2) = E \quad (1.61)$$

하와와.. $P = \alpha$, $Q = \beta$ 어차피 1차원 eq라서 variable은 두개인거시야요... 그럼 H-J eq는

$$\frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + (m\omega q)^2 \right\} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (1.62)$$

근데 사실 Hamiltonian이 time에 explicit하게 depend하지 않으면, 그러니까 $\partial H/\partial t = dH/dt = 0$ 이면,(왜 전미분이 편미분이랑 같은지는 학부고전역학책 아무거나 Hamiltonian단원 가면 있다.) 다음과 같이 S 를 쓸 수 있다.

$$S(q, \alpha, t) = W(q, \alpha) - \alpha t \quad (1.63)$$

왜 이렇게 될 수 있을지는 (1.52)를 t 로 편미분 해보고 열심히 생각해 보자. 이렇게 썼을 때, $W(q, \alpha)$ 를 Hamilton's characteristic function이라고 한다. 그럼 새 친구 W 로 풀어보자. 영 이상해 보여도 풀고보면 이게 맞다 싶을 수도 있고 아니면 안타깝고.

$$\frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial W}{\partial q} \right)^2 + (m\omega q)^2 \right\} = \alpha \quad (1.64)$$

하고곡 사실 integration constant α 는 여기서 total energy였던 것임. 사실 (1.52)에 넣어봐도,

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H = 0 \quad (1.65)$$

이라서 여기다가 Hamilton's characteristic function 넣어봐도

$$H = \alpha \quad (1.66)$$

라는걸 알 수 있다. 사실 (1.63)의 정체는 H 가 time independent일 때 new momentum을 energy로 잡는 function이 아닐까.(운동량이 에너지랑 단위 같냐고 묻는 독자는 제에발 없길 바란다. 지금 잡는 좌표는 phase space라서 아무거나 잡아도 됨. 각도가 q 면 각운동량이 p 인 그런거 풀어봤잖아.) (1.64)를 적분하면 다음과 같이 되겠다.

$$W = \sqrt{2m\alpha} \int dq \sqrt{1 - \frac{m\omega^2 q^2}{2\alpha}} \quad (1.67)$$

그리고

$$S = \sqrt{2m\alpha} \int dq \sqrt{1 - \frac{m\omega^2 q^2}{2\alpha}} - \alpha t \quad (1.68)$$

괴랄한데 적분은 어떻게든 가능해 보이는 놈이 나왔다. 진짜 적분할 건 아니고, (1.54)에 넣으면,

$$\beta' = \frac{\partial S}{\partial \alpha} = \sqrt{\frac{m}{2\alpha}} \int \frac{dq}{\sqrt{1 - \frac{m\omega^2 q^2}{2\alpha}}} - t$$

적분하면,

$$t + \beta' = \frac{1}{\omega} \arcsin q \sqrt{\frac{m\omega^2}{2\alpha}} \quad (1.69)$$

여기서 $\beta = \beta' \omega$ 로 두면 고딩때부터 보던놈이 나온다 이거야

$$q = \sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega^2}} \sin(\omega t + \beta) \quad (1.70)$$

그럼 q 는 풀었고, p 는 어떻게 푸는가? 고거슨 (1.67)를 (1.54)에 넣으면 되구연

$$p = \frac{\partial S}{\partial q} = \frac{\partial W}{\partial q} = \sqrt{2m\alpha - m^2\omega^2q^2} \quad (1.71)$$

호곡. 우린 q 이미 풀었으니까 넣으면

$$p = \sqrt{2m\alpha} \cos(\omega t + \beta) \quad (1.72)$$

아는거 나왔쥬? 사실 H-Jeq를 푸는 법은 두개가 있는데 일반적인 (1.63)애를 도입 안하고 그냥 열심히 미분방정식을 푸는 것과, H 가 conserved 될 때 Hamilton's characteristic function을 도입해서 푸는, 방금 한 방법이 있는 것이다.¹² 뭐 어차피 물리하면서 Hamiltonian이 time dependent한거 얼마나 보겠어. 끔찍해라. 사실 cyclic variable q_1 이 있을 때 $p_1 \equiv \gamma$ 에 대해

$$W(q, \alpha) = W_1(q_1, \alpha) + W'(q_2, \dots, q_n, \alpha) = W(q, \alpha) = \gamma q_1 + W'(q_2, \dots, q_n, \alpha)$$

로 쓰인다는 정리가 있는데 귀찮다. goldstein에도 있고 mit 자료¹²에도 있으니 볼 사람은 보셈. 당장 Action Angle variables 도입하는데는 별 쓸모가 없어서ㅋㅋ

이제 Action Angle variables를 정의할 수 있게 되었어요! 와! 사실 이건 “periodic motion”에 대해서만 정의할 수 있는 친구입니다. 일단 상황의 단순화를 위해 H 가 explicitly time independent라고 하자. (1.63)와 Hamilton's characteristic function을 통해 (1.66)를 따라 논리 전개를 시작하겠다. 먼저 action angle 정의부터.

$$J = \oint pdq \quad (1.73)$$

periodic 해야 \oint 를 할거 아님ㅇㅋ? 그런데 이놈이 constant인지는 어떻게 아는가? (1.54)와 (1.47)에서 보았듯이 $p_i = p(q, \alpha)$ 이다. α 는 상수니까 q 에 대해 적분하면 상수가 되겠다. 그럼 $J = J(\alpha)$ 로 쓸 수 있겠다. 그럼 역함수를 취하면, $\alpha \equiv H = H(J)$ 에서 Hamilton's characteristic function J 를 이용해서 쓰면 (1.63)에서 $W(q, \alpha) = W(q, H(J)) = W(q, J)$ 로 나타낼 수 있다.

이제 angle variable을 정의하자. (1.47)에서

$$\omega = \frac{\partial W}{\partial J} \quad (1.74)$$

를 coordinate conjugate to J 인 angle variable이 된다. ω 는 각속도 아니다. 여기서 혹시 혼란스러워할 독자를 위해 말해두면, 지금 무려 3개의 좌표계를 들락날락 거리고 있다. (q, p) , (1.63)가 있는 페이지에서 다른 (β, α) , 방금 정의한 (ω, J) 지금의 논리전개에서 α 는 상수라는 사실만 이용하고 넘어가고 있다. 근데 ω 도 canonical variable이니까 Hamilton's eq가 성립해서

$$\dot{\omega} = \frac{\partial H(J)}{\partial J} = v(J) \text{ is a constant} \quad (1.75)$$

결국 이 장의 맨 처음에서 했던 것과 비슷한 것이 나온다.

$$\omega = vt + \beta \quad (1.76)$$

여기서의 β 는 그냥 initial condition에 의해 정해지는 상수에 불과하다. 앞의 좌표계와 같은 문자를 사용해서 미안하다. 여기서 짚을 것은, action도, action variable J 도, 각운동량과 같은 단위라는 것이다. 사실 action variable이라는 이름도 abbreviated action이랑 action variable이 형태가 너무 비슷해서 나온 건데..ㅋㅋ 그리고 angle variable은 각운동량과 angle의 관계같은 느낌으로 no dimension이라서 붙은 듯

¹²characteristic function을 쓰지 않은 풀이를 보고 싶으면 https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-09-classical-mechanics-iii-fall-2014/lecture-notes/MIT8_09F14_full.pdf 가서 보셈. 사실 지금 쓰는 것도 여기서 많이 배웠습니다.

하다.

이것이 왜 유용한가? 일단 q 가 주기운동을 한번씩 할 때마다 ω 가 얼마나 변하는지 한 번 보자.

$$\Delta\omega = \oint \frac{\partial\omega}{\partial q} dq = \oint \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial J} dq = \frac{\partial}{\partial J} \oint \frac{\partial W}{\partial q} dq = \frac{\partial}{\partial J} \oint pdq = 1 \quad (1.77)$$

와 이거 개사기아니냐. 주기 한번 돌 때마다 1씩 올라감 \Rightarrow 마지막 과정은 (1.73)의 정의이다. 그리고 우린 (1.76)에서 $\Delta\omega = v\tau$ 이다.(주기가 τ) 그럼 여기서

$$v = \frac{1}{\tau} \quad (1.78)$$

가 나온다. v 는 frequency인 것이다. 헐랭. 그리고 만약 $H = H(J)$ 를 잘 찾았다면, (1.75)에 의해서,

$$v = \frac{\partial H(J)}{\partial J} \quad (1.79)$$

가 바로 frequency를 겁나 빠르게 알아내는 방법이다. 보통 위에서 $J = J(\alpha)$ 의 $\alpha = E$ 라는 데서 기인하여 $v = v(E)$, 즉 주어진 에너지에서의 frequency를 알아낼 수 있다. 이것은 뉴턴방정식이나 라그랑주방정식을 주구장창 다 풀어서 나온 결과물로서의 frequency까지 갈 것 없이 빠르게

Example: harmonic oscillator 예시 하나 풀어야지 암 그렇지 ○○ 사실 (1.71)갖다 쓰면 J 의 정의에 의해,

$$J = \oint pdq = \oint \sqrt{2m\alpha - m^2\omega^2q^2} dq \quad (1.80)$$

물론 여기서 α 는 total energy였고, $\omega^2 = k/m$ 이었다. (1.70)를 다음 꼴로 넣어서 한 주기($0, 2\pi$)에 대해 적분하면,

$$q = \sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega^2}} \sin \theta \quad (1.81)$$

에 대해 적분이 다음과 같이 된다.

$$J = \frac{2\alpha}{\omega} \int_0^{2\pi} \cos^2 \theta d\theta = \frac{2\pi\alpha}{\omega} \quad (1.82)$$

와우! α 에 대해 정리하면,

$$\alpha \equiv H = \frac{J\omega}{2\pi} \quad (1.83)$$

그럼 frequency는

$$\frac{\partial H}{\partial J} = v = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (1.84)$$

아는거 나왔죠? 조금 쓸데없는짓을 한번 더 하자. angle variable을 θ 로 두자. 그럼

$$\begin{aligned} \frac{\omega}{2\pi} &= \dot{\theta} \\ \theta &= \frac{\omega}{2\pi} t + \beta' \\ 2\pi\theta &= \omega t + \beta \end{aligned}$$

로 두고, 여기서 θ 를 새로운 그니까 angle variable을 쓸 때 자주 표기할 ω 로 고쳐서 (1.70)와 (1.72)에 넣자. 그럼 다음을 얻는다.

$$q = \sqrt{\frac{J}{\pi m \omega}} \sin 2\pi \omega \quad (1.85)$$

$$p = \sqrt{\frac{m J \omega}{\pi}} \cos 2\pi \omega \quad (1.86)$$

사실 별 쓸모는 없는데 그냥 이렇게 풀면 된다 보여주려고 해봄. 근데 여기서 (1.77)는 기억해 두자. 이것도 WKB에서 보게 될 것이다.

1.6 Problems

1. When a particle of mass m and electric charge q is only under electromagnetic field, the Lagrangian on system can be written as

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 - q(\Phi - \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A})$$

where $\dot{\mathbf{x}}$ is instantaneous velocity of the particle. We also know that the electromagnetic field is invariant under a gauge transformation of the scalar and vector potential given by

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \Lambda$$

$$\Phi \rightarrow \Phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}$$

where Λ is an arbitrary scalar field that depends on time and space. What effect does this gauge transformation have on the Lagrangian of a particle moving in the electromagnetic field? Is the motion affected?

2. Use 4 Maxwell's equations to derive continuity equation in electrodynamics.

$$\text{Answer: } \nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

3. Show directly that transforms below are canonical. At (b), α is an arbitrary constant of suitable dimensions.

(a)

$$Q = \log\left(\frac{1}{q} \sin p\right), \quad P = q \cot p$$

(b)

$$Q = \arctan \frac{\alpha q}{p}, \quad P = \frac{\alpha q^2}{2} \left(1 + \frac{p^2}{\alpha^2 q^2}\right)$$

(c)

$$Q = \log(1 + q^{1/2} \cos p) \\ P = 2(1 + q^{1/2} \cos p) q^{1/2} \sin p$$

CHAPTER 2

Some Fundamental Concepts in Quantum Mechanics

양자역학2는 실제로 Angular Momentum, Time Independant Perturbation, 글니까 이 책으로 따지면 Chapter3부터 시작한다. 그러나, 저자는 Perturbation으로 시작하기 전에 그 이전 내용을 일부 다루고 싶어서 이 chapter를 만들었다. 여기에 저자는 양자역학의 기본 postulates 및 formalism, momentum operator에 대한 설명을 넣었다. 사실, 이 부분도 독자들이 Griffiths 저 Introduction to Quantum Mechanics 2e 기준 1, 2, 3단원을 어느 정도 공부하고 오셨다는 전제하에 내용을 구성하였다.

2.1 The Postulates and Formalism

양자역학의 기본 postulates를 짚고 넘어 가겠다. 고전역학 문제를 풀기 위해서 뉴턴의 법칙, Lagrangian Mechanics을 알아야 하듯이, 양자역학에서의 문제를 풀기 위해선 이 postulates를 알고 있어야하므로 여기에 넣었다.

1. At a fixed time t , the state of a physical system is defined by specifying a ket $|\Psi(t)\rangle$ belonging to the state space \mathcal{H} .
2. Every measurable physical quantity q is described by an Hermitian operator Q acting in the state space \mathcal{H} and the operator Q is called an **observable**.

$$q \Rightarrow Q$$

The only possible result of the measurement of a physical quantity Q is one of the eigenvalues q of the corresponding observable Q .

$$Q|q_n\rangle = q_n|q_n\rangle$$

$$\langle q_n|Q = \langle q_n|q_n$$

3. When the physical quantity Q is measured on a system in the normalized state $|\psi(t)\rangle$, the probability $\mathcal{P}(q_n)$ of obtaining the n -th eigenvalue q_n of the corresponding observable Q is

$$\mathcal{P}(q_n) \propto |\langle q_n|\psi(t)\rangle|^2$$

4. The time evolution of the state vector $|\psi(t)\rangle$ is governed by the time-dependant Schrödinger equation:

$$H|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle$$

이제, 각 항목들에 대해서 양자역학의 formalism 과 함께 설명을 시작하겠다.

Postulate 1.

At a fixed time t , the state of a physical system is defined by specifying a ket $|\psi(t)\rangle$ belonging to the state space \mathcal{H} .

위치, 운동량, 에너지, 스플 등 입자의 물리적 상태는 ket vector $|\psi\rangle^1$ 로 나타내어지고, 이 ket 들이 존재하는 공간, 혹은 집합을 Hilbert Space 라고 부른고, 그 중에서도 ket vector 가 존재하는 공간을 **ket space** $\{|\psi\rangle\}$ 라고 한다. 일반적으로 ket vector 들은 덧셈을 하여

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$$

새로운 ket $|\gamma\rangle$ 가 나올수 있고,² 임의의 복소수를 곱하여

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c$$

새로운 ket vector $c|\alpha\rangle$ 이 나올 수 있다. 그러나, physics postulate에 따르면, $c \neq 0$ 인 복소수인 경우에 대해서 $|\alpha\rangle$ 와 $c|\alpha\rangle$ 가 나타내는 물리적인 상태는 동일하다. 즉, 여기선, vector의 크기보단 방향을 더 중요시 하고 있다. $c = 0$ 인 경우, 곱셈의 결과는 null vector $|0\rangle$ 이 나오며, 이는 vector addition에서의 항등원 역할을 한다.

입자의 물리적인 상태를 나타내는 vector로는 ket 말고 bra vector $\langle\psi|$ 도 있다. 마찬가지로 $\langle\psi|$ 는 **bra space** $\{\langle\psi|\}$ 에 존재하고, bra space와 ket space의 각 원소들 사이에 일대일 대응이 있다.

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &\xleftrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha| \\ |\alpha'\rangle, |\alpha''\rangle, \dots &\xleftrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha'|, \langle\alpha''|, \dots \\ |\alpha\rangle + |\beta\rangle &\xleftrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha| + \langle\beta| \\ c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle &\xleftrightarrow{\text{DC}} c_\alpha^* \langle\alpha| + c_\beta^* \langle\beta| \end{aligned}$$

화살표 위에 있는 DC는 dual correspondence의 약자이다. 단순히 말하자면, bra space를 ket space의 mirror image로 간주할 수 있다. 일반적으로, ket 은 column vecor로, bra는 row vector로 나타낸다.

다음으로, bra vector와 ket vector의 **inner product** $\langle\alpha|\beta\rangle$ 가 정의된다.

column vector $\mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$ 과 row vector $\mathbf{a}^T = (a_1 \quad a_2 \quad a_3)$ 를 inner product 하면 scalar가 나오듯이, bra vector와 ket vector의 inner product도 scalar(일반적으로 복소수임)가 나온다. Inner product의 계산에 있어서 알고 가야할 정의 두 가지를 살펴보겠다. 먼저,

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* \tag{2.1}$$

순서를 바꿔서 inner product 한 결과물들은 서로 complex conjugate이다. 그러므로, $\langle\alpha|\beta\rangle$ 와 $\langle\beta|\alpha\rangle$ 를 똑같다고 보면 안 된다. 하지만, (2.1)에서 $\beta = \alpha$ 를 대입해보면 $\langle\alpha|\alpha\rangle$ 는 scalar 임을 알 수 있다.

다음으로,

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 \tag{2.2}$$

여기서 등호는 $|\alpha\rangle$ 가 null vector일 때만 성립한다. 위 식은, 좌표 공간에서의 벡터로 생각해도 쉽게 받아들여진다. 자기자신과 inner product하면 그 벡터의 크기의 제곱이 나오고 이는 항상 0 이상의 실수가 나올수 밖에 없다.

¹여기서 ket 안에 들어가 있는 ψ 가 뭐 특별한 의미를 갖는 것은 아니다. 임의의 어떤 물리적인 상태를 표현하기 위해 ψ 문자를 사용하는 것이다.

²새로운 ket vector 이니까, 물리적인 상태도 α 와 β 와 다른 새로운 상태라고 생각하면 된다.

$|\alpha\rangle$ 가 null 이 아니라면, 우리는 다음과 같이 normalized ket $|\tilde{\alpha}\rangle$ 를 만들 수 있다.

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} \right) |\alpha\rangle$$

이 normalized ket 은 $\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle = 1$ 을 만족한다. 어떤 물리상태를 나타내는 ket vector 에 0이 아닌 수를 곱해줘도 그 vector 는 동일한 상태를 나타낸다. 많은 경우에, 우리는 normalized 된 vector 를 사용해야 하므로 ket vector 를 이와 같이 다뤄준다.

마지막으로 우리는

$$\langle \alpha | \beta \rangle = 0$$

와 같이 inner product가 0 이 되는 경우, 두 vector 가 서로 직교, *orthogonal* 하다고 한다.

Postulate 2.

Every measurable physical quantity q is described by an Hermitian operator Q acting in the state space \mathcal{H} and the operator Q is called an **observable**.

$$q \Rightarrow Q$$

The only possible result of the measurement of a physical quantity Q is one of the eigenvalues q of the corresponding observable Q .

$$Q|q_n\rangle = q_n|q_n\rangle$$

$$\langle q_n | Q = \langle q_n | q_n$$

양자역학에서 물리량, observable 들은 ket, bra vector 에 작용하는 operator 들로 나타내어진다. 위 영문장과 더불어 이 Operator들이 어떤 성질들을 가지고 있는지도 함께 설명하겠다. Postulate 의 1.번 항목에서 ket, bra vector 를 각각 column, row vector 로 나타낼수 있다고 하였다. 그리고, operator 는 $n \times n$ 정사각행렬에 해당한다. 선형대수에서 column vector $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$ 에 $n \times n$ 행렬 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$ 을 곱해주면 새로운 column vector $\mathbf{v}' = \begin{pmatrix} 5 \\ -3 \end{pmatrix}$ 가 나오듯이, operator 는 다음 수식 처럼 한 ket(bra) vector 를 다른 vector 로 바꿔주는 역할을 한다.³

$$Q|\alpha\rangle = |\beta\rangle$$

또한, 두 크기가 같은 정사각행렬을 곱하는 순서를 바꿔서 곱할 시 일반적으로 다른 결과가 나오듯, operator 들도 일반적으로 ket vector 에 작용하는 순서를 바꿔서 계산하면 다른 결과가 나온다. 이와 관련하여, 두 operator A, B 에 대해 다음과 같은 *Canonical Commutator* 가 등장한다.

$$[A, B] = AB - BA \quad (2.3)$$

만약 $[A, B] = 0$, 즉 $AB = BA$ 이면, A 와 B 는 *commute* 하다고 말한다.

Operator 는 ket vector 의 왼쪽에 표시한다. operator 는 왼쪽에서 오른쪽 방향으로 작용하므로 다음과 같이 ket 안에 집어 넣어서 표시하기도 한다.

$$Q|\alpha\rangle = |Q\alpha\rangle$$

한편, $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$ 에 $\mathbf{e} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ 를 곱해서 $\mathbf{A} \mathbf{e} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \end{pmatrix} = 2\mathbf{e}$ 와 같이 원래 column vector 의

³두 벡터의 inner product 가 scalar 인 반면, outer product 는 새로운 연산자가 된다. 예를 들어 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ 를 ket vector $|\gamma\rangle$ 에 곱해주면 $|\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle = \langle\beta|\gamma\rangle|\alpha\rangle$ 로 새로운 ket vector 가 나온다.

상수배가 나오는 경우가 있다. 마찬가지로, operator Q 를 가했더니 원래 ket vector 의 상수배가 나오는 ket 이 있다.

$$Q|q_n\rangle = q_n|q_n\rangle \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

이런 ket $|q_n\rangle$ 을 Q 의 **eigen ket, eigen vector** 라고 하고 그 상수배 값 q_n 을 **eigen value** 라고 부른다. 그리고, 위 영문장에서 적었듯이, 어떤 observable 에 해당하는 operator 의 eigenvalue 들을, 실제로 그 observable 을 측정해서 얻을 수 있는 값이라고 가정한다. 예를 들어 입자가 가질 수 있는 위치, 운동량, 에너지는 각각 position operator \mathbf{X} , momentum operator \mathbf{P} , Hamiltonian operator H 의 가능한 eigenvalue 이다.⁴

선형대수에서 $n \times n$ 행렬 \mathbf{A} 에 대해 그의 transpose \mathbf{A}^T 가 있듯이, Operator 에도 그의 비슷한 것이다. 어떤 Operator Q 와 vectors $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ 에 대해 Q 의 hermitian adjoint Q^\dagger 가 다음과 같이 정의된다. (물론, Q^\dagger 도 당연히 operator 이다.)

$$\begin{aligned} \langle \alpha | Q | \beta \rangle \\ \langle \alpha | Q \beta \rangle = \langle Q^\dagger \alpha | \beta \rangle \end{aligned}$$

여기서 $\langle Q^\dagger \alpha |$ 는 $|Q^\dagger \alpha\rangle = Q^\dagger |\alpha\rangle$ 에 대응하는 bra vector 이다. 만약 어떤 Operator 가

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I \quad (2.4)$$

이면, 우리는 U 를 *unitary* 하고 부르고,

$$A = A^\dagger \quad (2.5)$$

이면 A 를 *Hermitian* 하다고 부른다. 위 영문장을 보면 물리량들은 Hermitian operator 로 나타내어진다고 적혀있다. 왜 하필 Hermitian operator 일까? 그 이유를 살펴보자. $|q_n\rangle, q_n$ 을 어떤 Hermitian Operator Q 의 n -th eigen ket, eigen value 이라고 하자. (지금 이 문맥에서는 eigenvalue spectrum 이 discrete 한 경우에 대해서 다루고 있다.)⁵

$$\begin{aligned} \langle q_m | Q | q_n \rangle &= \langle q_m | (Q | q_n \rangle) &= q_n \langle q_m | q_n \rangle \\ &\parallel \\ \langle Q^\dagger q_m | q_n \rangle &= \langle Q q_m | q_n \rangle \\ &\parallel \\ \langle Q q_m | q_n \rangle &= (\langle q_n | Q q_m \rangle)^* \\ &\parallel \\ (q_m \langle q_n | q_m \rangle)^* &= q_m^* \langle q_m | q_n \rangle \\ \\ \therefore (q_m^* - q_n) \langle q_m | q_n \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (2.6)$$

위로부터 우리는 몇 가지 정보를 얻을 수 있다. 먼저, $m = n$ 을 대입해보자. $|q_n\rangle \neq 0$ 이므로 postulate 1에 의하여 $\langle q_n | q_n \rangle$ 은 0 이 아니므로, $q_n = q_n^*$ 이다!!! 즉, Hermitian operator 의 eigen value 는 항상, 실수이다.

다음으로, 식(2.6)에 있는 * 을 제거하자. $q_m \neq q_n$ 인 경우, 식의 우변이 0 이 되기 위해선, $\langle q_m | q_n \rangle = 0$ 이 되어야 한다.

위에서 말한것을 다시 쓰면,

1. Eigenvalues of Hermitian operators are *real*.
2. Eigenvectors corresponding to different eigenvalues are orthogonal.

1. 를 생각하면 physical observable 들이 왜 Hermitian 한 operator 로 나타내야하는지를 생각할 수 있다. 입자의 운동량, 스핀, 위치 등 physical observable 들에 해당하는 operator 의 eigenvalues 만이 그

⁴여기서, Hamiltonian 은 고전역학에서 다뤘던 그 Hamiltonian $H = H(x, p)$ 가 맞다. 대신, 양자역학에서는 coordinate 들과 momentum 들을 $x \rightarrow \mathbf{X}, p \rightarrow \mathbf{P}$ operator 로 바꿔서 Hamiltonian 이 x, p 에 대한 function 이 아닌 operator 로서 등장한다. 아무리 Energy eigenvalue 를 계산하는데 쓰여도 그렇지, 이 놈의 주 특징은 infinitesimal time evolution $t \rightarrow t + dt$ 을 일으킨다는 것이다.

⁵물론, 모든 n 에 대해서 $|q_n\rangle$ 은 null 이 아니다.

observable 을 측정해서 얻을 수 있는 값인데, eigenvalues 가 허수부가 있는 복소수가 나오면 안 된다. 이런 물리량들은 항상 실수의 값을 갖기 때문이다.

2.에서 다른 eigenvalue 에 해당하는 eigenvectors 는 서로 직교한다고 하다고 하였다. 대부분의 경우 우리는 eigenvectors 를 normalize 해서 사용하므로 eigenvalue spectrum 에 degeneracy 가 없을 경우,⁶ 이들 사이의 inner product 의 관계를 다음과 같이 압축시킬수 있다.

$$\langle q_m | q_n \rangle = \delta_{m,n} \quad (2.7)$$

즉, 직교 좌표계의 서로 다른 단위 벡터들처럼 자기 자신과 내적하면 1이 되고, 다른 vector 와 내적하면 0이 된다는 뜻이다.⁷ 직교 좌표계에서 세 단위 벡터들은 $\hat{e}_x = \langle 1, 0, 0 \rangle$, $\hat{e}_y = \langle 0, 1, 0 \rangle$, $\hat{e}_z = \langle 0, 0, 1 \rangle$ 과 같이 한 성분만 1이고 나머지 성분들은 0인 벡터들로 나타내어지고, orthonormal 하다. 이 점에 착안하여 $q_1, q_2, q_3 \dots$ 에 해당하는 eigenvector 들을 다음과 같이 나타낼수 있다.

$$|q_1\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |q_2\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad |q_3\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\langle q_1 | \Rightarrow (1 \ 0 \ 0 \ \dots), \quad \langle q_2 | \Rightarrow (0 \ 1 \ 0 \ \dots) \quad \langle q_3 | \Rightarrow (0 \ 0 \ 1 \ \dots) \quad (2.8)$$

또한, 이 eigenvector 들은 *complete set* 을 이룬다. 다른 말로, 3차원 직교 좌표계에서 어떠한 벡터들도 서로 수직인 세 단위 벡터 $\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z$ 의 선형결합으로 나타낼수 있듯이 어떠한 ket vector $|\psi\rangle$ 도 임의의 복소수 c_1, c_2, c_3, \dots 에 대해서

$$|\psi\rangle = \sum_m c_m |m\rangle = c_1 |q_1\rangle + c_2 |q_2\rangle + c_3 |q_3\rangle + \dots$$

eigenvector 들의 선형결합으로 나타낼수 있다는 뜻이다. 여기서 c_n 은 어떻게 구할까? Eigenvector 들의 orthonormality $\langle q_n | q_m \rangle = \delta_{n,m}$ 를 활용하면,

$$\langle q_n | \psi \rangle = \sum_m \langle q_n | c_m | q_m \rangle = \sum_m c_m \delta_{n,m} = c_n$$

이와 같이 c_n 을 구할 수 있다. $|\psi\rangle$ 를 다시 적어보자.

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n |q_n\rangle c_n \\ &= \sum_n |q_n\rangle \langle q_n | \psi \rangle \\ &= \left(\sum_n |q_n\rangle \langle q_n | \right) |\psi\rangle \end{aligned} \quad (2.9)$$

식(2.9)의 마지막 줄에서 파란색으로 묶인 부분을 보자. 이와 같이 ket 과 bra 를 outer product 한 것은 operator 인데, 저 파란색 부분을 붙이나 마나 결과는 $|\psi\rangle$ 로 같으므로 이를

$$I = \sum_n |q_n\rangle \langle q_n | \quad (2.10)$$

Identity Operator 라고 부른다. 이는 행렬로 따지면 대각성분만 1이고 나머지는 0인 정사각행렬, 혹은 단위행렬에 해당한다.

⁶완전 다른 두 ket vector 가 하나의 operator 에 대해서 같은 eigenvalue 를 가지는 경우, degeneracy 가 있다고 말한다.

⁷vector 들이 normalize 되어 있고 서로 orthogonal 하므로 이를 합해서 orthonormal 하다고 말한다.

$$\begin{aligned}
I &= \sum_n |q_n\rangle \langle q_n| \\
&= (1 \ 0 \ 0 \ \dots) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} + (0 \ 1 \ 0 \ \dots) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} + (0 \ 0 \ 1 \ \dots) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} + \dots \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} + \dots \\
&= \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

위 성질을 이용하여 임의의 Operator 를 $\{|q_n\rangle\}$ basis 로 행렬로 나타낼수 있다. 임의의 operator A 의 양쪽에 Identity Operator 를 붙여보자.

$$\begin{aligned}
A &= IAI \\
&= \left(\sum_m |q_m\rangle \langle q_m| \right) A \left(\sum_n |q_n\rangle \langle q_n| \right) \\
&= \sum_{m,n} |q_m\rangle \langle q_m| A |q_n\rangle \langle q_n| \\
&= \sum_{m,n} |q_m\rangle \langle q_n| \boxed{\langle q_m| A |q_n\rangle}
\end{aligned}$$

위 식에서 $|q_m\rangle \langle q_n|$ 를 (m,n) 성분만 1이고 나머지 성분들이 모두 0인 행렬이라고 본다면, $\langle q_m| A |q_n\rangle$ 는 A 의 행렬표현의 (m,n) 성분이라고 볼 수 있다. 이와 같이 operator 를 eigenbra 와 eigenket 으로 sandwich 해 놓은 것을 matrix element 라고 부른다.

지금까지 우리는 Operator의 eigenvalue spectrum 이 discrete 한 경우에 대해서 다뤄봤다. Spectrum 이 continuous 한 경우는 이 책의 분량이 너무 길어지는 관계로 자세히 다루지는 않고 몇 가지만 아주 간단하게 보여주겠다. Discrete case 에서 , eigenvalue 와 eigenkets 들이 countable 한 반면, continuous case 에서는 이들이 uncountable 하므로, Eigenvector 의 orthonormality 가 식(2.7)와 같은 Kronecker Delta 가 아닌

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q-q')$$

Dirac Delta 로 나타내어진다. 또한, Identity Operator 를 구할때 eigenket 과 eigenbra 를 outer product 하여 모든 index n 에 대하여 summation 을 했던 반면, 여기서는 integral 을 해줘야 한다.

$$I = \int |q\rangle \langle q| dq \quad (2.11)$$

적분기호에 범위를 표시하지 않아서 그렇지, 모든 q 에 대해서 계산해 줘야 하므로, q 가 1차원 변수 이면 적분을 $\int_{-\infty}^{+\infty} dq$ 로 해야 하고, 3차원 변수인 경우 $\int d^3\mathbf{q} = \int_0^{+\infty} |\mathbf{q}|^2 d|\mathbf{q}| \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$ 와 같이 적분해 줘야 한다. 또, 위의 Identity Operator을 이용해서 식 (2.9) 처럼 $|\psi\rangle$ 를 $|q\rangle$ 에 대해서 나타내면 다음과 같다.

$$|\psi\rangle = \int |q\rangle \langle q| \psi\rangle dq \quad (2.12)$$

Postulate 3.

When the physical quantity Q is measured on a system in the normalized state $|\psi(t)\rangle$, the probability $\mathcal{P}(q_n)$ of obtaining the n -th eigenvalue q_n of the corresponding observable Q is

$$\mathcal{P}(q_n) \propto |\langle q_n | \psi(t) \rangle|^2$$

길고 긴 두번째 항목 설명을 끝내고 드디어 세번째 항목이다. 위 영문장에 따르면 $|\psi\rangle$ 에서 observable Q 를 측정해서 q_n 이 나올 확률은 $|\langle q_n | \psi \rangle|^2$ 에 비례한다.⁸ 하지만, 이는 상대적인 확률이므로 적절하게 normalize를 해줘야 한다. Q 의 eigenkets의 completeness를 활용해서 계산해보면

$$\mathcal{P}(q_n) = \frac{|\langle q_n | \psi \rangle|^2}{\sum_m |\langle q_m | \psi \rangle|^2} = \frac{|\langle q_n | \psi \rangle|^2}{\sum_m \langle \psi | q_m \rangle \langle q_m | \psi \rangle} = \frac{|\langle q_n | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

만약 $|\psi\rangle$ 가 normalize되어 있었다면, 구하는 확률은 단순히

$$\mathcal{P}(q_n) = |\langle q_n | \psi \rangle|^2 \quad (2.13)$$

일 것이다. 이런 이유로, 물리적인 상태를 나타내는 vector는 보통 normalize하여 사용한다. 필자는 $|\psi\rangle$ 가 normalize되어 있는 점에 다음과 같은 의미를 덧붙이고 있다. 3번 formalism의 영문장에 의하면, “ $|\langle \psi | \psi \rangle|^2$ 는 $|\psi\rangle$ 상태에서 입자의 물리적인 상태를 측정한 결과 ψ 일 확률”이 된다. 즉, 자기자신 그대로 일 확률이므로 이는 당연히 1이 나와야 한다. 여기서 의미를 하나 더 뽑아내자면, 물리적인 상태를 나타내는 vector는 normalizable해야 한다.

이 항목도 discrete case에 대해서만 다뤘다. 그러면 continuous case에서도 언급하겠다. Normalizable ket $|\psi\rangle$ 에 대해서

$$|\langle q_0 | \psi \rangle|^2 dq \quad (2.14)$$

는 “ $|\psi\rangle$ 상태의 입자에 대해서 observable Q 를 측정해서 $q = q_0$ 와 $q = q_0 + dq$ 사이의 값이 나올 확률”이고, $|\langle q | \psi \rangle|^2$ 는 확률밀도함수(마이너스 무한에서 플러스 무한까지 적분시, 1이 됨)이다. 여기서, $\langle q | \psi \rangle$ 는 q 에 대한 함수이며, q -space에서의 wave function이라고 부른다. Physical observable을 나타내는 operator 중에서 position operator \mathbf{X} 가 continuous spectrum을 보이는 대표적인 한 예시이고, $\langle x | \psi \rangle$ 는 바로 그, Griffiths 교재에서 1단원 시작부터 확률밀도함수이라고 알고 가는 $\psi(x)$ 이다. $|\psi\rangle$ 의 normalizability와 식(2.11)의 Identity Operator를 사용하면

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | I | \psi \rangle \\ &= \int \langle \psi | q \rangle \langle q | \psi \rangle dq \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\langle q | \psi \rangle|^2 dq \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(q)|^2 dq \end{aligned} \quad (2.15)$$

를 얻을 수 있다. 위 식처럼 마이너스 무한에서 플러스 무한까지 적분이 1 같이 finite한 값이 나오기 위해선 $\psi(q)$ 의 $q \rightarrow \pm\infty$ 극한이 0이 되어야 한다.

다시 discrete case로 돌아가서, 이번엔 $|\psi\rangle$ 에서의 Q 의 기댓값을 구해보자. q_n 과 그에 해당하는

⁸앞서 본 postulate의 2. 항목에 의하면 $|\psi\rangle$ 는 $\sum_n |q_n\rangle \langle q_n | \psi \rangle$ 로 eigenket들의 linear combination으로 나타낼 수 있다. 이거 때문에 $|\langle q_n | \psi \rangle|^2$ 를 “ $|q_n\rangle$ 이 $|\psi\rangle$ 에서 차지하는 비율”, 혹은 “ $|\psi\rangle$ 상태의 입자가 $|q_n\rangle$ 에 있을 확률”이라고 해석하는 사람들이 종종 있다. 그러나, 이 책의 문맥에서도 말했듯이, “ $|\psi\rangle$ 에서 observable Q 를 측정해서 q_n 이 나올 확률”이 훨씬 정확한 표현이므로, 이 점 알으셨으면 한다.

확률질량함수 $|\langle q_n | \psi \rangle|^2$ 를 곱한것을 모든 index n 에 대해서 summation 돌리면 된다.

$$\begin{aligned}\langle Q \rangle &= \sum_n |\langle q_n | \psi \rangle|^2 q_n = \sum_n \langle \psi | q_n \rangle q_n \langle q_n | \psi \rangle \\ &= \sum_n \langle \psi | q_n \rangle \langle Q q_n | \psi \rangle \\ &= \sum_n \langle \psi | q_n \rangle \langle q_n | Q | \psi \rangle\end{aligned}\tag{2.16}$$

$$= \langle \psi | Q | \psi \rangle\tag{2.17}$$

따라서, Q 를 $\langle \psi |$ 와 $|\psi \rangle$ 로 sandwich 한 것은 $|\psi \rangle$ 상태에서 Q 를 측정했을 때 얻는 기댓값이다. Continuous case에서도 기댓값은 $\langle \psi | Q | \psi \rangle$ 로 계산한다. 이부분은 읽는 여러분이 혼자서 직접 유도해봐라. 타이핑 하기 너무 성가시다.

Postulate 4.

The time evolution of the state vector $|\psi(t)\rangle$ is governed by the time-dependant Schrödinger equation:

$$H |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle\tag{2.18}$$

입자의 물리적 상태를 나타내는 ket vector는 time dependancy를 가진다. 고전역학에서 뉴턴의 제2법칙 $\mathbf{F} = m \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{x}$ 가 물체의 displacement \mathbf{x} 의 time evolution을 기술하듯이, 이 방정식도 $|\psi\rangle$ 의 time evolution을 기술한다. Hamiltonian은 전전전전페이지의 footnote에도 적었듯이 고전역학에서 Lagrangian을 Legendre Transform 해서 얻은 $H = H(x, p)$ 에서 coordinates와 momentums을 $x \rightarrow \mathbf{X}, p \rightarrow \mathbf{P}$ operator로 바꿔서 쓴 또다른 operator이다. 식(2.18)은 고전역학에서 함수 $u(t)$ 를 $u(t) \rightarrow u(t + \delta t)$ 로의 infinitesimal time evolution을 generating 한다는 idea에서 기인했다.⁹ 그레므로 필자는 왜 이런 식이 나왔는지 유도되는 과정을 보여드리고자 한다.

다음과 같이 infinitesimal time evolution을 generate하는 operator $U(\delta t)$ 가 있다.

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi(t + \delta t)\rangle = U(\delta t) |\psi(t)\rangle\tag{2.19}$$

여기서, $U(\delta t)$ 는 unitary 해야 한다. (i.e, $U^\dagger U = 1$) $|\psi\rangle$ 는 시간이 지나도 항상 normalizable 해야 하므로 이를 식으로 적어보면,

$$\begin{aligned}1 &= \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle, \\ 1 &= \langle \psi(\delta t) | \psi(\delta t) \rangle = \langle U(\delta t) \psi(0) | U(\delta t) \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \underbrace{U(\delta t)^\dagger U(\delta t)}_{=I} | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = 1\end{aligned}$$

이 context에서 우리는 모든 식들을 δt 에 대해서 1st order 까지만 정리한다는 점을 알고 있으시라. $U(\delta t)$ 는 unitary 하므로 Hermitian operator Q 에 대해서 다음과 같이 적을 수 있다.

$$U(\delta t) = I - iQ\delta t\tag{2.20}$$

이 Operator를 위와 같이 적는데 납득이 갈 만한 몇가지 이유가 있다.

⁹왜 고전역학적으로 Hamiltonian이 infinitesimal time evolution을 일으키는지까지 설명을 하고 싶었으나 분량이 너무 길어지는 것을 우려하여 생략했다. 만약 이 기원을 자세히 알고 싶으신 분들로 위해 어디를 읽으면 되는지 guideline만 제시하겠다. 먼저, 이 책의 1.4 Canonical Transformation을 읽어서 generating function F 가 어떤 놈인지를 이해하여라. 그 다음, Goldstein 3e 책의 9.4 section을 읽고 페이지 388의 poisson braket $[u, v]$ 가 뭐를 어떻게 계산하는 건지 정도만 이해하시라. 식(9.68)의 표시 방법도 알고 가면 좋다. 다음, 9.6단원에서 페이지 399까지 읽으시면 이런 문장을 발견하실 것이다. “Thus, the motion of the system in a time interval dt can be described by an infinitesimal contact transformation generated by the **Hamiltonian**.” 이 문장이 제일 핵심이다.

1. 첫째, δt 가 0 경우, time evolution 이 일어나지 않고, $|\psi(t)\rangle$ 는 변하지 않는다. 즉, 이 경우에서 U 는 Identity operator 가 되는데, $\delta t = 0$ 을 식(2.20)에 대입해서 나온 것에 부합하다.
2. 둘째, time evolution 을 연달아 계산하는 것이 가능하다. $t \rightarrow t + (\delta t_1 + \delta t_2)$ 의 translation 을 두차례에 걸쳐서 계산해보는 과정을 생각해보자. 시간이 t 인 시점에서 δt_1 만큼 translate 한 다음 δt_2 만큼 translate 하면 된다. 앞서 말했듯이 δt 에 대해서 1st-order 까지만 정리해보자.

$$\begin{aligned} U(\delta t_2)U(\delta t_1) &= (I - iQ\delta t_2)(I - iQ\delta t_1) \\ &\simeq I - iQ(\delta t_1 + \delta t_2) = U(\delta t_1 + \delta t_2) \end{aligned} \quad (2.21)$$

3. 마지막으로 식(2.20)의 operator 는 우리가 원하는 unitary 의 성질도 만족시킨다.

$$\begin{aligned} U(\delta t)^\dagger U(\delta t) &= (I + iQ\delta t)(I - iQ\delta t) \\ &\simeq I \end{aligned}$$

식(2.20)에 있는 hermitian operator Q 는 어떤 operator 일까? 앞서 언급한 “ H 가 $t \rightarrow t + \delta t$ 의 infinitesimal time evolution 을 generating 한다는” idea 와 dimension analysis 를 통해 (I 와 더해지는 놈 $iQ\delta t$ 는 서로 dimension 이 같아야 하므로 Q 의 dimension 은 시간의 역수이여야 한다.) $Q = \frac{H}{\hbar}$ 이라고 둔다.¹⁰ 따라서 우리가 구하는 operator 는 다음과 같다.

$$U(\delta t) = I - \frac{iH\delta t}{\hbar} \quad (2.22)$$

(2.22) 을 (2.19)에 대입해서 δt 에 대해 1st order 까지만 taylor expansion 해보면,

$$\begin{aligned} |\psi(t + \delta t)\rangle &= \left(I - \frac{iH\delta t}{\hbar}\right) |\psi(t)\rangle \\ &= |\psi(t)\rangle + \delta t \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (2.23)$$

(2.23)의 첫번째 줄의 마지막 식과 두번째 줄의 식을 이용해서 정리하면 다음의 식을 얻을 수 있다.

$$H|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (2.24)$$

Hamiltonian Operator 가 Energy eigenvalue 를 구하는데 쓰이는 것을 많이 접하시겠지만, 그 이전에 요놈은 time evolution generator 역할을 한다는 점을 꼭 알고 가셨으면 좋겠다.

이번엔 infinitesimal 이 아닌 finite time evolution $|\psi(0)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle$ 를 살펴보자. 시간이 0 인 시점에서 t 인 시점으로 translation 이 일어나는 것을 우리가 앞서 본 infinitesimal translation 을 이용해서 어떻게 다룰 것인가. $0 \rightarrow t$ 로 가는 것을 자연수 N 번 만큼 나눠서 반복해보자. 즉, 이 translation 을 t/N 만큼 N 번 반복하는걸로 다루자는 소리이다. 그 다음 $N \rightarrow +\infty$ 극한을 취할 것이다. 그러면 t/N 은 0 으로 수렴하므로 시간을 $0 \rightarrow t/N$ 으로 보내는 것을 infinitesimal translation 이라고 간주할 수 있다.

$$\begin{aligned} U(t) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} U(t/N)^N = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(I - \frac{iH}{\hbar} \frac{t}{N}\right)^N \\ &= \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (2.25)$$

¹⁰ 그러니까 고전역학에서 H 가 time evolution 을 generate 하니까, $U = I - iQ\delta t$ 에서 $Q = H/\hbar$ 라고 둔다고.

여기서, dimensionless, hermitian operator A 의 exponential 은 다음과 같이 정의 된다.

$$\exp(A) = I + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \dots$$

실수 x 에 대해서 $\exp(x)$ 를 $x = 0$ 근처에서 taylor expansion 하는 것과 유사하다. 그리고 다 풀어헤친 것을 생각하면 $[\exp(iA)]^\dagger = \exp(-iA)$ 이 성립한다. 자, $|\psi\rangle$ 가 time-dependency 를 가지므로, time dependancy 가 없는 operator Q 의, 이 상태에서의 기댓값 $\langle\psi|Q|\psi\rangle$ 는 일반적으로 time-dependency 를 가진다. (2.25)의 operator 를 활용하여 expectation value 를 적어보자.

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_t &= \boxed{\langle \psi(t) | Q | \psi(t) \rangle} = \langle U(t)\psi(0) | Q | U(t)\psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | U(t)^\dagger Q U(t) | \psi(0) \rangle \\ &\quad + \boxed{\langle \psi(0) | e^{\frac{iHt}{\hbar}} Q e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | \psi(0) \rangle} \\ &= \langle Q \rangle_0 - t \left(\frac{i}{\hbar} \right) \langle [H, Q] \rangle + \left(\frac{t^2}{2!} \right) \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \langle [H, [H, Q]] \rangle - \dots \end{aligned} \quad (2.26)$$

위에서 expectation value 를 표현하는 두가지 방식을 볼 수 있다. (2.26)의 첫번째 줄의 상자에 들어간 부분 처럼 sandwich 된 부분에 시간이 없고 양 옆에서 감싸고 있는 vector 들이 time-dependency 가 있게 표현한 것을 **Schrödinger Picture**라고 부르고, 세번째 줄의 상자처럼 반대로 sandwich 된 부분에 시간이 들어가 있고 양 옆에서 감싸고 있는 vector 들의 time-dependency 가 없게 표현한 것을 **Heisenberg Picture**라고 한다. 독자 여러분들이 ‘picture’라는 용어를 ‘그림’이라는 의미 보다는 ‘묘사 방식’ 의미로 알고 가셨으면 좋겠다.

또, 식 (2.26)에서 알 수 있는 점이 하나 더 있다. 마지막 줄에서 필자는 $e^A = I + A + \frac{A^2}{2!} + \dots$ 을 전개해서 항들을 t 에 대해서 정리하였다.¹¹ canonical commutator 가 여러개가 나왔는데, 이런 해석도 가능하다. Hamiltonian operator H 와 commute 하지 않는 operator 는 time evolution 에 대해서 variant 한 반면, commute 한 operator 는 time evolution 에 대해서 invariant 하다고.

2.2 Position, Translation and Momentum

Postulate 2. 항목에 의하면 입자의 물리적인 상태는 Hermitian Operator 로 나타내어진다고 하였고, 그 예로 대표적으로 다음의 eigenvalue problem 을 만족시키는 position Operator \mathbf{X} 과 momentum operator \mathbf{P} 가 있다.

$$\begin{aligned} \mathbf{X} |\mathbf{x}\rangle &= \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \\ \mathbf{P} |\mathbf{p}\rangle &= \mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \end{aligned} \quad (2.27)$$

첫번째 식에서 양변에 있는 $|\mathbf{x}\rangle$ 는 입자가 position \mathbf{x} 에 있는 상태를 나타내는 ket 이고, 우변에 있는 \mathbf{x} 는 position operator 의 eigenvalue 이다. 필자가 위와 같은 식을 쓸 때, 대문자와 소문자로 Operator 와 eigenvalue 를 구분해서 표시할 것이므로 혼동하지 마시길 바란다. 만약 \mathbf{X} 가 $|\mathbf{x} + \mathbf{a}\rangle$ 에 작용한다면 그 eigenvalue 는 $\mathbf{x} + \mathbf{a}$ 가 될 것이다. 필자는 \mathbf{X} 와 \mathbf{P} 가 어떤 관계를 가지는지, 그리고 \mathbf{x}, \mathbf{p} space 에서 어떻게 나타나는지를 다루고 싶어서 이 section 을 작성하였다.

¹¹ 사실, 식을 전개할 때 다음의 Baker–Campbell–Hausdorff formula 를 사용하였다.

$$e^A B e^{-A} = B - [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \underbrace{[A, \dots [A, B]]}_{n'A's}$$

이 전개과정 역시 궁금하면 chapter 7.에서 확인하시길 바란다.

2.2.1 Operators

보통 입자의 position 은 (x, y, z) 세개의 coordinate 로 나타내므로 위에는 3차원 vector 로, bold 글씨체로 표시하였는데, 여기서는 position 을 1차원에서만 다뤄보겠다.

$$X|x\rangle = x|x\rangle \quad (2.28)$$

앞section 의 postulate 4. 에서 필자는 infinitesimal time evolution operator 를 도입하였다. 여기서도 다음 식과 같이 입자의 position 을 x 에서 $x + \delta x$ 로 translate 시켜주는 operator $T(\delta x)$ 를 도입해보자.

$$T(\delta x)|x\rangle = |x + \delta x\rangle \quad (2.29)$$

입자의 position 이 바뀌었으므로 X operator 의 eigenvalue 도 달라질 것이다.

$$XT(\delta x)|x\rangle = X|x + \delta x\rangle = (x + \delta x)|x + \delta x\rangle \quad (2.30)$$

위 식과 반대로 $|x\rangle$ 에 position operator 를 가한 뒤 translation operator 를 가하면 어떻게 될까?

$$TX|x\rangle = xT|x\rangle = x|x + \delta x\rangle \quad (2.31)$$

이번엔 식(2.30)에서 (2.31)를 빼고 (2.3)에서 정의한 Canonical Commutator 를 도입해보자.

$$\begin{aligned} (XT - TX)|x\rangle &= X|x + \delta x\rangle - xT|x\rangle \\ &= (x + \delta x)|x + \delta x\rangle - x|x + \delta x\rangle \\ &= (x + \delta x)T|x\rangle - xT|x\rangle \\ &= \delta x T|x\rangle \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\therefore [X, T(\delta x)] = \delta x T(\delta x) \quad (2.33)$$

식 (2.33)와 같은 commutator relation 은 나중에 Simple Harmonic Oscillator, Angular Momentum 에서 Ladder Operator 를 다룰때도 비슷한 형태로 등장하므로 꼭 알고 가셨으면 한다. 이제, $T(\delta x)$ 를 어떻게 나타낼지가 관건이다. 고전역학의 Canonical Transformation 이야기를 다시 꺼내보자. Lagrangian $L(q, \dot{q}, t)$ 을 \dot{q} 로 편미분해서 나온 놈을 $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p$, ‘generalized momentum conjugate to the generalized coordinate q ’라고 부르는데, p 는 임의의 함수 $u = u(q, p, t)$ 에서 $u(q) \rightarrow u(q - \delta q)$ 으로의 infinitesimal translation 을 generate function 이다.¹² 이 idea 와 postulate 4. 의 식(2.20)에서 사용한 논리를 이용하면, $T(\delta x)$ 를 이와 같이 나타낸다.

$$T(\delta x) = I - \frac{iP\delta x}{\hbar} \quad (2.34)$$

식(2.34)을 (2.33)에 대입해서 δx 에 대해서 1st order 까지만 정리하면 다음과 같은 관계식이 나온다.

$$[X, P] = i\hbar \quad (2.35)$$

우리가 아아아아아주 많이 본 X와 P 의 commutator relationship 이 나왔다. 위 relationship 은 P 가 X의 eigenvalue 를 translate 시키는 operator 라는 사실에서 기인하였으며 Heisenberg's Uncertainty Principle

¹²왜 이런 아이디어가 나오는지 6단원에 넣고 싶었으나 내용이 너무 길어지는 것이 염려되어 포기하고 말았다. 적어도 이 부분을 궁금해 하시는 독자들을 위해 어디를 읽고 공부하면 되는지 만큼은 알려드리겠다. 먼저, 본 책의 28쪽 하단의 footnote 9번을 쭉 읽으시라. 그 다음, Goldstein 3e 페이지 401~403 까지 읽으시라. 여서도 I.C.T(Infinitesimal Canonical Transformation)를 다룬다.

$$\begin{aligned} u(\mathcal{B}) - u(\mathcal{A}) &= \partial u = \delta \varepsilon[u, G] \\ &= \delta \varepsilon \left(\frac{\partial u}{\partial q} \frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial G}{\partial q} \frac{\partial u}{\partial p} \right) = \delta \varepsilon \left(\frac{\partial u}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial u}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right) \end{aligned}$$

에서 두번째 줄에서 $\frac{\partial u}{\partial q}$ 와 $\frac{\partial u}{\partial p}$ 의 계수를 비교해보시라. $\frac{\partial q}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial G}{\partial p}$, 그리고 $\frac{\partial p}{\partial \varepsilon} = -\frac{\partial G}{\partial q}$ 이다. 만약, $(q \rightarrow q + \delta q)$ 의 translation 을 일으키려는 경우, 즉 위 식들에서 ε 이 q 인 경우, 그러니까 translation 이 일어나는 coordinate 가 q 인 경우엔 G , the generator 는 p 가 된다. 즉, p 가 q 의 infinitesimal translation 을 generate 한다.

$\sigma_A \sigma_B \geqslant \left| \frac{1}{2i} \langle [A, B] \rangle \right|$ 에 대입해보면 다음과 같은 inequality 가 나온다.

$$\sigma_X \sigma_P \geqslant \frac{\hbar}{2} \quad (2.36)$$

우리는 식(2.36)을, 입자의 위치와 운동량은 동시에 정확하게 측정할 수 없다고 해석한다.

다시 본론으로 돌아오자. 앞서 다룬 postulate 3.에 따르면, $\langle x|\psi \rangle = \psi(x)$ 는 position space에서의 wave function이며, Position operator X 의 eigenvalue는 continuous 하므로 이의 절대값을 취하여 제곱을 하면 “ $|\psi\rangle$ 상태에 있는 입자의 위치를 측정하여 x 근처의 값이 나올 확률을 알려주는 확률밀도함수”이다. $\langle x|T(\delta x)|\psi \rangle$ 를 계산하면 입자의 위치가 측정하기 전에 정확히 어디있는지 몰라도 일단 δx 만큼 이동하므로 확률밀도 함수도 그에 따라 평행이동해서 $\psi(x - \delta x)$ 가 된다. 이를 식으로 계산해보자.

$$\langle x|\psi \rangle = \psi(x)$$

$$\begin{aligned} \langle x|T(\delta x)|\psi \rangle &= \langle x|I - \frac{iP\delta x}{\hbar}|\psi \rangle = \langle x|\psi \rangle - \frac{i\delta x}{\hbar} \langle x|P|\psi \rangle \\ &= \psi(x - \delta x) = \psi(x) - \delta x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\therefore \langle x|P|\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \quad (2.38)$$

식(2.38)을 통해, momentum operator 가 position space에서는 미분 연산자로 나타내어짐을 알 수 있다. 위의 notation 을 전부다 일일이 지키는 것이 힘들 수 있다. 하지만, 여러분들이 p 와 $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ 는 완전 똑같다고 두는 짓을 하지 않았으면 바란다.

이번엔, position operator X 가 p -space에서 어떻게 나타내어지는지 살펴보자. 앞서 conjugate momentum p 는 $u(q, p, t) \rightarrow u(q - \delta q, p, t)$ 로의 infinitesimal translation 을 일으키는데, 역으로 $-q \in u(q, p, t) \rightarrow u(q, p - \delta p, t)$ 로의 translation 을 generate 한다.¹³ 이 idea 를 이용하여 식 (2.34) 처럼 다음과 같은 Translation Operator $T(\delta p)$ 를 정의해보자.

$$\begin{aligned} T(\delta p) &= I + \frac{iX\delta p}{\hbar} \\ T(\delta p)|p\rangle &= |p + \delta p\rangle \\ \langle p|T(\delta p)|\psi \rangle &= \psi(p - \delta p) \end{aligned} \quad (2.39)$$

첫번째 줄을 세번째 줄에 넣은 뒤, δp 에 대해 1st order 까지만 Taylor expansion 하여 정리하면 다음이 나온다.

$$\langle p|X|\psi \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \psi(p) \quad (2.40)$$

마찬가지로, position operator 가 momentum space에서 미분 연산자로 나타내어진다. 여기서도, 독자들이 x 가 $i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ 와 완전 똑같다고 두는 짓을 하지 않았으면 좋겠다.

지금까지 우리는 position 과 momentum 의 translation 을 finite 이 아닌 infinitesimal case 를, 3-dimension 이 아닌 1-dimension 에서 살펴봤다. 이 subsection에서 다른 것을 일변화 한 것은 다음 페이지의 표에 정리해두었다.

¹³ 이 것도 바로 앞 페이지의 footnote 의 식을 살펴보라. Translation 이 일어나는 coordinate 가 p 일 때, 즉 $\epsilon = p$ 일 때,

$$\frac{\partial G}{\partial p} = \frac{\partial q}{\partial p} = 0, \quad -\frac{\partial G}{\partial q} = \frac{\partial p}{\partial p} = 1$$

에서 trivial case 로 $G = -q$ 임을 확인할 수 있다.

Table 2.1: For infinitesimal position translation

	Direction	Position		
		Generator	Translation operator	Represented as
1D	x	P_x	$I - \frac{iP_x\delta x}{\hbar}$	$\langle x P_x \psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$
	y	P_y	$I - \frac{iP_y\delta y}{\hbar}$	$\langle y P_y \psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \psi(y)$
	z	P_z	$I - \frac{iP_z\delta z}{\hbar}$	$\langle z P_z \psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \psi(z)$
3D	-	\mathbf{P}	$I - \frac{i\mathbf{P}\cdot\delta\mathbf{x}}{\hbar}$	$\langle \mathbf{x} \mathbf{P} \psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x})$

Table 2.2: For infinitesimal momentum translation

	Direction	Momentum		
		Generator	Translation operator	Represented as
1D	x	X	$I + \frac{iX\delta p_x}{\hbar}$	$\langle p_x X \psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} \psi(p_x)$
	y	Y	$I + \frac{iY\delta p_y}{\hbar}$	$\langle p_y Y \psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_y} \psi(p_y)$
	z	Z	$I + \frac{iZ\delta p_z}{\hbar}$	$\langle p_z Z \psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_z} \psi(p_z)$
3D	-	\mathbf{X}	$I + \frac{i\mathbf{X}\cdot\delta\mathbf{p}}{\hbar}$	$\langle \mathbf{p} \mathbf{X} \psi\rangle = i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} \psi(\mathbf{p})$

Table 2.3: For finite translation

	Direction	Position		Momentum	
		Generator	Translation operator	Generator	Translation operator
1D	x	P_x	$\exp\left(-\frac{iP_x\Delta x}{\hbar}\right)$	X	$\exp\left(\frac{iX\Delta p_x}{\hbar}\right)$
	y	P_y	$\exp\left(-\frac{iP_y\Delta y}{\hbar}\right)$	Y	$\exp\left(\frac{iY\Delta p_y}{\hbar}\right)$
	z	P_z	$\exp\left(-\frac{iP_z\Delta z}{\hbar}\right)$	Z	$\exp\left(\frac{iZ\Delta p_z}{\hbar}\right)$
3D	-	\mathbf{P}	$\exp\left(-\frac{i\mathbf{P}\cdot\Delta\mathbf{x}}{\hbar}\right)$	\mathbf{X}	$\exp\left(\frac{i\mathbf{X}\cdot\Delta\mathbf{p}}{\hbar}\right)$

위 표들을 통해 1차원 각 space에서 1차원 편미분 기호로 나타내었던 operator 들이 3차원에서는 del operator로 나타내어짐을 볼 수 있다. 또한, $a = 1, 2, 3$, $b = 1, 2, 3$ 에 대해서

$$[X_a, X_b] = 0$$

$$[X_a, P_b] = i\hbar \delta_{a,b}$$

$$[P_a, P_b] = 0$$

이다. 첫번째, 세번째 줄에서 position operator의 서로 다른 성분은 서로 commute하고 momentum operator도 그러므로 3D translation operator들을 다음과 같이 적을 수 있다.

$$\exp\left(-\frac{i\mathbf{P}\cdot\Delta\mathbf{x}}{\hbar}\right) = \exp\left(-i\frac{P_x\Delta x + P_y\Delta y + P_z\Delta z}{\hbar}\right) = \exp\left(-\frac{iP_x\Delta x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{iP_y\Delta y}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{iP_z\Delta z}{\hbar}\right)$$

$$\exp\left(\frac{i\mathbf{X}\cdot\Delta\mathbf{p}}{\hbar}\right) = \exp\left(i\frac{X\Delta p_x + Y\Delta p_y + Z\Delta p_z}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{iX\Delta p_x}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{iY\Delta p_y}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{iZ\Delta p_z}{\hbar}\right)$$

2.2.2 Wave Functions in x and p Space

2.1 단원 postulate 3.에서 다른 내용을 다시 꺼내보자. Position Operator X 의 eigenvalue는 continuous spectrum을 보이므로 discrete case와는 다르게 확률 밀도함수의 개념이 등장한다. $\langle x|\psi \rangle = \psi(x)$ 는 position space에서의 wave function이고, 절댓값을 취해서 제곱시 “ $|\psi\rangle$ 상태의 입자의 위치를 측정하여 x 근처의 값이 나올 확률을 알려주는 확률밀도함수이다. 또, postulate 3.에서 언급한 normality $\langle \psi|\psi \rangle = 1$ 과 Identity Operator $\int |x\rangle\langle x| = I$ 을 함께 생각하면

$$1 = \langle \psi|\psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi|x\rangle\langle x|\psi \rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx$$

에서 $\psi(x)$ 는 $x \simeq \pm\infty$ 에서 0으로 수렴해야 함을 알 수 있다. x-space에서 One dimensional Simple Harmonic Oscillator problem을 예시로 아주 간단히 풀어보겠다. 이 경우, Hamiltonian Operator는 $H(X, P) = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}X^2$ 이다. Simple Harmonic Oscillator에서는 다음의 lower and raising ladder operator가 등장한다.

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(iP + m\omega X) \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-iP + m\omega X) \quad (2.41)$$

o Ladder Operator들을 이용해서 다음과 같이 hamiltonian operator H 을 나타낼 수 있다. 또한, 이 operator들의 commutation relation도 적으면 다음과 같다.

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2\hbar m\omega}[iP + m\omega X, -iP + m\omega X] = \frac{m\omega}{2\hbar m\omega}(i[P, X] - i[X, P]) = 1 \quad (2.42)$$

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(aa^\dagger - \frac{1}{2}\right) \quad (2.43)$$

$$[H, a] = -\hbar\omega a \quad [H, a^\dagger] = +\hbar\omega a^\dagger \quad (2.44)$$

식 (2.33)을 이용하여 위 식의 commutation relations를 해석해 보자. $[X, T]|x\rangle = \delta x T|x\rangle = \delta x|x + \delta x\rangle$ 의 commutation relation에서 T 는 X 의 eigenvalue를 δx 만큼 키워주는 역할을 하였다. 이걸 (2.44)의 commutator에 가져가서 해석해 보자. a 는 H 의 eigen value를 $\hbar\omega$ 만큼 내려주는 역할을 하는 걸로 볼 수 있다. 역으로, a^\dagger 는 hamiltonian의 eigenvalue를 그 만큼 올려주는 역할을 한다. H 의 eigenvalue와 eigenstate를 각각 $E, |E\rangle$ 이라고 하면,

$$\begin{aligned} H|n\rangle &= E|n\rangle \\ H(a|E\rangle) &= (E - \hbar\omega)(a|E\rangle) \\ H(a^\dagger|E\rangle) &= (E + \hbar\omega)(a^\dagger|E\rangle) \end{aligned} \quad (2.45)$$

Griffiths 2e.의 90 페이지 Problem 2.2 번을 풀면, $\psi(x)$ 가 normalize 되기 위해선 입자가 가질 수 있는 에너지, 즉 Hamiltonian의 eigenvalue가 항상 $V(x)$ 의 최솟값보다 커야한다는 결론이 나온다. 이 경우 $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ 이므로 $E > 0$ 이여야 한다. Ladder operator로 이야기하자면, $|E\rangle$ 에 lowering operator a 를 무한정 가할 수 없으며, energy가 minimum인 level이 존재한다는 사실이 나온다. 이 Minimum energy를 E_0 라고, 이에 해당하는 eigenstate를 $|E_0\rangle$, ground state라고 하자. 만약 $|E_0\rangle$ 에 a 를 가하면 어떻게 될까? $a|E_0\rangle = |\psi_-\rangle$ 라고 하자. 앞서 말한 바와 같이 이는 ground state에서보다 에너지가 $\hbar\omega$ 만큼 더 낮은 상태로, 실제로 존재할 수 없는 상태이므로 어떠한 물리량을 측정할 수 없다. Postulate 3.의 영문장과 연관시켜보자. 어떠한 observable q 에 대해서 $\langle q|\psi_-\rangle = 0$ 이 되므로 (어떠한 물리량도 이 상태에서는 측정할 수 없으니까) $|\psi_-\rangle = 0$ 이다. 즉, $a|E_0\rangle = 0$ 이다. 이 식의 양변에 $\langle x|$ 를 곱해보자.

(여기서 $\langle x|E_0\rangle = \psi_0(x)$ 라고 표시하고 있음.)

$$\begin{aligned}\langle x|a|E_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \langle x|iP + m\omega X|E_0\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m\omega}{\hbar}x \right) \psi_0(x) = 0\end{aligned}\quad (2.46)$$

Orthonormality condition $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|dx = 1$ 을 이용해서 식(2.46)의 미분 방정식을 풀면 다음과 같은 해가 나온다.

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 \right) \quad (2.47)$$

이 wave function 이 앞서 말했던 조건, $\psi_0(x = \pm\infty) = 0$ 을 만족함을 확인할 수 있다. 또, $a|E_0\rangle = 0$, $H = \hbar(a^\dagger a + \frac{1}{2})$ 를 이용하면 입자가 가질 수 있는 minimum 의 energy 도 알 수 있다.

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

식(2.45)의 ladder operator 을 이용하면 입자의 에너지는 E_0 에서 Energy quanta $\hbar\omega$ 의 정수배 만큼 큰 값을 가짐을 알 수 있다. Eigenvalue problem 을 다시 쓰면,

$$H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) |E_n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |E_n\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.48)$$

이제, energy eigenstate 를 $|E_n\rangle$ 라고 쓰기 귀찮으니 $|n\rangle$ 라고 쓰겠다. 식(2.48)의 모든 변을 $\hbar\omega$ 로 나누고 $\frac{1}{2}$ 를 빼고 $a^\dagger a = N$ 이라고 하면 다음과 같은 새로운 eigenvalue problem 이 나온다.

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.49)$$

이 새로운 녀석 N 은 number operator 하고 부르며 simple harmonic oscillator에서 energy quanta 를 count 해주는 역할을 한다. 또한, Hamiltonian operator 와 같은 eigenstate $|n\rangle$ 를 가지며 각 state에 대한 eigenvalue 는 n 이다. N 도 ladder operators 와 다음의 관계를 가지며

$$N = a^\dagger a = aa^\dagger - 1, \quad [N, a] = -a \quad [N, a^\dagger] = +a^\dagger$$

a, a^\dagger 에 의해서 eigenvalue 가 ∓ 1 만큼 변한다.

a, a^\dagger 에 의해서 Hamiltonian 의 eigenvalue 가 $\mp \hbar\omega$ 만큼 변하므로 $a|n\rangle = c_-|n-1\rangle$, $a^\dagger|n\rangle = c_+|n+1\rangle$ 이라고 들수 있다. 여기서 두식의 우변에 계수 c_\mp 가 붙은 이유는 무엇일까? Ladder operator 에 의해서 eigen value 는 변했지만 그렇다고 새롭게 만들어진 ket vector 가 normalize 되어 있다는 보장이 없으므로 normalizing constant 가 곱해져 있어야 한다. 이 constant 가 어떻게 나오는지 계산을 해보자.¹⁴

$$\begin{aligned}|c_-|^2 \langle n-1|n-1\rangle &= \langle a|n|a|n\rangle = \langle n|a^\dagger a|n\rangle \\ &= \langle n|N|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}|c_+|^2 \langle n+1|n+1\rangle &= \langle a^\dagger|n|a^\dagger|n\rangle = \langle n|aa^\dagger|n\rangle \\ &= \langle n|N+1|n\rangle = (n+1)\langle n|n\rangle = n+1\end{aligned}$$

$$\therefore a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (2.50)$$

¹⁴이 문맥에서는 $|n\rangle$ 이 normalize 되어 있다는 가정을 깔고 있음.

위의 정보들을 이용해서 $|n\rangle$ 을 ladder operator 와 ground state $|0\rangle$ 을 이용해서 나타낼 수 있다.

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \quad (2.51)$$

식 (2.51)의 양변에 $\langle x|$ 를 붙이면 n -th state 의 position space wave function 을 알 수 있다.

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \langle x|n\rangle = \langle x|\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(-\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m\omega}{\hbar}x \right) \right]^n \psi_0(x) \end{aligned} \quad (2.52)$$

지금까지 1-dimensional simple harmonic oscillator 을 다뤄봤다. 이 경우 말고 다른 많은 문제들도 위와 같이 미분방정식을 푸는 과정을 통해 wave function 과 Energy eigenvalue 를 찾는다. 많은 경우에 물체의 운동방정식이 $\frac{d}{dt}\mathbf{p} = -\nabla V(\mathbf{x})$ 로 나타내어지고, 이에 해당하는 Lagrangian $L = T - V$ 을¹⁵ legendre transform 하면 Hamiltonian 이 $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$ 로 나온다.¹⁶ 양자역학에서는 고전역학의 Hamiltonian 에서 \mathbf{x} 와 \mathbf{p} 를 operator 로 바꿔서 쓴다. 이어서, Hamiltonian 의 eigenvalue problem 을 쓰면

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.53)$$

로 Time independant Schrödinger equation 이 나온다. 양변에 $\langle \mathbf{x}|$ 를 붙여서

$$\langle \mathbf{x}|H|\psi\rangle = \langle \mathbf{x}| \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) |\psi\rangle = E \langle \mathbf{x}|\psi\rangle \quad (2.54)$$

위식의 () 안에 들어간 term 은 Hermitian 하고, 일반적으로 $\langle \mathbf{x}|\mathbf{P}^2|\psi\rangle = -\hbar^2\nabla^2\psi(\mathbf{x})$, $\langle \mathbf{x}|f(\mathbf{x})|\psi\rangle = f(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$ 이므로 식(2.54)은

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}|H|\psi\rangle &= \langle \mathbf{x}| \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) |\psi\rangle \\ &= \boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x})} \end{aligned} \quad (2.55)$$

으로 우리가 많이 봤던 바로 그 미분방정식이 나오게 된다. 양자역학에서 위 방정식을 infinite square well, delta potential, free particle, infinite spherical well, hydrogen atom 등등 여러 종류의 $V(\mathbf{x})$ 에 대해서 다뤘을 것이다. 필자는 이 section 에서 여러분들이 위 방정식은 “momentum operator 가 position 의 infinitesimal translation 을 generate 한다는 점”에서 기인하였다는 사실을 알고 가셨으면 재차 강조한다.

이번엔 momentum operator 의 eigenstate 가 position space 에서 어떻게 나타나는지를 1차원에 살펴보자. 또다시, momentum operator 의 eigenvalue problem 에서 출발하자.

$$P|p\rangle = p|p\rangle \quad (2.56)$$

¹⁵왜 $\frac{d}{dt}(m\dot{x}) = -\frac{\partial}{\partial x}V(x)$ 에 해당하는 Lagrangian 이 $\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x)$ 인가에 대해서 필자는 다음과 같이 생각함. Least action principle $\delta \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}, t) dt = 0$ 을 풀어서 나온 Lagrangian 운동방정식이 $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L}{\partial x}$ 인데, 애와 $\frac{d}{dt}(m\dot{x}) = -\frac{\partial}{\partial x}V(x)$ 를 좌변과 우변 비교해보자. 웬지 $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\ddot{x}$ 이고 $\frac{\partial L}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x}V(x)$ 인거 같지 않은가? 이 두 식을 이용해서 각각을 \dot{x} , x 에 대해서 적분하니까 $L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x)$ 이 나온 것이다. 그리고 정의상 x 의 conjugate momentum p_x 는 $p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ 이므로 이 경우엔 $p_x = m\dot{x}$ 가 나온 것이다.

¹⁶대부분의 경우 $L = T - V$ 이고 이에 해당하는 Hamiltonian 이 $H = T + V$ 라고 했지, H 는 “원래 운동에너지와 퍼텐셜에너지의 합이다”라는 진술을 완전히 잘못된 거다. 저리고 우리는 놈들 르 o 오탐마 들고 찾아가서 똑배기 깨부숴야함.

양변에 $\langle x|$ 을 붙이자. 그리고 $\langle x|P|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$ 임을 이용하자.

$$\begin{aligned}\langle x|P|p\rangle &= \langle x|p|p\rangle = p \langle x|p\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} p(x) = p p(x)\end{aligned}\quad (2.57)$$

식(2.57)의 편미분 방정식을 풀면 상수 A 에 대해서 $p(x) = A \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$ 이 나온다. 이제 이 A 를 어떻게 구할 것인가? 앞 section에서 다뤘던 postulate 의 2번 항목 설명부분의 끝을 봐라. p 는 continuous spectrum 을 보이므로 state vector 가 $\langle p'|p\rangle = \delta(p' - p)$ 으로 normalized 되어야 한다고 나와있다. 이 braket 사이에 Identity operator 를 끼워넣어보자.

$$\begin{aligned}\delta(p' - p) &= \langle p'|I|p\rangle = \int \langle p'|x\rangle \langle x|p\rangle dx \\ &= |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{(p-p')x}{\hbar}} dx = \int \langle x|p'\rangle^* \langle x|p\rangle dx \\ &= |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{(p-p')x}{\hbar}} dx\end{aligned}\quad (2.58)$$

위 complex exponential 의 적분이 dirac delta가 되기 위해선 $|A|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$ 가 되어야 한다. 왜 상수가 이렇게 나오는지, 왜 저 적분이 dirac delta가 나오는지 궁금하면 본 책의 chapter 7. 읽어보시길 바란다. 설명이 긴 나머지 뒤로 빼 버렸다. 따라서 momentum operator 의 eigenstate 는

$$p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} \quad (2.59)$$

로 나타내어진다.

그리면 position operator 의 eigenstate 가 momentum space에서 어떻게 나타내어질까? 이번 역시 \mathbf{X} 의 eigenvalue problem에서 출발한 뒤 양변에 $\langle p|$ 를 붙이자.

$$X|x\rangle = x|x\rangle$$

$$\begin{aligned}\langle p|X|x\rangle &= \langle p|x|x\rangle = x \langle p|x\rangle \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} x(p) = x x(p)\end{aligned}\quad (2.60)$$

앞서 본 case 와 같은 계산과정으로 normalize 까지 해주면

$$x(p) = \langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \quad (2.61)$$

이다. $p(x)$ 와 $x(p)$ 이 두 놈은 도데체가 뭐하는데 쓰이는 놈일까? 바로 wave function 을 position \leftrightarrow momentum space 로 바꾸는데 사용된다. 먼저, $\psi(p)$ 을 구하는 과정부터 시작해보자. 여기서도 역시 Identity operator 를 사용하겠다.

$$\langle p|\psi\rangle = \langle p|I|\psi\rangle = \int \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx$$

우변에서 $\langle p|x\rangle = \langle x|p\rangle^* = p(x)^*$ 이므로 적분인자를 x 에 대한 함수들의 곱으로 나타내면

$$\psi(p) = \int p(x)^* \psi(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx \quad (2.62)$$

그렇다. $\psi(x)$ 에서 $\psi(p)$ 로 바꾸는 과정은 수학적으로 Fourier Transform에 해당한다. 그러면 그 반대 과정은 어떻게 될까?

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \langle x | \psi \rangle = \langle x | I | \psi \rangle = \int \langle x | p \rangle \langle p | \psi \rangle dp \\ &= \int x(p)^* \psi(p) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp\end{aligned}\quad (2.63)$$

그렇다. 그 역으로 바꾸는 과정은 수학적으로 Inverse Fourier Transform에 해당한다. 하지만, 많은 경우에 우리는 3-dimension에서 계산을 하므로 지금까지 했던 걸 일반화 시켜보자. 먼저, orthonormality에서¹⁷

$$\begin{aligned}\delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') &= \delta(p_x - p'_x)\delta(p_y - p'_y)\delta(p_z - p'_z) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int e^{\frac{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{x}}{\hbar}} d^3\mathbf{x} \\ \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z') = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int e^{\frac{i(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\cdot\mathbf{p}}{\hbar}} d^3\mathbf{p}\end{aligned}\quad (2.64)$$

이다. 위 식과 Identity operator $I = \int |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| d^3\mathbf{x} = \int |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| d^3\mathbf{p}$ 를 활용하여 각 operator들의 eigenstate를 다른 space에서 나타내보면

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}} \\ \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}}\end{aligned}\quad (2.65)$$

위 식을 이용해서 (2.62)과 (2.63)처럼 wave function을 바꿔보면, 다음과 같은 식이 나온다.

$$\psi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \int \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \psi \rangle d^3\mathbf{x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int e^{-i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}} \psi(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x}\quad (2.66)$$

$$\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle d^3\mathbf{p} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}} \psi(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p}\quad (2.67)$$

¹⁷Dirac Delta가 0이 아닌 무한데의 값이 나오려면 $\mathbf{p} = \mathbf{p}'$, 혹은 $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$ 가 나와야 한다. 즉, 두 벡터의 (prime 달린 놈과 안 달린 놈) x, y, z 세 성분이 모두 같아야 하므로 이를 delta 3개의 곱으로 나타낸것으로 이해하면 좋을 것이다.

2.3 Problems

1. Operators in quantum mechanics do not commute in general, so canonical commutator is defined as below.

$$[A, B] = AB - BA$$

If both A and B are hermitian operators, show that canonical commutator of A and B is anti-hermitian. ($Q^\dagger = -Q$)

2. Given three orthonormal ket vectors $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$, and $|e_3\rangle$, which satisfy $\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{i,j}$, ($i, j = 1, 2, 3$). Answer followings.

- (a) We have three kets given as

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}}|e_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|e_2\rangle \\ |\psi_2\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{2}}|e_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|e_2\rangle \\ |\psi_3\rangle &= |e_3\rangle \end{aligned}$$

Show that $|\psi_i\rangle$ are mutually orthonormal.

- (b) Finally, check the completeness of $\{|\psi_i\rangle\}$. (i.e, check whether $\sum_{i=1}^3 |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ is an identity operator.)
-

3. **Erhenfest Theorem** Use time-dependent schrödinger equation to show that

$$\frac{d}{dt} \langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, Q] \rangle$$

where Q is a hermitian operator without implicit time dependency.

4. **Larmor precession** Let's recall 4th item of postulates, which explains the time evolution of state vector. When uniform magnetic field \mathbf{B} is applied in z -direction on a single electron(spin 1/2), the Hamiltonian in matrix form is

$$H = \frac{e}{m} \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = \frac{e}{m} B S_z = \frac{eB\hbar}{2m} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Using time evolution operator in (2.25), show that expectation value of $\mathbf{S} = \langle S_x, S_y, S_z \rangle$ rotates around z -axis. And find the period of rotation (or precession). You may also use the matrix representation of S_x , S_y , and time evolution operator. Also, assume that initial state of an electron is $|\chi(0)\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, where $a = \cos(\theta/2)$ and $b = \sin(\theta/2)$.

5. Hamiltonian operator for 1-dimensional simple harmonic oscillator is given as;

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}X^2 \quad (2.68)$$

The ground state for the oscillator which satisfies $H|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|\psi_0\rangle$ can be expressed by below when view from position space;

$$\begin{aligned} \langle x|\psi_0\rangle &= \psi_0(x) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \end{aligned} \quad (2.69)$$

Answer the following questions,

- (a) Position operator can be expressed in momentum space: $\hat{X} = i\hbar(\partial/\partial p)$. By using this information, solve the Schrödinger's Equation in momentum space and derive the ground state.
Answer:

$$\psi_0(p) = \left(\frac{1}{\pi m\hbar\omega}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{1}{2m\hbar\omega}p^2\right)$$

- (b) Recall the transformation of wavefunction referred at equation (2.62), which was mathematically a Fourier Transform. Transform the wavefunction at (2.69) into the wavefunction in position space and compare with the answer obtained in previous question.
-

6. When a particle of mass m is subject to potential energy

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2x^2 & (x > 0) \\ \infty & (x < 0) \end{cases}$$

Find possible energy levels that it can have, and compare it with energy levels for original harmonic oscillator.

Part II

MAIN

CHAPTER 3

Angular Momentum

양자역학에 있어서 아아아주 중요한 개념들중 하나인 Angular momentum 를 다뤄보겠다. 먼저 angular momentum이 rotation generator 라는 이야기와 commutation relation 에서 시작하여 eigenvalue 가 어떻게 나오는지, angular momentum 을 어떻게 나눠서 생각해야 하는지, 그리고 두 angular momentum 을 어떻게 더해야 하는지에 대해서 이야기를 할 것이다. 여기도 열심히 입을 털었으나 아무쪼록 잘 읽어주십사 한다.

3.1 Angular Momentum as Rotation Generator and Commutation Relations

Postulate 의 4. 항목이랑 앞 section 에서 이야기 한 것을 다시 생각해보자. 고전역학에서 Hamiltonian $H = H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ 는 infinitesimal time evolution 을, momentum \mathbf{p} 는 position 의 infinitesimal translation 을 generate 한다. 마찬가지로 Angular momentum 은 infinitesimal rotation generate 한다!!¹ 아참, 정확히는 단위벡터 \hat{n} 에 대해서, angular momentum의 \hat{n} 방향 성분 $\mathbf{L} \cdot \hat{n}$ 이 원점을 지나는 \hat{n} 방향의 축에 대한 infinitesimal rotation 을 generate 한다. 이 부분은 그림3.1과 함께 보면서 읽으면 좋을거다.

$$R_n(\delta\phi) = I - \frac{i\mathbf{L} \cdot \hat{n}}{\hbar} \delta\phi \quad (3.1)$$

\hat{n} 방향의 축을 중심으로 $\delta\phi$ 만큼 infinitesimal 하게 회전시키는 Rotation operator 는 식(3.1)처럼 쓴다. Operator 가 왜 저렇게 생겼냐고? Section 2.1 의 Postulate 4. 번에 있는 1, 2, 3 의 설명을 읽고 오시라. section 2.2 도 읽고 오면 좋을거다. 앞에서도 타이핑한거 여기다가 또 다시 타이핑하기 귀찮다 이 말 이야. Angular momentum operator \mathbf{L} 은 어떻게 나타내어질까? 먼저, 해당 rotation 에 의해 position \mathbf{x} 가 어디로 옮겨지는지를 살펴보자. \mathbf{x} 가 회전에 의해서 옮겨진 position 을 $\mathbf{x}_{\text{after}}$ 라고 하자. 저 **빨간색 벡터**는 “ \mathbf{x} 벡터와 **파란색 선분**과 **파란색 벡터**가 이루는 평면”에 수직이다. 그렇다면 **음마**의 길이를 알 아보자. **빨간색 벡터**, **파란색 선분**, **초록색 선분**으로 이루어진 도형을 이등변 삼각형, 부채꼴로 본다면 **빨간색 벡터**의 길이는 (**파란색 선분**의 길이) $\times \delta\phi$ 라고 볼 수 있다. 그러면 이제 **파란색 선분**의 길이가 관건이다. 그림을 자세히 보면 \mathbf{x} 벡터, \hat{n} 방향의 축, 그리고 **파란색 선분**은 직각삼각형을 이룬다. 이 직각삼각형에서 **파란색 선분**이 마주보는 각의 크기를 θ 라고 한다면, **파란색 선분**의 길이는 $|\mathbf{x}| \sin \theta$ 이다.

지금까지 말한 정보를 요약해보자. 우리가 찾는 **빨간색 벡터**는 방향이 \mathbf{x} 과 \hat{n} 에 둘다 수직이고, 길이는 $|\mathbf{x}| \cdot \sin \theta \cdot \delta\phi$ 이다. 방향이 둘다에 수직이라는 점과 길이에 $\sin \theta$ 가 들어간다는 점을 고려하면 **빨간색 벡터**를 $(\hat{n} \times \mathbf{x})\delta\phi$ 라고 할 수 있다.

¹이거 역시 설명이 너무 길어서 생략했다. 관심이 있는 독자들이 어디를 읽으면 되는지 또 guideline 을 드리겠다. 본 책의 chapter 2의 footnote 9, 10번에도 guideline 을 적었으니 이거부터 먼저 읽으시라. 그 다음 Goldstein 3e 페이지 404의 4번째 줄부터 쭈욱 읽으면 페이지 405 중간즈음에 이런 문장이 있는데 까지만 보시면 된다; “Just as the Hamiltonian is the generator of a displacement in time, so the angular momentum is the generator of the spatial rotation of the system.”

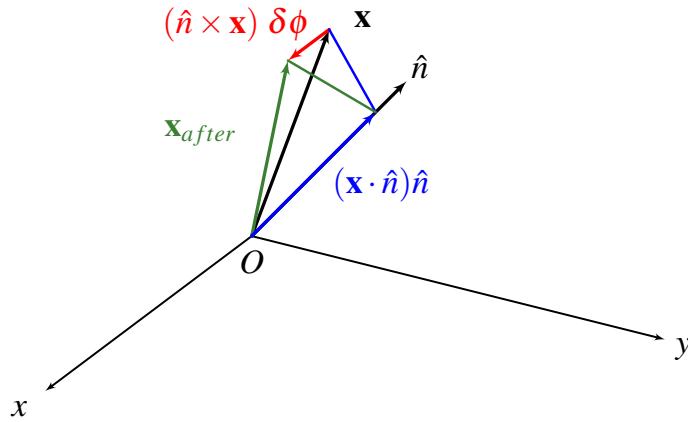


Figure 3.1: Illustration for infinitesimal rotation as to axis pointing the direction of the unit vector \hat{n} .

이 operator에 의하여 wave function은 $\psi(\mathbf{x}) \rightarrow \psi\left(\mathbf{x} - (\hat{n} \times \mathbf{x})\delta\phi\right)$ 로 평행이동한다. Braket notation을 이용해서 식을 정리해보자.

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{x} | R_n(\delta\phi) | \psi \rangle &= \psi\left(\mathbf{x} - (\hat{n} \times \mathbf{x})\delta\phi\right) \\
 &= \psi(\mathbf{x}) - \sum_{abc} \left[(n_a x_b \epsilon_{bca}) \frac{\partial}{\partial x_c} \right] \psi(\mathbf{x}) \delta\phi \\
 &= \psi(\mathbf{x}) - \sum_a n_a (\mathbf{x} \times \nabla)_a \delta\phi \psi(\mathbf{x}) \\
 &= \psi(\mathbf{x}) - \frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{x} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \cdot \hat{n} \delta\phi \psi(\mathbf{x}) \\
 &= \langle \mathbf{x} | I - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{X} \times \mathbf{P}) \cdot \hat{n} \delta\phi | \psi \rangle = \langle \mathbf{x} | \left(I - \frac{i\mathbf{L} \cdot \hat{n}}{\hbar} \delta\phi \right) | \psi \rangle
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Angular momentum operator는 이 맥락에 따르면 position operator \mathbf{X} 와 momentum operator \mathbf{P} 의 cross product임을 알 수 있다. 아차, 위의 infinitesimal rotation 을 (2.25)에서 사용한 논리를 이용해서 finite rotation operator를 구성하면 다음과 같다.²

$$R_n(\phi) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{L} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar}\right) \tag{3.3}$$

방금 앞에서 angular momentum의 \hat{n} 방향 성분이 \hat{n} 방향의 축에 대한 infinitesimal rotation을 generate한다고 하였다. 이를 특정방향으로 집어서 말하자면 L_x, L_y, L_z 는 각각 x, y, z 축을 중심으로 한 rotation을 generate 한다. 각 축들을 중심으로 $\delta\phi$ 만큼 회전시키는 infinitesimal rotation operator를 적으면 다음과 같다.

$$R_x(\delta\phi) = I - \frac{iL_x\delta\phi}{\hbar} \quad R_y(\delta\phi) = I - \frac{iL_y\delta\phi}{\hbar} \quad R_z(\delta\phi) = I - \frac{iL_z\delta\phi}{\hbar} \tag{3.4}$$

다음으로, 선형대수학의 지식도 조금 꺼내보자. 각 축들을 중심으로 회전했을 때 좌표가 변하는 것은 회전변환행렬을 이용하여 계산하고, 이 행렬들의 성분은 1, 0, cos, sin으로 되어있다. 앞서 도입한

² $N \rightarrow \infty$ 일 때 ϕ/N 가 $\delta\phi$ 처럼 infinitesimal하다고 가정하자. ϕ 만큼의 finite rotation 을 ϕ/N 만큼의 infinitesimal rotation 을 N 번 반복한 것으로 보자.

$$R_{\hat{n}}(\phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(R_{\hat{n}}\left(\frac{\phi}{N}\right) \right)^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[I - \frac{i\mathbf{L} \cdot \hat{n}}{\hbar} \frac{\phi}{N} \right] = \exp\left(\frac{-i\mathbf{L} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar}\right)$$

infinitesimal rotation operator 들 한테 각축들을 중심으로 $\delta\phi$ 만큼 회전하는 변환에 해당하는 행렬들을 대응시키자. 아, 여기서 행렬들의 모든 성분들은 $\delta\phi$ 에 대해서 2nd order 까지만 정리한다.

$$\begin{aligned} R_x(\delta\phi) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & -\delta\phi \\ 0 & \delta\phi & 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} \end{pmatrix} & R_y(\delta\phi) &= \begin{pmatrix} 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & 0 & \delta\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\delta\phi & 0 & 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} \end{pmatrix} \\ R_z(\delta\phi) &= \begin{pmatrix} 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & -\delta\phi & 0 \\ \delta\phi & 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.5)$$

우리는 알고 있다. 이 회전변환 행렬들이 서로 commute 하지 않는다는 사실을 예를 들어서 어떤 점의 좌표를 “ x 축을 중심으로 $\delta\phi$ 만큼 회전하고 나서 y 축을 중심으로 $\delta\phi$ 만큼 회전해서 나온 새 좌표”와 “ y 축을 중심으로 $\delta\phi$ 만큼 회전하고 나서 x 축을 중심으로 $\delta\phi$ 만큼 회전해서 나온 새 좌표”는 서로 다르다. 식(3.5)에서 나온 행렬들을 이용해서 계산해보자.

$$\begin{aligned} R_x(\delta\phi)R_y(\delta\phi) &= \begin{pmatrix} 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & 0 & \delta\phi \\ \delta\phi^2 & 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & -\delta\phi \\ -\delta\phi & \delta\phi & 1 - \delta\phi^2 \end{pmatrix} \\ R_y(\delta\phi)R_x(\delta\phi) &= \begin{pmatrix} 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & \delta\phi^2 & \delta\phi \\ 0 & 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & -\delta\phi \\ -\delta\phi & \delta\phi & 1 - \delta\phi^2 \end{pmatrix} \\ R_x(\delta\phi)R_y(\delta\phi) - R_y(\delta\phi)R_x(\delta\phi) &= \begin{pmatrix} 0 & -\delta\phi^2 & 0 \\ \delta\phi^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= R_z(\delta\phi^2) - 1 \end{aligned}$$

$$\therefore [R_x(\delta\phi), R_y(\delta\phi)] = R_z(\delta\phi^2) - 1 \quad (3.6)$$

위 식에 (3.4) 을 대입해서 정리해보자.

$$\begin{aligned} \left[I - \frac{iL_x\delta\phi}{\hbar}, I - \frac{iL_y\delta\phi}{\hbar} \right] &= \left[-\frac{iL_x\delta\phi}{\hbar}, -\frac{iL_y\delta\phi}{\hbar} \right] \\ &= -\frac{\delta\phi^2}{\hbar^2} [L_x, L_y] \\ &= \left(I - \frac{iL_z\delta\phi^2}{\hbar} \right) - I \\ &= -\frac{iL_z\delta\phi^2}{\hbar} \end{aligned} \quad (3.7)$$

위 식을 정리하면 다음과 같은 commutation relation 이 튀어나온다.

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (3.8)$$

이게 바로 그 fundamental commutation relations of angular momentum 이다. 만약 Griffiths 양자 역학 교재만으로 angular momentum 을 공부하셨다면, 여러분은 저 식이 단순히 $\mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}$ 외적에서 기인했다고 알고 있을 것이다. 물론, $\mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P} = \sum_{abc} X_a P_b \hat{\epsilon}_c \epsilon_{abc}$ 를 (3.8) 의 commutator 에 넣어도 똑같은 결과를 얻을 수는 있다. 하지만, 이 식은 아까 했듯이 angular momentum ⚡ rotation generator

라는 사실과 다른 축을 중심으로 한 회전은 commute 하지 않는다는 사실에서 기인하였다는 것을 꼭 알고 계셨으면 한다. \mathbf{L} 이 아니더라도 $[Q_x, Q_y] = i\hbar Q_z$ 같은 relation 를 만족하면 \mathbf{Q} 도 angular momentum operator 라고 한다.

사실, (3.8) 에서 x, y, z 가 말하는 방향이 딱 정해져 있는 것은 아니다.³ 어느 방향이든 간에 angular momentum 의 서로 수직인 세 성분이 저런 꼴의 commutation relation 을 만족한다고 이해하면 된다. (3.8) 을 Levi-Civita permutation 을 이용해서 다음과 같이 나타낼 수도 있고,

$$[L_a, L_b] = i\hbar \sum_c L_c \epsilon_{abc} \quad (3.9)$$

다음과 같이 벡터의 외적으로 나타낼 수도 있다.

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L} \quad (3.10)$$

이번엔 (3.9) 을 이용해서 angular momentum 의 크기의 제곱과 세 성분의 commutation relation 을 계산해보자.

$$\begin{aligned} [\mathbf{L}^2, \mathbf{L}] &= \left[\sum_a L_a^2, \sum_b L_b \hat{e}_b \right] = \sum_{ab} [L_a L_a, L_b] \hat{e}_b \\ &= \sum_{ab} L_a [L_a, L_b] \hat{e}_b + \sum_{ab} [L_a, L_b] L_a \hat{e}_b \\ &= i\hbar \sum_{abc} L_a L_c \epsilon_{abc} [L_a, L_b] \hat{e}_b + i\hbar \sum_{abc} L_c L_a \epsilon_{abc} [L_a, L_b] \hat{e}_b \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\therefore [\mathbf{L}^2, L_x] = [\mathbf{L}^2, L_y] = [\mathbf{L}^2, L_z] = 0 \quad (3.11)$$

위의 결과들로부터 physical interpretation 을 할 수 있다. 먼저, (3.8) 은, 서로 다른 축에 대해서 회전 하는 순서를 바꾸면 결과가 다르다는 점을 함축하고 있다. 또한, Heisenberg's Uncertainty Principle $\sigma_A \sigma_B \geq \frac{1}{2i} | \langle [A, B] \rangle |$ 에 대입하면 angular momentum 의 수직인 다른 두 성분은 동시에 정확히 측정할 수 없다는 것도 알 수 있다. 그러나, (3.11) 로부터 angular momentum 의 크기와 한 성분은 동시에 정확히 측정할 수 있음을 알 수 있다. 다음 section 에서 나오지만 ket vector 하나에 angular momentum 의 크기와 z 성분의 정보를 둘다 표시해서 \mathbf{L}^2 과 L_z 의 simultaneous eigenstate, eigenket 으로 쓴다.

3.2 Eigenvalues and Eigenstates

$L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ 라는 새로운 operator 를 정의하자. 식(3.9) 을 이용해서 L_z 와의 commutation relation 을 계산하면 다음과 같다.

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm} \quad (3.12)$$

(2.33) 와 (2.44) 의 commutation relation 으로 위 식을 해석해보자. Simple harmonic oscillator 에서 $[H, a] = -\hbar\omega a$, $[H, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger$ 를 만족시키는 a^\dagger , a 는 H 의 eigenvalue 를 $\hbar\omega$ 만큼 올리거나 내림을 확인하였다. 같은 논리로 (3.12)의 L_{\pm} 은 L_z 의 eigenvalue 를 $\pm \hbar$ 만큼 변화시키는 ladder operator 으로 보면 된다.

그러면 \mathbf{L}^2 와 L_{\pm} 의 commutation relation 은 어떨까? L_{\pm} 은 L_x 와 L_y 의 선형결합으로 이루어져 있고, L_x, L_y 는 \mathbf{L}^2 와 commute 하므로 $[\mathbf{L}^2, L_{\pm}] = 0$ 이다. 그러니까 어떤 vector 한테 \mathbf{L}^2 와 L_{\pm} 를 순서를 바꿔서 가해도 결과는 같다는 이 말이다.

L_{\pm} 가 \mathbf{L}^2 와 commute 한다는 사실은 이렇게 받아들여도 된다; L_{\pm} 는 L_z 의 eigenvalue 를 바꾸지만 \mathbf{L}^2 의 eigenvalue 는 건들지 않는다고. (3.11) 에서 \mathbf{L}^2 와 L_z 는 commute 하므로 이 둘의 simultaneous

³아, 식(3.8) 에서 x, y, z 를 y, z, x , 혹은 z, x, y ⌈ cyclic order 로 바꿔써도 저 식은 성립함.

eigenstate 가 존재한다. \mathbf{L}^2 와 L_z 의 eigenvalue 를 각각 a, b 라고 하면, eigenvalue problem 을 다음과 같이 적을 수 있다.

$$\mathbf{L}^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle, \quad L_z |a, b\rangle = b |a, b\rangle \quad (3.13)$$

위에서 ladder operator 가지고 이야기 한 것을 수식으로 적으면 다음과 같다.

$$L_z (L_{\pm} |a, b\rangle) = (b \pm \hbar) (L_{\pm} |a, b\rangle) \quad \mathbf{L}^2 (L_{\pm} |a, b\rangle) = a (L_{\pm} |a, b\rangle) \quad (3.14)$$

Simple harmonic oscillator 에서 Energy eigenstate $|n\rangle$ 에 lowering operator a 를 무한정 가할 수 없는 것 처럼, angular momentum 에서도 $|a, b\rangle$ 에 lowering, raising operator 를 무한정 가할 수 없다. Ladder operator 를 eigenstate 에 계속해서 가한다는 것은 L_z 의 eigenvalue 를 계속해서 \hbar 만큼 키우거나 줄이거나 한다는 소리다. 하지만, 생각해봐라. 어떠한 벡터든 간에 한 성분이 그 벡터의 크기를 초과할 수 없다. (그러니까 $a \geq b^2$ 라고.) 그러면, L_z 의 eigenvalue 에 상한선, 하한선이 있다는 뜻인데 이를 b_{max}, b_{min} 이라고 하자. 상한선, 하한선에서 높거나 낮은 상태는 존재하지 않으므로

$$L_+ |a, b_{max}\rangle = 0, \quad L_- |a, b_{min}\rangle = 0 \quad (3.15)$$

이다. $\mathbf{L}^2 = L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z$ 이므로 \mathbf{L}^2 을 $|a, b_{max}\rangle$ 과 $|a, b_{min}\rangle$ 에 가해보자.

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 |a, b_{max}\rangle &= (L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z) |a, b_{max}\rangle \\ &= (0 + b_{max}^2 + \hbar b_{max}) |a, b_{max}\rangle = a |a, b_{max}\rangle \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 |a, b_{min}\rangle &= (L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z) |a, b_{min}\rangle \\ &= (0 + b_{min}^2 - \hbar b_{min}) |a, b_{min}\rangle = a |a, b_{min}\rangle \end{aligned}$$

위 식들에 따르면 $a = b_{max}^2 + \hbar b_{max} = b_{min}^2 - \hbar b_{min}$ 이다. 식을 다시 정리하면

$$\underbrace{(b_{max} + b_{min})}_{\text{case 1}} \underbrace{(b_{max} - b_{min} + \hbar)}_{\text{case 2}} = 0$$

으로, case 1 에서 0 이 되거나 case 2 에서 0 이 되거나 둘 중 한 가지를 만족시키면 된다. case 2 의 경우, $b_{max} > b_{min}$ 이기 때문에 여기서 0 이 될 수 없다. 따라서 case 1 에서 0이 되어야 하고, $b_{min} = -b_{max}$ 이다. 따라서 $a = b_{max}^2 + \hbar b_{max}$ 이며

$$-b_{max} \leq b \leq b_{max}$$

이다. Ladder operator L_+ 에 의해서 b 의 값은 $-b_{max}$ 에서 시작하여 b_{max} 까지 \hbar 씩 변하므로 $b_{max} - b_{min} = 2b_{max}$ 는 \hbar 의 정수배가 되어야 한다. 이 맥락에서 많은 물리량들에 \hbar 이 등장하므로 다음과 같은 새로운 quantum number 들을 도입하는게 편하다.

$$l = \frac{b_{max}}{\hbar} \quad m_l = \frac{b}{\hbar} \quad (3.17)$$

위의 부등식을 이용하면 0 이상의 정수 n 에 대해서 $l = \frac{n}{2}$ 이고, $-l \leq m_l \leq l$ 이다. Angular momentum 의 eigenket 도 l 과 m_l 으로 나타내면 식(3.13)의 eigenvalue problem 이 다음과 같아지고, 이를 그림3.2 에 시각화 해서 나타냈다.

$$\mathbf{L}^2 |l m_l\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l m_l\rangle \quad L_z |l m_l\rangle = m_l \hbar |l m_l\rangle \quad (3.18)$$

식(3.14) 을 보면 L_{\pm} 에 의해서 $|l m_l\rangle$ 이 $|l m_l \pm 1\rangle$ 와 같은 상태로 되는 걸 알 수 있는데, simple harmonic oscillator 에서 number operator 와 ladder operator 를 다뤘을 때처럼 $L_{\pm} |l m_l\rangle$ 의 result 도

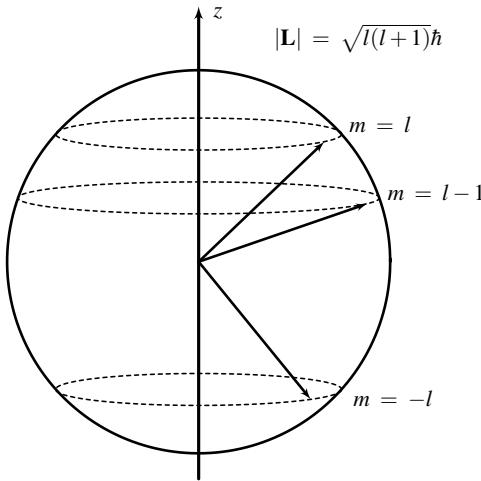


Figure 3.2: Illustration to visualize eigenvalues of L_z and \mathbf{L}^2 .

normalizing $| \rangle$ 필요하다. $L_{\pm}^\dagger = L_{\mp}$ 임을 활용하면, $L_{\pm}|l m_l\rangle = c_{\pm}|l m_l \pm 1\rangle$ 에서

$$\begin{aligned} |c_{\pm}|^2 \langle l m_l \pm 1 | l m_l \pm 1 \rangle &= \langle L_{\pm}(l m_l) | L_{\pm}(l m_l) \rangle \\ &= \langle l m_l | L_{\mp} L_{\pm} | l m_l \rangle \\ &= \langle l m_l | (\mathbf{L}^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z) | l m_l \rangle \\ &= (l^2 + l - m_l^2 \mp m_l) \hbar^2. \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\therefore L_+ |l m_l\rangle = \sqrt{(l-m_l)(l+m_l+1)} \hbar |l m_l + 1\rangle$$

$$L_- |l m_l\rangle = \sqrt{(l+m_l)(l-m_l+1)} \hbar |l m_l - 1\rangle. \quad (3.20)$$

3.3 Orbital and Spin Angular Momentum

앞 section에서 필자는 angular momentum $\mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}$ 라고 하였다. 하지만, angular momentum은 단지 두 operator의 외적으로 나타낼 정도로 단순한 녀석이 아니다. 사실, angular momentum은 orbital angular momentum \mathbf{L} 과 spin angular momentum \mathbf{S} 로 나눠서 생각해야 한다. 그리고 total angular momentum $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ 이 정의된다. 아, 물론 \mathbf{J} 와 \mathbf{S} 도 염연히 rotation generator이므로 (3.9), (3.11)의 commutation relation과 (3.18)의 eigenvalue problem을 만족시킨다.

$$[J_a, J_b] = i\hbar \sum_{abc} J_c \epsilon_{abc}, \quad [S_a, S_b] = i\hbar \sum_{abc} S_c \epsilon_{abc}$$

$$\mathbf{J}^2 |j m_j\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j m_j\rangle, \quad \mathbf{S}^2 |s m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s m_s\rangle \quad (3.21)$$

$$J_z |j m_j\rangle = m_j \hbar |j m_j\rangle, \quad S_z |s m_s\rangle = m_s \hbar |s m_s\rangle$$

먼저, 왜 angular momentum을 orbital과 spin으로 나눠야 하는지 이야기 할 것이다. Orbital angular momentum operator의 eigenvalue 문제에서 그 이유를 찾을 수 있다. \mathbf{J} 도 angular momentum이므로 (3.21)의 eigenvalue problem을 만족시키며, quantum number j 도 half integer의 값을 가질 수 있다. 하지만, \mathbf{L} 의 quantum number l 은 0, 1, 2와 같은 integer 값만 가질 수 있다. 이는 \mathbf{L} 의 eigenvalue problem

을 position space에서 풀음으로써 알 수 있다. $\langle \theta, \phi | l m_l \rangle = Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$ 이라고 한다면,

$$\begin{aligned}\langle \theta, \phi | \mathbf{L}^2 | l m_l \rangle &= \langle \theta, \phi | l(l+1)\hbar^2 | l m_l \rangle \\ &= -\hbar^2(\mathbf{x} \times \nabla)^2 Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^{m_l}(\theta, \phi)\end{aligned}$$

두번째 줄 식의 좌변에서 Del operator를 spherical coordinate에서 써서 식을 정리하면,

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + l(l+1) \right] Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = 0 \quad (3.22)$$

이와 같은 편미분 방정식이 나온다. 변수가 θ, ϕ 두 가지가 나오므로 $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$ 이렇게 둘서 변수분리법을 사용하고 separation constant를 m_l^2 라고 둔다면, ϕ 에 대한 방정식은

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m_l^2$$

가 된다. ϕ equation에 대한 해는 $\Phi(\phi) = e^{im_l \phi}$ 가 될 것이다. 하지만, 여기서 $\Phi(\phi)$ 한테 걸려있는 제한 조건이 있다. Φ 는 좌표공간에서 연속인 함수여야 하므로, 그러니까 $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$, 즉 $e^{im_l \phi} = e^{im_l \phi} e^{2\pi m_l i}$ 가 되어야 한다. 그러기 위해선 m_l 은 정수의 값을 가질 수 밖에 없다. θ 에 대한 equation은 여러분들이 수리물리학에서 미분방정식, Legendre function을 공부하면서 그 해가 어떻게 나오는지 배우셨을 거라고 생각한다. 사실, 필자는 여기선 방정식을 모든 과정 디테일하게 설명하기보다는 해를 풀어서 나온 결과를 설명하는거에 focusing하고 있다. 아모튼 (3.22)에서 변수분리법을 쓰고 θ 에 대한 방정식을 풀어보니 l 도 0 이상의 정수값만 가질 수 있다는 결과가 나왔다. Angular momentum의 quantum number들은 (3.18)의 eigenvalue problem을 풀었을 때 half integer도 나올 수 있다고 하였는데 실제로 l 과 m_l 은 정수값을 가질수 있다. 나머지 half integer은 spin part에서 나온다고 보면 될 것이다. 왜냐하면 spin의 quantum number s 한테는 꼭 정수값을 가지라고 거는 제약조건이 없기 때문이다.

우리는 입자의 state, physical observable을 position \mathbf{x} , momentum \mathbf{p} 와 같은 space degrees of freedom을 다뤄왔는데 spin \mathbf{S} 과 같은 internal degrees of freedom도 고려해야 한다. Ket vector로 입자를 보다 realistic하게 describe하기 위해선 ket에 space degrees of freedom과 internal degrees of freedom에 관한 정보를 둘다 넣어야 한다. 참고로, (Position operator \mathbf{X} , momentum operator \mathbf{P} , orbital angular momentum \mathbf{L} 의 eigenstates)가 존재하는 vector space와 (spin angular momentum operator \mathbf{S} 의 eigenstate)가 존재하는 vector space는 완전히 다르다.⁴ spin 1/2 particle의 경우, eigenstates가 $|s m_s\rangle = |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle$ 이 둘만 있다. 각각을 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ 라고 표시하고, spin up, spin down state라고 부른다.⁵ 그러므로 spin 1/2 particle을 나타내려면 position eigenkets $\{|\mathbf{x}\rangle\}$ 로 spanned 된 infinite-dimensional ket space, 그리고 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ 로 spanned 된 2-dimensional spin space에 대하여 다음 식과 같이 direct product로 나타내야 한다.⁶

$$|\mathbf{x}, \uparrow\downarrow\rangle = |\mathbf{x}\rangle \otimes |\uparrow\downarrow\rangle \quad (3.23)$$

식(3.23)의 direct product는 다른 space에서의 information을 ket 하나에 담아냈다고 생각하시면 될 거 같다. space degrees of freedom에 해당하는 operator들은 (예를 들어서 \mathbf{L} 같은 놈)은 $|\mathbf{x}\rangle \otimes |\uparrow\downarrow\rangle$ 에서

⁴ 이런 이유때문에, angular momentum의 eigenstate를 position base에서 바라보는데 가능한 반면, spin의 eigenstate를 position base에서 바라보는 것은 불가능하다. $\langle \mathbf{x} | l m_l \rangle = Y_l^m(\theta, \phi)$.

⁵ Spin up, down state를 column vector로 $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 로 나타낸다. 이 두 놈은 orthonormal 하므로 spin space에서 임의의 state를 $|a|^2 + |b|^2 = 1$ 에 대해서 $|\chi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ 와 같이 이 둘의 linear combination으로 나타낼수 있다. $|\chi\rangle$ 는 spinor라고 부르기도 한다.

⁶ Direct product는 행렬로 표시하자면, $\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1(\mathbf{b}) \\ a_2(\mathbf{b}) \\ \vdots \end{pmatrix}$ 로 표시되는 것이다.

$|\mathbf{x}\rangle$ 한테만 작용하고 internal degrees of freedom에 해당하는 operator들은 (\mathbf{S} 같은 거)는 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 한테만 작용한다. 따라서, \mathbf{L} 의 세 성분들과 \mathbf{S} 의 세 성분들은 서로 commute 한다.⁷

(3.2)에서만 보면 angular momentum을 $\mathbf{X} \times \mathbf{P}$ 로 적는게 맞는거 같아 보였다. 그런데 위에서 angular momentum을 나눠서 생각해야 한다는 이유를 들었고, $\mathbf{L}, \mathbf{S}, \mathbf{J}$ 는 뭐 하는 놈들인가? \mathbf{L} 은 position space에서 rotation을, \mathbf{S} 는 spin space에서 rotation을 generate하는 operator이며, \mathbf{J} 는 이 두가지 rotation을 generate하는 놈이다. Eigenvalue만 본다면, \mathbf{J} 의 세 성분은 \mathbf{L} 과 \mathbf{S} 의 각 성분들을 합한거와 같으므로

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

라고 표시한다. 그런데, position space와 spin space에서 둘 다 rotation을 generate한다는 점을 생각하면 다음과 같이 적는 것이 보다 obvious하다.

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} \otimes I + I \otimes \mathbf{S} \quad (3.24)$$

우변의 첫 번째 term에 있는 I 는 spin space에 작용하는 identity operator이며 두 번째 term에 있는 I 는 position space에 작용하는 identity operator이다. 그러니까 1. position space에서는 \mathbf{L} 을 가하면서 spin space는 가만히 냅둔 다음에, 2. position space를 가만히 냅두면서 spin space에 \mathbf{S} 를 가하는 과정을 생각하면 된다. \mathbf{L} 과 \mathbf{S} 는 작용하는 space가 서로 다르므로, 서로 commute 한다. 또한, Rotation을 하기 위해서 두 space 한테 작용해야하기 때문에 operator도 다음과 같이 direct product 해줘야 한다.

$$\begin{aligned} R^{(\text{total})}(\phi) &= \exp\left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar}\right) \\ &= R^{(\text{orbit})}(\phi) \otimes R^{(\text{spin})}(\phi) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{L} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar}\right) \otimes \exp\left(\frac{-i\mathbf{S} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (3.25)$$

이번엔 spin 1/2 particle의 matrix representation과 rotation을 살펴보겠다. Spin의 eigenstate $|\uparrow\rangle = |s m_s\rangle = |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$, $|\downarrow\rangle = |\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle$, $\langle \uparrow | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | \uparrow \rangle = 0$ 을 이용해서 \mathbf{S} 의 세 성분의 matrix representation을 찾아보자.

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{S_+ + S_-}{2}, & S_y &= \frac{S_+ - S_-}{2i} \\ S_+ |\uparrow\rangle &= 0, & S_- |\uparrow\rangle &= \hbar |\downarrow\rangle, & S_+ |\downarrow\rangle &= \hbar |\uparrow\rangle, & S_- |\downarrow\rangle &= 0. \\ S_z |\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, & S_z |\downarrow\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (3.26)$$

임을 이용하자.

$$\begin{aligned} S_x &= \begin{pmatrix} \langle \uparrow | S_x | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | S_x | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | S_x | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | S_x | \downarrow \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x \\ S_y &= \begin{pmatrix} \langle \uparrow | S_y | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | S_y | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | S_y | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | S_y | \downarrow \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y \\ S_z &= \begin{pmatrix} \langle \uparrow | S_z | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | S_z | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | S_z | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | S_z | \downarrow \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \end{aligned}$$

위 식에서 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 을 Pauli spin matrices라고 부르며 $s = \frac{1}{2}$ 인 경우 $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$ 라고 나타내기도 한다. 여기서 z축 방향은 뭘 말하는 걸까? 식(3.11)에 따르면 angular momentum은 (J, L, S 모두한테 해당) 크기와 특정한 한 방향의 성분을 동시에 측정가능하다. z축 방향 성분은 \mathbf{S} 의 정확하게 측정할 수 있는 component를 지칭하는 것이다. 만약 spin의 측정가능한 성분이 그 해당하는 축의 방향과 반대이면 spin down이라고 말하고 그 방향과 같으면 spin up이라고 말한다. 그럼 3.3을 참조하시기 바란다.

⁷ 그러니까 임의의 $a, b = 1, 2, 3$ 에 대해서 $L_a S_b |\mathbf{x}, \chi\rangle = S_b L_a |\mathbf{x}, \chi\rangle$ 라고. 왜냐하면 L_a 는 $|\mathbf{x}, \chi\rangle = |\mathbf{x}\rangle \otimes |\chi\rangle$ 에서 앞에 놓 한테만, S_b 는 뒤에 놓한테만 작용하기 때문에, 두 operator를 가하는 순서를 다르게 하여도 결과는 똑같기 때문이다.

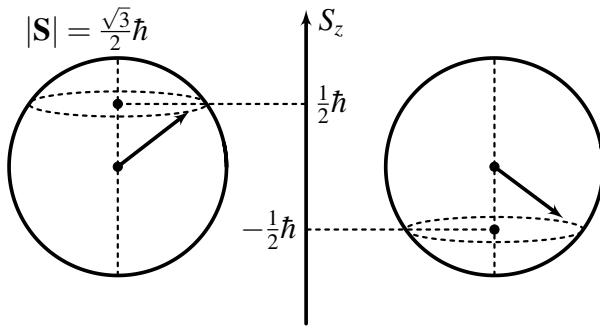


Figure 3.3: $s = 1/2$ 인 경우 S_z 가 가질 수 있는 eigenvalue 를 시각화해서 나타낸 그림. 왼쪽이 spin up 이고 오른쪽이 spin down 이다. 본문에도 적었다시피 spin up & down 이 \mathbf{S} 가 z 축과 같은 방향이니 반대방향이니를 말하는 것이 아니다. 그리고, $\mathbf{S}^2 |s m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s m_s\rangle$ 이므로 $|\mathbf{S}| = (\sqrt{3}/2)\hbar$ 이다.

Spin up, down 이라는 표현이 \mathbf{S} 의 방향과 z 축의 방향이 일치하거나 정확히 반대라는 걸로는 이해하지 말자. 만약 spin 의 방향의 z 과 완벽하게 나란하다면, 그 소리는 spin 의 세 성분이 모두 동시에 정확히 측정 가능하다는 소린데, 3.1에서 나온 commutation relation 을 해석한 것에서 완전히 벗어난다. x, y 성분 두개만 놓고 봐도 알 수 있다. $\sigma_A \sigma_B \geq |\frac{1}{2i} \langle [A, B] \rangle|$ 이고, $[\sigma_x, \sigma_y] = i\hbar \sigma_z$ 에서 spin 의 x, y 성분은 동시에 정확히 측정할 수 없다.

이제 spin $\frac{1}{2}$ space 에서의 rotation operator도 살펴보자.

$$R_{\hat{n}}(\phi) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{S} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar}\right) = \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n}\phi}{2}\right) \quad (3.27)$$

로 나타내어진다. $|\hat{n}| = 1$ 이므로

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n})^n = \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix}^n = \begin{cases} 1 & \text{for } n \text{ even} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n} & \text{for } n \text{ odd} \end{cases} \quad (3.28)$$

을 이용하면

$$\exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n}\phi}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (-in_x - n_y) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ (-in_x + n_y) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

이 나온다. 즉, spin space 에서 rotation 에 의해서 입자의 state 는

$$|\chi\rangle \rightarrow \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n}\phi}{2}\right) |\chi\rangle \quad (3.30)$$

로 변한다는 말씀이다. (3.30) 에 $\phi = 2\pi$ 를 대입해보자. 글니까 spin $\frac{1}{2}$ space 에서 2π 만큼의 rotation 을 취하면, $\exp\left(-\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n}\phi}{2}\right) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ 로 Identity operator 의 -1배 이므로

$$|\chi\rangle \rightarrow -|\chi\rangle \quad (3.31)$$

rotation 의 결과, $|\chi\rangle$ 가 원래 자기 자신이 나오기는 커녕 방향이 반대로 바뀌어버리는 기이한 일이 일어난다!!!

3.4 Addition of Angular Momentum

이 section 을 시작하기 전에, angular momentum addition 의 대표적인 예시 두 가지를 살펴보자: (1) 전자의 orbital angular momentum 과 spin angular momentum 을 어떻게 더할 건가? 그리고 (2) 수소원자에서 spin 1/2 인 두 입자, 전자와 핵(양성자)의 spin angular momentum 을 어떻게 더할 것인가? Angular momentum (의 eigenvalue)는 vector 이지만, 그저 단순히

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (3.32)$$

와 같이 간단하게 생각할 수 있는게 아니다. 아차, 여기서도 앞에서 orbital, spin 나눴듯이, $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$ 가 각각 작용하는 공간이 다르다. 따라서 \mathbf{J} 를 식(3.24)에서처럼

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \otimes I + I \otimes \mathbf{J}_2 \quad (3.33)$$

나타낸다. \mathbf{J}_1 가 작용하는 공간을 space 1, \mathbf{J}_2 가 작용하는 공간을 space 2 라고 부르자. 우변의 첫 번째 term 에 있는 I 는 space 1 에 작용하는 identity operator 이며 두 번째 term 에 있는 I 는 space 2 에 작용하는 identity operator 이다.

다시, Total angular momentum \mathbf{J} 와 individual angular momentums $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$ 는 다 rotation generator 이기야

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 |jm\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle & J_z |jm\rangle &= m\hbar |jm\rangle \\ \mathbf{J}_1^2 |j_1m_1\rangle &= j_1(j_1+1)\hbar^2 |j_1m_1\rangle & J_{1z} |j_1m_1\rangle &= m_1\hbar |j_1m_1\rangle \\ \mathbf{J}_2^2 |j_2m_2\rangle &= j_2(j_2+1)\hbar^2 |j_2m_2\rangle & J_{2z} |j_2m_2\rangle &= m_2\hbar |j_2m_2\rangle \end{aligned} \quad (3.34)$$

을 만족시켜야 하므로, 각 eigenket 들을 더할때도 신중하게 다뤄야 한다.

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} \quad (3.35)$$

을 이용하여 계산한 다음의 commutation relations 를 살펴보자. (계산과정은 Chapter 7.의 해당 부분에 첨부하였습니다.)

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_{1(2)}^2] = 0, \quad [\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1] = 2i\hbar\mathbf{J}_1 \times \mathbf{J}_2$$

$$[\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2] = 0, \quad [\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2] = 0$$

위 relations 를 어떻게 해석하면 될까? 첫번째놈을 보자. Total angular momentum operator 의 크기와 individual 한 angular momentum 의 크기는 동시에 정확히 측정가능하다. 그리고, Total angular momentum 의 크기와 각 성분들은 동시에 정확히 측정가능하다. ($[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}] = 0$) 따라서, $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{J}_{1(2)}^2$ 의 simultaneous eigenstate 가 존재하므로, $|j_1j_2; jm\rangle$ 과 같은 ket vector 를 쓸 수 있다. 세번째와 네번째 놈을 살펴보자. 저거는 \mathbf{J}_1 과 \mathbf{J}_2 이 완전히 다른 space 에 작용하는 operator 이기 때문에 0 되는게 당연하다. 저 식들을 해석하면, 서로 다른 individual angular momentum 은 크기, 각 성분들을 동시에 측정하는 것이 가능하다. 따라서, $\mathbf{J}_{1(2)}^2, J_{1(2)z}$ 의 simultaneous eigenstate 가 존재하므로, $|j_1j_2; m_1, m_2\rangle$ 와 같은 ket vector 를 쓸 수 있다. 마지막으로 두번째 relation 을 보자. Total angular momentum 의 크기와 individual angular momentum 의 각 성분들은 동시에 정확히 측정할 수 없다는 뜻이다. 따라서, j 와 $m_{1(2)}$ 는 하나의 ket vector 안에 같이 쓸 수 없다. 우리는 크기를 정확히 알고 있는 두 individual angular momentum $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$ 를 더해서 나오는 total angular momentum 의 크기와 z 방향 성분에 관심을 두고 있다. 두 angular momentum 의 simultaneous eigenstate 는 normalized 되어 있고,

$$\langle j_1j_2; m'_1m'_2 | j_1j_2; m_1m_2 \rangle = \delta_{m'_1, m_1} \delta_{m'_2, m_2}$$

$$\sum_{m_1, m_2} |j_1j_2; m_1m_2\rangle \langle j_1j_2; m_1m_2| = I$$

complete set 도 이룬다. 두 angular momentum 을 더해서 나온 \mathbf{J} 는 크기와 z방향 성분을 정확히 알 수

있는데, 동시에 더하기 전의 individual 한 놈들의 z 방향 성분까지 동시에 알 수 없으므로 \mathbf{J} 의 eigenstate를 다음과 같이 linear combination 으로 나타내는 것이 좋다.

$$\begin{aligned} |j_1 j_2; jm\rangle &= \underbrace{\sum_{m_1, m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2|}_{=I} |j_1 j_2; jm\rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2 m}^{j_1 j_2 j} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \end{aligned} \quad (3.36)$$

위 식에서 \square 에 들어간 놈은 일일이 bra와 ket 의 inner product 로 쓰기 번거로워서 $C_{m_1 m_2 m}^{j_1 j_2 j}$ 로 나타냈고, 이를 **Clebsch Gordon Coefficient**, 줄여서 CG-coefficient 라고 부른다. 이 coefficient 들의 몇가지 경우의 예시가 Appendix B 에 있으므로 궁금하면 참고하시라. 음마들이 어떤 성질들을 만족하는지 살펴보자.

Property 1

Coefficients 는 $m \neq m_1 + m_2$ 일때 0 이 되어버린다. 이는 $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ 임을 생각하면 쉽게 납득이 가는 사실이다. 다음의 계산과정을 힘들어보고 가시라.

$$\underbrace{(J_z - J_{1z} - J_{2z})}_{=0} |j_1 j_2; jm\rangle = 0$$

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | (J_z - J_{1z} - J_{2z}) | j_1 j_2; jm \rangle &= (m - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \\ &= \underbrace{(m - m_1 - m_2)}_{\neq 0} C_{m_1 m_2 m}^{j_1 j_2 j} = 0 \end{aligned}$$

$$\therefore \text{ When } m \neq m_1 + m_2, \quad C_{m_1 m_2 m}^{j_1 j_2 j} = 0$$

Property 2

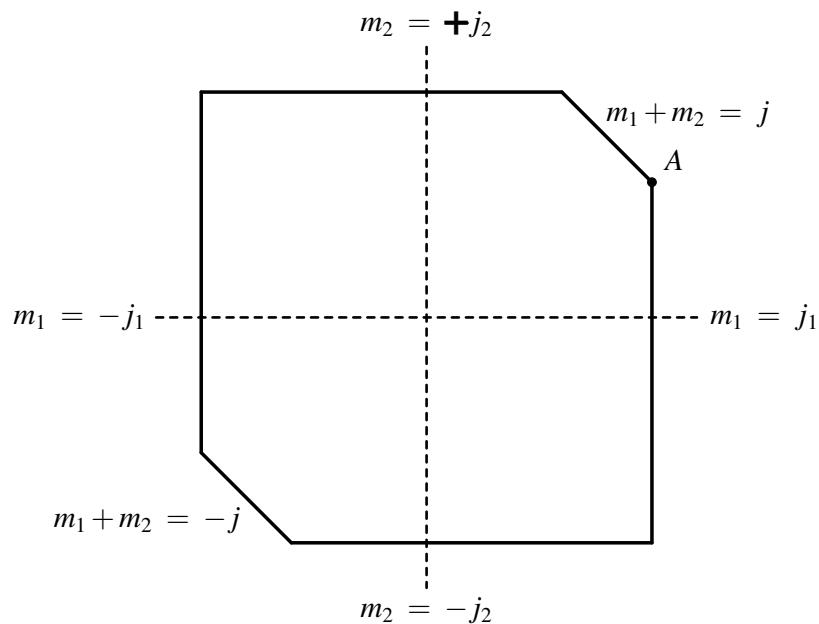
Coefficients 는 다음 부등식을 성립하지 않는 j, m 에 대해서 0 이 되어버린다.

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (3.37)$$

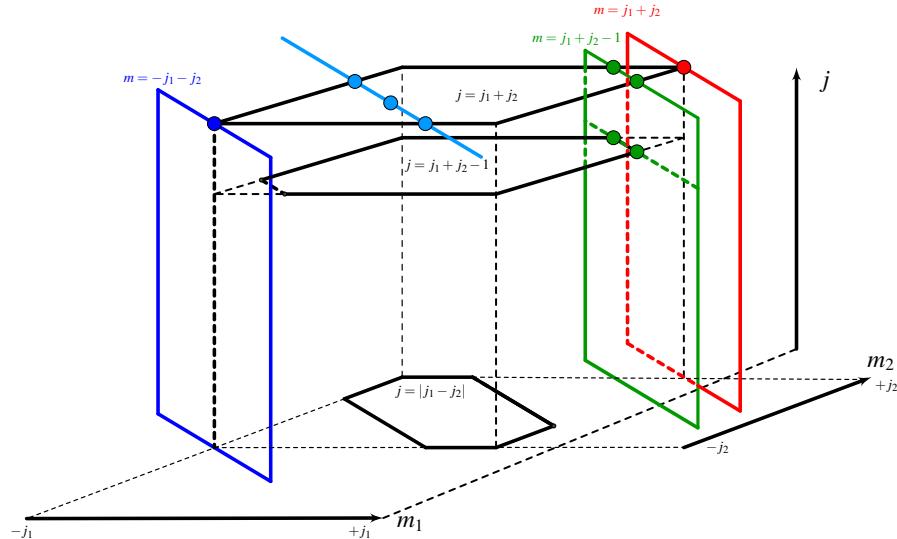
애도 뭔가 맞는 말 같아 보이는데, 다음과 같이 생각하면 정확할 것이다. $\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\}$ 에의해서 spanned 된 space와 $\{|j_1 j_2; jm\rangle\}$ 에 의해서 spanned 된 space의 dimensionality 가 같아야 한다. 일단, 우리는 앞서 가정했듯이 j_1, j_2 의 값을 정확히 안 상태로 시작을 하였으므로, $m_{1(2)}$ 가 가능한 값은 1 간격으로 $-j_{1(2)}$ 에서부터 $j_{1(2)}$ 까지 총 $2j_{1(2)} + 1$ 개 임을 알 수 있다. 그러면 $\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\}$ 에 의해서 spanned 된 space의 dimension 은 $N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ 이 나오는데 $\{|j_1 j_2; jm\rangle\}$ space에 대해서도 생각해보자. 특정한 값의 j 에 대해서 m 이 가질 수 있는 값은 $-j$ 에서부터 j 까지, 총 $2j + 1$ 개 이므로,

$$\begin{aligned} N &= \sum_{j=j_{min}}^{j=j_{max}} (2j + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \\ &= \left[2 \cdot \frac{j(j+1)}{2} + 1 \cdot j \right]_{j=j_{min}-1}^{j=j_{max}} \end{aligned} \quad (3.38)$$

을 풀면 $j_{min} = |j_1 - j_2|$, $j_{max} = j_1 + j_2$ 가 나온다. 이에 따르면, 양자수가 l 인 \mathbf{L} 과 spin $\frac{1}{2}$ 인 \mathbf{S} 를 더해 나온 angular momentum 이 가질 수 있는 양자수는 $j = l \pm \frac{1}{2}$ 이며, $s_{1,2} = \frac{1}{2}$ 인 spin angular momentum 들을 더해서 나온 total spin 이 가질 수 있는 양자수는 $s = 0, 1$ 이다. 그림3.4에 Property 1, 2의 설명을 정리하였다.



(a) 여기서 가로, 세로축과 45도 각을 이루는 직선은 $m_1 + m_2$ 값이 일정한 직선, 즉 m 값이 일정한 직선으로 보면 된다. m 이 가질 수 있는 값의 범위는 $-j < m < j$ 이며, $m_{1(2)}$ 이 가질 수 있는 값의 범위는 $-j_{1(2)} \leq m_{1(2)} \leq j_{1(2)}$ 이다. 이 그림에서 굵은 선분들로 이루어진 다각형 바깥 영역에서의 CG-coefficient는 모조리 0이 되버린다.



(b) 사실, 그림(a)에서 j 의 값에 따라 다각형의 모양이 달라진다. 얘는 높이 축인 j 축까지 포함한 그림이다. $m_1 + m_2 = m$ 이 일정한 지점들을 이은 도형은 이제 직선이 아니라 평면이 된다. 이 평면이 특정한 j 값에 해당하는 평면과 만나서 생기는 교선들 위에 있는 CG-coefficient들을 제곱하여 더하면 1이 나온다. 예를 들어 이 그림상에서 연한 파랑색 점들의 계수들을 제곱하여 더하면 1이 나온다.

Figure 3.4: Clebsch Gordon Coefficients 의 관계의 설명을 돋는 그림

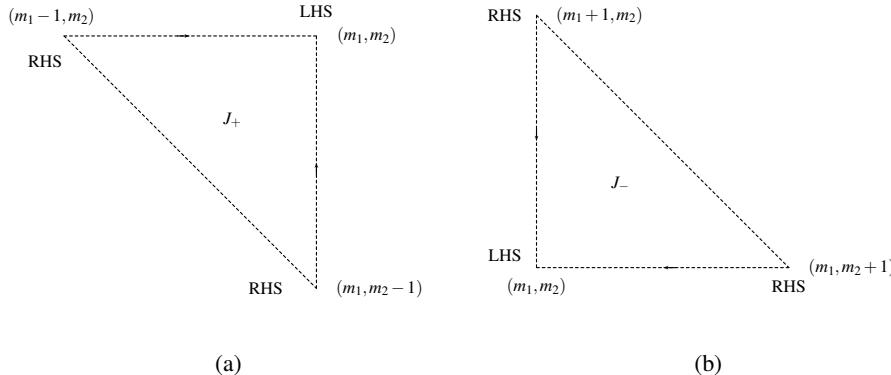


Figure 3.5: (a), (b) 3.번 항목의 recursion relation 을 설명하는 그림이다. 두 그림에서 가로축과 세로축은 각각 m_1, m_2 에 해당한다. 두 지점 $(m_1 \pm 1, m_2), (m_1, m_2 \pm 1)$ 에서의 CG-coefficient 값을 알면 (m_1, m_2) 에서의 coefficient를 알 수 있음을 보여준다.

Property 3

Coefficients 들은 다음의 recursion relation 을 만족한다.

$$\begin{aligned}
 & \sqrt{(j-m)(j+m+1)} C_{m_1, m_2, m+1}^{j_1, j_2, j} \\
 &= \sqrt{(j_1 - m_1 + 1)(j_1 + m_1)} C_{m_1 - 1, m_2, m}^{j_1, j_2, j} + \sqrt{(j_2 - m_2 + 1)(j_2 + m_2)} C_{m_1, m_2 - 1, m}^{j_1, j_2, j} \\
 & \quad (3.39) \\
 & \sqrt{(j+m)(j-m+1)} C_{m_1, m_2, m-1}^{j_1, j_2, j} \\
 &= \sqrt{(j_1 + m_1 + 1)(j_1 - m_1)} C_{m_1 + 1, m_2, m}^{j_1, j_2, j} + \sqrt{(j_2 + m_2 + 1)(j_2 - m_2)} C_{m_1, m_2 + 1, m}^{j_1, j_2, j}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left| C_{(m_1=j_1), (m_2=j_2), (m=j_1+j_2)}^{j_1, j_2, (j=j_1+j_2)} \right| \\
 &= \left| \left\langle j_1, j_2, (m_1 = j_1), (m_2 = j_2) \middle| j_1 j_2, (j = j_1 + j_2), (m = j_1 + j_2) \right\rangle \right| = 1
 \end{aligned}$$

첫번째와 두번째 relation 이 말하는 것은, 두 지점 $(m_1 \pm 1, m_2), (m_1, m_2 \pm 1)$ 에서의 CG-coefficient 값을 알면 (m_1, m_2) 에서의 값을 알 수 있다는 것이다. 마지막으로, 세번째 relation 에서 말하려는 것은, 1번 angular momentum 과 2번 angular momentum 을 더해서 나온 total angular momentum 의 quantum number 가 $j = j_1 + j_2$ 이고 $m = m_{max} = j_1 + j_2$ 일때, 가능한 m_1, m_2 의 조합은 $(m_1, m_2) = (j_1, j_2)$ 밖에 없다는 것이다. 그림 3.4(b)로 따지면, 빨간색 점에 해당하는 계수는 1이다. 이 relation 들의 유도과정은 너무 긴 관계로 Chapter 7. 에 넣었으니 궁금하면 꼭 읽어보시길 바란다. 이 성질은 그림 3.5에 정리하였다.

Addition of angular momentum 이 적용되는 예시로 $s = \frac{1}{2}$ 인 두 spin 을 더하는 과정을 보여주고 이 chapter 를 마치겠다. 1번 spin \mathbf{S}_1 과 2번 spin \mathbf{S}_2 를 합하여 나온 total spin $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 = \mathbf{S}_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes \mathbf{S}_2$ 가 가질 수 있는 s 양자수는 $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}| \leq s \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$ 에서 $s = 1, s = 0$ 이 두개 뿐이며, $s = 1$ 일 때 가능한 m 은 $1, 0, -1$, $s = 0$ 일 때 가능한 m 값은 0 뿐이다. 또한, 1번 spin 의 eigenstate가 존재하는 vector space 와 2번 spin 의 eigenstate가 존재하는 vector space 를 direct product 한 space 의 dimension 은 $\{| \uparrow \rangle \otimes | \uparrow \rangle, | \uparrow \rangle \otimes | \downarrow \rangle, | \downarrow \rangle \otimes | \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle \otimes | \downarrow \rangle\}$ 의 dimension 인 4 이다. 이 4개를 일일이 direct product 기호를 써서 표현하기 번거로우므로 $\{| \uparrow\uparrow \rangle, | \uparrow\downarrow \rangle, | \downarrow\uparrow \rangle, | \downarrow\downarrow \rangle\}$ 라고 표시하겠다. $|s m\rangle = |1 1\rangle, |1 0\rangle, |1 -1\rangle, |0 0\rangle$

은 이 4개의 ket들의 선형결합으로 나타나져야 한다. 먼저, $m = \pm 1$ 인 경우를 보자.

$$|1\ 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |1\ -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad (3.40)$$

라고 표현하는 것이 맞다. 이는 아까 봤던 CG-coefficient의 세번째 recursion relation의 설명에도 부합한다. $m=0$ 인 경우도 살펴보자. 이 경우, individual spins의 m 값이 서로 반대여야 하므로,

$$\begin{aligned} |1\ 0\rangle &= \textcolor{red}{C}_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} |\uparrow\downarrow\rangle + \textcolor{blue}{C}_{-\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} |\downarrow\uparrow\rangle \\ |0\ 0\rangle &= \textcolor{blue}{C}_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0} |\uparrow\downarrow\rangle + \textcolor{green}{C}_{-\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0} |\downarrow\uparrow\rangle \end{aligned} \quad (3.41)$$

와 같이 CG-coefficients를 이용해서 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 와 $|\downarrow\uparrow\rangle$ 의 선형결합으로 나타내는게 맞다. 이 coefficients를 어떻게 구하는 건가? $|1\ 0\rangle$ case부터 생각해보자. Recursion relation의 두번째식을 이용하면 $\textcolor{red}{C}_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}$ 를 알아낼 수 있다.

$$\textcolor{red}{C}_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} = \sqrt{\frac{2 \cdot 0}{2 \cdot 1}} \underbrace{C_{\frac{3}{2} \frac{1}{2} 1}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}}_{=0} + \sqrt{\frac{1 \cdot 1}{2 \cdot 1}} \underbrace{C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}}_{=1} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

다음으로 Recursion relation의 첫번째식을 이용하면 $\textcolor{blue}{C}_{-\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}$ 를 알아낼 수 있다.

$$\textcolor{blue}{C}_{-\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} = \sqrt{\frac{2 \cdot 0}{2 \cdot 1}} \underbrace{C_{-\frac{3}{2} \frac{1}{2} -1}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}}_{=0} + \sqrt{\frac{1 \cdot 1}{2 \cdot 1}} \underbrace{C_{-\frac{1}{2} \frac{1}{2} -1}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}}_{=1} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

따라서, $|1\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ 이다. 이제, $|0\ 0\rangle$ case를 살펴보자. 하지만!!! $s=m=0$ 인 경우엔

$$\begin{aligned} \sqrt{(0-0)(0+0+1)} C_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1}^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0} &= 0 \\ &= \underbrace{\sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)}}_{=0} C_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0}^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0} + \underbrace{\sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)}}_{=0} C_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0}^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0} \end{aligned}$$

이런 경우가 생기므로 recursion relation을 함부로 사용하지 못한다. 이 경우엔 어떻게 접근해야 할까? Direct product를 이용하여 S^2 의 matrix representation을 찾고, 이의 eigenvalue problem을 풀어서 eigenvalue가 0일 때의 eigen vector를 찾으면 된다. 먼저, $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ 의 matrix representation부터 찾아보자.

$$|\uparrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 = \begin{pmatrix} 1 & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \\ 0 & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

다음으로, S_x , S_y , S_z \mathbf{S}^2 의 matrix representation 을 찾아보자.

$$\begin{aligned}
 S_x &= S_{1x} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2x} = \frac{\hbar}{2} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_2 \right) \\
 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_2 \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_2 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_2 & 0 \\ 0 & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
 S_y &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & -i & 0 \\ i & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & -i \\ 0 & i & i & 0 \end{pmatrix} \quad S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.42) \\
 \mathbf{S}^2 &= S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

이렇게 힘들게 얻은 \mathbf{S}^2 의 matrix representation 의 eigenvalue problem $|\mathbf{S}^2 - \lambda I| = 0$ 을 풀어보자.

$$(2\hbar^2 - \lambda) \cdot [(\hbar^2 - \lambda)(\hbar^2 - \lambda)(2\hbar^2 - \lambda) + \hbar^2 \cdot (\lambda - 2\hbar^2)] = (2\hbar^2 - \lambda)^3(-\lambda) = 0$$

$\lambda = 2\hbar^2$ 인 경우가 3개 나오는 것은 뭘까? $s = 1$ 일 때 $s(s+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$ 이므로 $|11\rangle$, $|10\rangle$, $|1-1\rangle$ 이 세 가지를 말하는 것이다. 이건 아까 우리가 이미 구해놨다. 그러므로 우리는 $s = 0$, $\lambda = s(s+1)\hbar^2 = 0$

인 경우를 봐야 한다. $|00\rangle = \textcolor{blue}{a}|\uparrow\downarrow\rangle + \textcolor{red}{b}|\downarrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \textcolor{blue}{a} \\ \textcolor{red}{b} \\ 0 \end{pmatrix}$ 라고 둔다면,

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \textcolor{blue}{a} \\ \textcolor{red}{b} \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \textcolor{blue}{a} \\ \textcolor{red}{b} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \textcolor{blue}{a}+\textcolor{red}{b} \\ \textcolor{blue}{a}+\textcolor{red}{b} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\therefore \textcolor{blue}{a} + \textcolor{red}{b} = 0$$

$\textcolor{blue}{a}$ 와 $\textcolor{red}{b}$ 가 부호가 반대이고, 제곱의 합이 1이 된다는 점을 생각하면,

$$\textcolor{blue}{a} = C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \textcolor{red}{b} = C_{-\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0} = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

라고 둘 수 있다. 지금까지 살펴본 것을 종합해보자.

$$\begin{aligned}
 |11\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\
 |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle \\
 |1-1\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \quad (3.43) \\
 |00\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle
 \end{aligned}$$

spin $\frac{1}{2}$ 2개를 더하여 식(3.43)의 첫번째, 두번째, 세번째 줄처럼 $s = 1$ 이 나오는 걸 triplet state, 네번째 줄처럼 $s = 0$ 이 나오는 걸 singlet state 라고 부른다.

3.5 Problems

1. **Schwinger's Oscillator model of Angular Momentum** There are two *independant* simple harmonic oscillators with creation and annihilation operators satisfying commutation relations below.

$$\begin{aligned} N_1 &= a_1^\dagger a_1, \quad [a_1, a_1^\dagger] = 1, \quad [N_1, a_1^\dagger] = a_1^\dagger, \quad [N_1, a_1] = -a_1 \\ N_2 &= a_2^\dagger a_2, \quad [a_2, a_2^\dagger] = 1, \quad [N_2, a_2^\dagger] = a_2^\dagger, \quad [N_2, a_2] = -a_2 \end{aligned}$$

Then, let

$$N = N_1 + N_2, \quad J_+ = \hbar a_1^\dagger a_2, \quad J_- = \hbar a_2^\dagger a_1, \quad J_z = \frac{\hbar}{2}(N_1 - N_2).$$

(a) Represent the J_x, J_y using $a_1^\dagger, a_2^\dagger, a_1, a_2$.

(b) Using the operators definded as above, show

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z, \quad [J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm.$$

(c) Finally, show that

$$\mathbf{J}^2 = \hbar^2 \left(\frac{N}{2} \right) \left[\frac{N}{2} + 1 \right], \quad [\mathbf{J}^2, \mathbf{J}] = 0$$

2. Recall the fundamental commutation relation of angular momentum operator. Let's say that particle was initially at physical state $|\psi_0\rangle$. After rotation by finite angle ϕ about z -axis, the initial states turns to

$$|\psi_R\rangle = R_z(\phi)|\psi_0\rangle = \exp\left(\frac{-iJ_z\phi}{\hbar}\right)|\psi_0\rangle.$$

Under rotation, it holds true that

$$\langle J_{x(y)} \rangle_0 \rightarrow \langle J_{x(y)} \rangle_R = \langle \psi_R | J_{x(y)} | \psi_R \rangle = \langle \psi_0 | R_z^\dagger(\phi) J_{x(y)} R_z(\phi) | \psi_0 \rangle.$$

By using equation (3.44) and equation above, show that expectation value of J_x and J_y changes as (3.45).

$$e^A B e^{-A} = B - [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \dots = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \underbrace{[A, \dots [A, B]]}_{n' A' s} \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} \langle J_x \rangle_0 &\rightarrow \langle J_x \rangle_R = \langle J_x \rangle_0 \cos \phi - \langle J_y \rangle_0 \sin \phi \\ \langle J_y \rangle_0 &\rightarrow \langle J_y \rangle_R = \langle J_y \rangle_0 \cos \phi + \langle J_x \rangle_0 \sin \phi \end{aligned} \quad (3.45)$$

3. Provided that quantum number of orbital and spin angular momentum are l and $s = \frac{1}{2}$, show that

$$|\psi_{l,m}\rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \left| m_l = m - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \left| m_l = m + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle$$

is a simultaneuous eigenket of

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2L_z S_z + L_+ S_- + L_- S_+, \quad J_z = L_z + S_z$$

with eigenvalues $(l + \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2})\hbar^2, m\hbar$, respectively.

CHAPTER 4

Time Independent Perturbation

양자역학1에서는 Infinite square well, Delta potential well, Simple harmonic Oscillator, Coulomb potential 과 같이 exactly 하게 풀 수 있는 Schrödinger equation을 다뤘을거다. 이 chapter에서는 이 exactly, analytically 풀리는 eigenvalue equation에서 Hamiltonian Operator에 Time independent 한 변화를 가할 시 **Energy Eigenvalue**와 **Energy Eigenstate**가 어떻게 변하는지를 approximately 하게 다룰것이다. Section 4.1에서는 Time Independent Perturbation의 기본 formalism을, 4.2과 4.3에서는 time independent perturbation을 수소원자에 적용해서 Energy Level의 변화를 계산하는 내용이 나올 것이다.

4.1 Formalism

Energy Level의 degeneracy가 없는 경우를 살펴보겠다. 먼저, 다음과 같이 exactly 하게 풀 수 있는 Schrödinger equation가 주어져 있다.

$$H_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle$$

여기서, Hamiltonian Operator H_0 에 perturbing term (접동, 변화를 일으키는) H' 가 더해지고, Energy eigenvalue 와 Energy Eigenstate 들이 변한다.

$$H_0 \rightarrow H = H_0 + H'$$

$$E_n^0 \rightarrow E_n$$

$$|n^0\rangle \rightarrow |n\rangle$$

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle$$

여기서 H' 의 smallness (compared to H_0) 가 guaranty 되어야 한다. 연산자는 크기를 논할 수 있으나, 여기서 H' 가 small 하다는 뜻은

$$|E_n - E_n^0| \ll |E_n^0|$$

즉, Energy Eigenvalue 가 달라진 정도가 perturbing term 이 더해지기 이전의 Energy Eigenvalue 의 절대값에 비해 매우 작다는 뜻이다. 또한, H' 의 smallness는 dimensionless, small parameter λ 를 이용해서

$$H' = \lambda H^1 \tag{4.1}$$

이와 같이 나타낸다. 앞서 말했듯이 perturbing term H' 이 더해지면 Energy Eigenvalue 와 Energy Eigenstate 가 달라지는데 이 달라지는 정도를 다음과 같이 λ 에 대해서 order by order expansion 할 것이다.

$$H = H_0 + \lambda H^1 \quad (4.2a)$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \quad (4.2b)$$

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots \quad (4.2c)$$

Hamiltonian과 Eigenket 과 Energy level에 붙어있는 웃 첨자는 order by order expansion 하는 term이므로 지수로 헷갈리지 말자. Order by order expansion을 하기 전에 Energy eigen state의 몇몇 성질들을 짚고 넘어가겠다.

Table 4.1: Properties of Energy Eigenstates

	Original	Perturbed
Eigenvalue Problem	$H_0 n^0\rangle = E_n^0 n^0\rangle$ $\langle m^0 H_0 = \langle m^0 E_m^0$	$H n\rangle = E_n n\rangle$ $\langle m H = \langle m E_m$
Orthogonality	$\langle n^0 m^0 \rangle = \delta_{n,m}$ $\langle n^0 n^0 \rangle = \hat{I}$	$\langle n m \rangle = \delta_{n,m}$ $\langle n n \rangle = \hat{I}$

식(4.2)을 이용해서 새로운 Eigenvalue Problem을 풀어보자.

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle$$

$$\begin{aligned} & (H_0 + \lambda H^1)(|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots) \\ &= (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)(|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots) \end{aligned} \quad (4.3)$$

식(4.3)의 양변을 전개하여 λ 에 대하여 오름차순으로 정리하면 다음과 같다.

Table 4.2: Order by order expanding the terms in equation (4.3) as to λ

$$\begin{array}{c|c} \begin{array}{c} \lambda^0 (H_0 |n^0\rangle \\ + \\ \lambda^1 (H_0 |n^1\rangle + H^1 |n^0\rangle \\ + \\ \lambda^2 (H_0 |n^2\rangle + H^1 |n^1\rangle \\ + \\ \vdots \end{array} & \begin{array}{c} \lambda^0 (E_n^0 |n^0\rangle \\ + \\ \lambda^1 (E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 |n^0\rangle \\ + \\ \lambda^2 (E_n^0 |n^2\rangle + E_n^1 |n^1\rangle + E_n^2 |n^0\rangle \\ + \\ \vdots \end{array} \\ = & = \end{array}$$

여기서 λ^0 term은 unperturbed Hamiltonian H_0 의 Eigenvalue problem과 identical하다.

$\boxed{\lambda E_n^1 = ?}$ Energy Eigenvalue의 1st order term을 계산해보자. 표 4.2의 λ^1 term을 보면,

$$H_0 |n^1\rangle + H^1 |n^0\rangle = E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 |n^0\rangle \quad (4.4)$$

위 식의 양변에 bra vector $\langle n^0 |$ 을 곱해보겠다.

$$\langle n^0 | H_0 |n^1\rangle + \langle n^0 | H^1 |n^0\rangle = E_n^0 \langle n^0 | n^1\rangle + E_n^1 \langle n^0 | n^0\rangle$$

$$\boxed{\langle n^0 | H_0} |n^1\rangle + \langle n^0 | H^1 |n^0\rangle = \boxed{\langle n^0 | E_n^0} |n^1\rangle + E_n^1 \langle n^0 | n^0\rangle$$

위 식에서 좌변과 우변의 $\boxed{\quad}$ 에 들어가 있는 부분은 표4.1에서 다룬 Eigenvalue Problem 때문에 동일하다. 이 term 들을 소거하고, $\langle n^0 | n^0 \rangle = 1$ 을 이용하면

$$\begin{aligned} \lambda E_n^1 &= \lambda \langle n^0 | H^1 | n^0 \rangle = \langle n^0 | \lambda H^1 | n^0 \rangle = \langle n^0 | H' | n^0 \rangle \\ \boxed{\lambda E_n^1 = \langle n^0 | H' | n^0 \rangle} \end{aligned} \quad (4.5)$$

임을 알 수 있다. 즉, Energy Eigenvalue 의 1st order term은 expectation value of H' in the unperturbed state 이다.

$\boxed{\lambda |n^1\rangle = ?}$ Energy Eigenstate 의 1st order term을 계산해보자. 여기서는, $|n^0\rangle$ 의 completeness를 활용할 것이다. 즉, $m \neq n$ 인 m 에 대해서

$$|n^1\rangle = |n^0\rangle \langle n^0 | n^1 \rangle + \sum_{m(\neq n)} |m^0\rangle \langle m^0 | n^1 \rangle$$

이렇게 나타낼 것이다. 즉, 여기서 우리는 $\langle n^0 | n^1 \rangle$ 과 $\langle m^0 | n^1 \rangle$ 을 계산하면 된다.

$\boxed{\langle n^0 | n^1 \rangle = ?}$ 표4.1의 orthogonality $\langle n | n \rangle = I$ 를 활용하자. 일단, $\langle n | n \rangle$ 을 λ 에 대해서 order by order expansion 하자.

$$\underbrace{\langle n | n \rangle}_{=I} = \underbrace{\langle n^0 | n^0 \rangle}_{=I} + \lambda \underbrace{\left((\langle n^1 | n^0 \rangle + \langle n^0 | n^1 \rangle) \right)}_{=0} + \underbrace{\lambda^2 (\quad)}_{=0} + \dots \quad (4.6)$$

위 식에서 $\boxed{\quad}$ 에 들어있는 부분이 0이 되어야 한다. $(\langle n^0 | n^1 \rangle)^* = -\langle n^0 | n^1 \rangle$ 이므로 $\langle n^0 | n^1 \rangle$ 은 순허수임을 알 수 있다. 이 값을 real number α 에 대해서 일단

$$\boxed{\langle n^0 | n^1 \rangle = i\alpha} \quad (4.7)$$

이라고 나타내겠다.

$\boxed{\langle m^0 | n^1 \rangle = ?}$ 식(4.4)의 양변에 $m \neq n$ 인 m 에 대해서 bra vector $\langle m^0 |$ 을 곱하겠다.

$$\begin{aligned} \langle m^0 | H_0 | n^1 \rangle + \langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle &= E_n^0 \langle m^0 | n^1 \rangle + E_n^1 \underbrace{\langle m^0 | n^0 \rangle}_{0 \because m \neq n} \\ \boxed{\langle m^0 | H_0 | n^1 \rangle + \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle = E_n^0 \langle m^0 | n^1 \rangle} \end{aligned} \quad (4.8)$$

식 (4.8)의 좌변의 $\boxed{\quad}$ 은 표4.1의 Eigenvalue Problem 때문에 $\boxed{\langle m^0 | E_m^0 \rangle}$ 이라고 할 수 있다. 즉,

$$\begin{aligned} E_m^0 \langle m^0 | n^1 \rangle + \langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle &= E_n^0 \langle m^0 | n^1 \rangle \\ \langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle &= (E_n^0 - E_m^0) \langle m^0 | n^1 \rangle \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle m^0 | n^1 \rangle = \frac{\langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}} \quad (4.9)$$

이다. 위 결과들을 종합하면,

$$\begin{aligned} |n^1\rangle &= |n^0\rangle \boxed{\langle n^0|n^1\rangle} + \sum_{m(\neq n)} |m^0\rangle \boxed{\langle m^0|n^1\rangle} \\ &= i\alpha |n^0\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{|m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \end{aligned} \quad (4.10)$$

식 (4.10)과 식(3.2c)을 이용하여 λ 에 대해서 1st order 까지 정리하면,

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle \\ &= |n^0\rangle + i\lambda \alpha |n^0\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{\lambda |m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \end{aligned} \quad (4.11)$$

여기서 λ 는 small parameter 라고 가정하였으므로 $1 + i\lambda\alpha \simeq e^{i\lambda\alpha}$ 라고 하겠다. 식(4.11)를 다시 쓰면 다음과 같다.

$$|n\rangle \simeq e^{i\lambda\alpha} |n^0\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{\lambda |m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

$e^{-i\lambda\alpha} \simeq 1 - i\lambda\alpha$ 라고 하면, 위 식의 좌변과 우변의 첫 항에는 $e^{-i\lambda\alpha}$ 을 곱하고 우변의 둘째 항에는 $1 - i\lambda\alpha$ 을 곱하면

$$e^{i\lambda\alpha} |n\rangle \simeq |n^0\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{\lambda |m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} - i\alpha \sum_{m(\neq n)} \frac{\lambda^2 |m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

이 된다. 여기서, 우리는 $|n\rangle$ 을 λ 에 대해서 1st order 까지 정리하는 것에 관심을 두고 있으므로 우변의 맨 오른쪽 term을 지우자. 또한, 위 식에서 좌변에 곱해져 있는 $e^{i\lambda\alpha}$ 을 소거할 수 있다.¹ 즉, 지금까지 한 계산을 통해

$$|n^1\rangle = \sum_{m(\neq n)} \frac{|m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (4.12a)$$

$$|n\rangle \simeq |n^0\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{|m^0\rangle \langle m^0|H'|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (4.12b)$$

임을 알 수 있다.

$\lambda^2 E_n^2 = ?$ Energy Eigenvalue 의 2nd order term을 계산해보자. 표 3.2의 λ^2 term을 보면,

$$H_0 |n^2\rangle + H^1 |n^1\rangle = E_n^0 |n^2\rangle + E_n^1 |n^1\rangle + E_n^2 |n^0\rangle \quad (4.13)$$

이다. 위 식의 양변에 bra vector $\langle n^0|$ 을 곱해보겠다.

$$\begin{aligned} \langle n^0 | H_0 | n^2 \rangle + \langle n^0 | H^1 | n^1 \rangle &= \langle n^0 | E_n^0 | n^2 \rangle + \langle n^0 | E_n^1 | n^1 \rangle + \langle n^0 | E_n^0 | n^0 \rangle \\ \boxed{\langle n^0 | H_0} | n^2 \rangle + \langle n^0 | H^1 | n^1 \rangle &= \boxed{\langle n^0 | E_n^0} | n^2 \rangle + E_n^1 \boxed{\langle n^0 | n^1 \rangle} + E_n^2 \langle n^0 | n^0 \rangle \end{aligned} \quad (4.14)$$

¹ $|\psi\rangle$ 가 $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ 를 만족한다고 해보자. 실수 α 에 대해서 $|\psi'\rangle = e^{i\alpha}|\psi\rangle$ 도 $\hat{H}|\psi'\rangle = E|\psi'\rangle$ 를 만족하고, $\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$ 이다. 즉, $|\psi\rangle$ 의 magnitude가 1인 복소수를 곱하여도 $|\psi\rangle$ 를 normalize하는데 영향을 주지 않고, energy eigenvalue problem을 만족시킨다.

위 식에서 \square 에 들어가 있는 항들을 정리해 보겠다. 연한 파란 글씨로 되어 있는 항은 표 3.2의 Eigenvalue Problem 때문에 동일하므로 소거할 수 있다. 초록색 글씨로 되어 있는 부분을 보자. 식(4.12a)을 이용하면

$$|n^1\rangle = \sum_{m(\neq n)} \frac{|m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

$$\langle n^0|n^1\rangle = \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle n^0|m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad \langle n^0|m^0\rangle = \delta_{n,m} = 0$$

이다. 식(4.14)에서 $\langle n^0|n^0\rangle = 1$ 이므로 이를 다시 정리하면,

$$\begin{aligned} \langle n^0|H^1|n^1\rangle &= E_n^2 \\ \boxed{\lambda^2 E_n^2} &= \lambda^2 \langle n^0|H^1|n^1\rangle \\ &= \langle n^0|\lambda^2 H^1 \left(\sum_{m(\neq n)} \frac{|m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \right) \\ &= \sum_{m(\neq n)} \lambda^2 \frac{|\langle m^0|H^1|n^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \\ &= \boxed{\sum_{m(\neq n)} \frac{|\langle m^0|H'|n^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}} \end{aligned} \quad (4.15)$$

임을 알 수 있다.

지금까지 계산하면서 알게 된 것들을 다시 적어보겠다.

$$\text{Energy Eigenvalue: } E_n \simeq E_n^0 + \langle n^0|H'|n^0\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{|\langle m^0|H'|n^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \quad (4.16a)$$

$$\text{Energy Eigenstate: } |n\rangle \simeq |n^0\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{|m^0\rangle \langle m^0|H'|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (4.16b)$$

지금까지, 우리는 non degenerate case에 대해 Time independent Perturbation의 formalism을 다렸다. 여기서 Energy Level에 degeneracy가 있는 경우엔, 즉, 완전히 다른 ket vector에 해당하는 Energy Eigenvalue가 같은 경우가 있을 땐, 식(4.16a)과 식(4.16b)의 $\sum_{m(\neq n)}$ 이 있는 term에서 분모가 0이 되버리는 "재앙"이 생긴다. 사실, 이 chapter에서 degenerate case 까지 다뤄야 하나, 저자는 분량이 커지는 것을 우려해 이 내용을 생략하였다. 만약 이 부분을 확실히 알고 싶으시다면, Sakurai 저 Modern Quantum Mechanics 2e chapter5를 읽으시는 걸 권장한다.

4.2 Fine Structure of Hydrogen Atom

양자역학1에서는 수소원자의 schrödinger equation을 풀 때, positron과 electron 사이에는 coulomb interaction만 있다고 가정했었다.² 그렇게 함으로써 Eigenstate와 Energy Eigenvalue를 정확하게 계산할 수 있었다. 그러나, positron과 electron 사이에는 coulomb interaction 이외에 다른 상호작용들이 있고 이들에 의한 효과들도 고려해야 한다. Coulomb interaction만 따졌을 때, electron의 Energy는 principle quantum number n 에만 의존하는데 실제로는 angular quantum number l 과 magnetic quantum number m_l 에 따라 같은 n 에서도 Energy Level이 매우 미세하지만 여러 개로 나눠진다. 여기서는 앞 section에서 나온 formalism을 이용하여 이를 다룰 것이다. 이 section에서 나오는 Energy level의 shift는 λ 에 대해서

² $V(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{x}|}$

1st order term 까지만 계산할 것이다. ($E_n \simeq E_n^0 + \lambda E_n^1$) Energy level을 정확히 계산하기 위해서 2nd order 이상으로 계산해야하지 않을까는 생각을 할 수 있다만, 식(4.16a)에서 같이 2nd order 이상으로 넘어가면 $E_n - E_n^0$ 의 값을 구하기 위해 $\sum_{m(\neq n)}$ 처럼 다른 state 에서까지 summation을 돌려야하고 계산량이 어마무시하게 많아진다. 앞 section에서 다른 것을 다시 생각해보면, $\lambda E_n^1 = \langle n^0 | H' | n^0 \rangle = \langle H' \rangle_{|n^0\rangle}$, 즉, 1st order term 은 expectation value of H' in the unperturbed state이다.

4.2.1 Relativistic correction

Hydrogen atom 의 electron 이 충분히 빨라지면 (광속 c 에 비해 무시하지 못할 정도) 운동량과 운동에너지는 다음과 같이 보정되어야 한다.³

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= m_e \mathbf{v} \quad \rightarrow \quad \mathbf{p} = \frac{m_e \mathbf{v}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \\ T &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} \quad \rightarrow \quad T = \sqrt{(m_e c^2)^2 + (\mathbf{p}c)^2} - m_e c^2 = m_e c^2 \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\mathbf{p}c}{m_e c^2}\right)^2} - 1 \right) \end{aligned}$$

위 식에서 $|\mathbf{v}| < c$ 므로, $|\lambda| \ll 1$ 인 λ 에 대해 $\sqrt{1+\lambda} \simeq 1 + \frac{1}{2}\lambda - \frac{1}{8}\lambda^2$ 임을 활용하여 운동에너지 T 를 전개하면

$$\begin{aligned} T &\simeq m_e c^2 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{p}c}{m_e c^2} \right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{\mathbf{p}c}{m_e c^2} \right)^4 \right] \\ &= \underbrace{\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}}_{\text{kinetic term}} - \underbrace{\frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3 c^2}}_{\text{relativistic correction}} \end{aligned}$$

즉, 운동에너지에 다음과 같은 새로운 term 이 더해졌음을 알 수 있다.

$$H'_{\text{rel}} = -\frac{(\mathbf{P}^2)^2}{8m_e^3 c^2} \quad (4.17)$$

³상대론적인 효과를 고려할 경우, 퍼텐셜 $V(\mathbf{x})$ 에서 운동하는 물체는 다음과 같은 운동방정식을 만족한다.

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \mathbf{v}^2/c^2}} \right) = -\nabla V(\mathbf{x})$$

그리고, 다음 Lagrangian이 해당 운동방정식을 yield한다. ($\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L}{\partial x}$)

$$L = mc^2 \left(1 - \sqrt{1 - \mathbf{v}^2/c^2} \right) - V(\mathbf{x})$$

o) Lagrangian을 Legendre Transform 해서 ($H = \sum_i \dot{x}_i p_i - L$) Hamiltonian을 구하면 다음과 같다.

$$H = \left(\sqrt{m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2} - mc^2 \right) + V(\mathbf{x})$$

위 Hamiltonian의 parenthesis 부분 o) kinetic energy term에 해당한다.

상대론적인 효과로 인해 Energy level이 달라지는 정도는 $\langle H'_{\text{rel}} \rangle = \langle nlm_l | H'_{\text{rel}} | nlm_l \rangle$ 을 계산하면 된다. 먼저, H'_{rel} 을 rewrite 해보자. 여기서 Bohr Radius $a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ 를 활용하겠다.

$$\begin{aligned} H'_{\text{rel}} &= -\frac{(\mathbf{P}^2)^2}{8m_e^3 c^2} \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m_e} \right)^2 \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left(H_0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)^2 \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left(H_0 + \frac{\hbar^2}{m_e a} \frac{1}{r} \right)^2 \end{aligned} \quad (4.18)$$

$\langle H'_{\text{rel}} \rangle = \langle nlm_l | H'_{\text{rel}} | nlm_l \rangle$ 을 계산해보겠다.

$$\begin{aligned} \langle H'_{\text{rel}} \rangle &= \left\langle -\frac{1}{2m_e c^2} \left(H_0 + \frac{\hbar^2}{m_e a} \frac{1}{r} \right)^2 \right\rangle \\ &= -\frac{E_n^{02}}{2m_e c^2} - \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2 a} E_n^0 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle - \frac{\hbar^4}{2m_e^3 c^2 a^2} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \end{aligned} \quad (4.19)$$

여기서, $\langle \frac{1}{r} \rangle$ 와 $\langle \frac{1}{r^2} \rangle$ 를 계산하는 것이 큰 문제로 남아있다. 이 계산 과정은 Chapter 7에 넣었으니 읽어보시길 바란다. 아무튼,

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2 a}, \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{(l+1/2)n^3 a^2}$$

을 식 (3.19)에 대입해서 정리하자. 두번째 줄에서 세번째 줄로 넘어갈 때, $E_n^0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e a^2} \frac{1}{n^2}$ 을 활용할 것이다.

$$\begin{aligned} \langle H'_{\text{rel}} \rangle &= -\frac{E_n^{02}}{2m_e c^2} - \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2 a} E_n^0 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle - \frac{\hbar^4}{2m_e^3 c^2 a^2} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \\ &= -\frac{E_n^{02}}{2m_e c^2} - \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2 a} E_n^0 \left(\frac{1}{n^2 a} \right) - \frac{\hbar^4}{2m_e^3 c^2 a^2} \left(\frac{1}{(l+1/2)n^3 a^2} \right) \\ &= -\frac{E_n^{02}}{2m_e c^2} - \frac{E_n^0}{2m_e c^2} (-4E_n^0) - E_n^{02} \left(\frac{4n}{l+1/2} \frac{1}{2m_e c^2} \right) \\ &= \boxed{-\frac{E_n^{02}}{2m_e c^2} \left(\frac{4n}{l+1/2} - 3 \right)} \end{aligned} \quad (4.20)$$

식(4.20)의 결과를 이용하여 계산한 뒤 표 4.3에 principle quantum number n 과 angular quantum number l 에 따른 $\langle H'_{\text{rel}} \rangle$ 의 값을 E_n^0 과 함께 정리하였다.

Table 4.3: n, l 에 따른 relativistic correction 을 정리한 표 ($\langle H'_{\text{rel}} \rangle$)

n	l	E_n^0 (eV)	$\langle H'_{\text{rel}} \rangle$ (eV)	$ \langle H' \rangle / E_n^0 $
1	0	-13.6	-9.05×10^{-4}	6.65×10^{-5}
2	0	-3.4	-5.88×10^{-4}	1.73×10^{-4}
2	1	-3.4	-1.06×10^{-4}	3.11×10^{-5}
3	0	-1.51	-4.22×10^{-4}	2.79×10^{-4}
3	1	-1.51	-1.01×10^{-4}	6.65×10^{-5}
3	2	-1.51	-3.62×10^{-5}	2.40×10^{-5}

4.2.2 Spin-orbit coupling

전자는 원자핵(양성자)주위를 공전한다. 전자 입장에서는 역으로 양성자가 전자 주위를 공전하는 거처럼 느낀다. (전자 입장에서) 공전하는 양성자는 magnetic field 를 발생시킨다. 자전하고(spinning) 있는 전자는 magnetic moment 을 형성하므로($\mu = \frac{e}{m_e} \mathbf{S}$) magnetic field과 interact 한다. 이러한 Spin-Orbit Interaction 에 의해서 Hamiltonian 에 더해지는 term 은 식(4.21)와 같다. Magnetic field 가 걸려있을때 Hamiltonian에 저런 μ 와 \mathbf{B} 가 대적한 term이 붙는 것에 대해서는 본 책의 section 1.3에 설명을 실었으니 궁금하시면 읽어보아라.

$$H'_{SO} = -\mu \cdot \mathbf{B} = -\frac{e}{m_e} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (4.21)$$

다음으로 \mathbf{B} 를 살펴보자. 앞서 말했듯이 electron의 입장에서 보면 전하를 띤 proton은 electron의 주위를 공전하여 전류를 생성하고 이 전류는 magnetic field 를 생성한다. Biot-Savart Law 를 사용하여 magnetic field 를 계산해보자. 먼저, Biot-Savart Law 는 다음과 같다.⁴

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 c^2} \int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{x}') \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{r^3} d\mathbf{x}'^3 \quad (4.22)$$

위 식에서 $\mathbf{x} - \mathbf{x}' = \mathbf{r}$ 이라고 두었다. Proton을 점 입자라고 생각하면 proton의 공전 속도 \mathbf{v} 에 대해서 전류밀도를 $\mathbf{j} = e\mathbf{v}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ 라고 볼 수 있다. 그러면

$$\mathbf{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{m_e}{m_e c^2} \frac{e\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3}$$

인데 우변의 분자에서 $m_e \mathbf{v} \times \mathbf{r}$ 는 전자의 orbital angular momentum \mathbf{L} 과 관련이 있다고 볼 수 있다. 즉,

$$\mathbf{B} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2 r^3} \mathbf{L} \quad (4.23)$$

이다. 식(3.21), (3.23)을 종합하면,

$$H'_{SO} = -\mu \cdot \mathbf{B} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

(4.24)

이제, $\langle H'_{SO} \rangle$ 을 계산할 차례이다. 그러나, 여기서 expectation value를 계산할 때 orbital angular momentum 과 spin 의 eigenstate 인 $|nlsm_l m_s\rangle$ 를 사용하는데 문제점이 있다. $|nlsm_l m_s\rangle$ 는 \mathbf{L} , \mathbf{S} 의 eigenstate 인데, \mathbf{L} , \mathbf{S} operator 들은 H'_{SO} 의 $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ 과 commute 하지 않는다.⁵ 그러므로 여기서 total angular momentum $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ 를 정의하고 expectation value 를 계산할 때, 다음의 eigenvalue problem 을 만족하는 state ket $|njlsm_j\rangle$ 를 이용할 것이다.

$$\mathbf{J}^2 |njlsm_j\rangle = j(j+1)\hbar^2 |njlsm_j\rangle \quad (4.25a)$$

$$\mathbf{L}^2 |njlsm_j\rangle = l(l+1)\hbar^2 |njlsm_j\rangle \quad (4.25b)$$

$$\mathbf{S}^2 |njlsm_j\rangle = s(s+1)\hbar^2 |njlsm_j\rangle \quad (4.25c)$$

또한, H'_{SO} 의 $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ 을 다시 적고 새로운 eigenvalue problem 을 적으면 다음과 같다.

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2}[(\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2] = \frac{1}{2}[\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2] \quad (4.26a)$$

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} |njlsm_j\rangle = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] |njlsm_j\rangle \quad (4.26b)$$

⁴여기서 $\mu_0 \epsilon_0 = \frac{1}{c^2}$ 를 이용했다.

⁵Ehrenfest Theorem 을 보면, 이 system 에서 $H = H_0 + H'_{SO}$ 와 commute 하지 않는 operator 들은 특정 state 에서의 expectation value 가 time dependancy를 가진다. $\mathbf{J}^2, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}, \mathbf{L}, \mathbf{S}$ 은 기본적으로 H_0 과 commute 하나 이 중에서 $\mathbf{J}^2, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}$ 만이 H'_{SO} 과 commute 한다. Chapter 7. 에 계산 과정과 설명을 넣었다.

Table 4.4: n, j, l 에 따른 $\langle H'_{SO} \rangle$ 의 값을 정리한 표

n	l	j	$\langle H'_{SO} \rangle$ (eV)	$ \langle H' \rangle / E_n^0 $
1	0	1/2	0	0
2	1	1/2	-3.016×10^{-5}	2.218×10^{-6}
		3/2	1.508×10^{-5}	1.109×10^{-6}
	3	1	-8.927×10^{-6}	6.564×10^{-7}
		3/2	4.469×10^{-6}	3.286×10^{-7}
3	2	3/2	-2.681×10^{-6}	1.971×10^{-7}
		5/2	1.787×10^{-6}	1.314×10^{-7}

계속해서 $\langle H'_{SO} \rangle$ 을 계산하면,

$$\begin{aligned}\langle H'_{SO} \rangle &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} \langle njls | \frac{1}{r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} | njls \rangle \\ &= \frac{e^2 \hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \langle njls | \frac{1}{r^3} | njls \rangle\end{aligned}\quad (4.27)$$

위 식에서 $\langle \frac{1}{r^3} \rangle$ 을 계산해야하는 상황에 이르렀으나, 이 과정은 Griffiths 저 양자역학 2e의 6.34번 문항으로 참고하시라. 음마까지 타이핑 하려다가 자쳤다 헤헤 아무튼,

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)n^3 a^3} \quad (4.28)$$

이다. 식(4.28)을 (4.27)에 대입하면

$$\begin{aligned}\langle H'_{SO} \rangle &= \frac{ne^2 \hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{l(l+1/2)(l+1)n^4 a^2} \\ &= \boxed{\frac{(E_n^0)^2}{m_e c^2} \left[\frac{n\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}}{l(l+1/2)(l+1)} \right]} \\ &= \frac{(13.6\text{eV})^2}{0.511\text{MeV}} \left[\frac{n\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}}{l(l+1/2)(l+1)} \right] \frac{1}{n^4} \\ &= 3.62 \times 10^{-4} \text{eV} \times \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{l(l+1/2)(l+1)} \right] \frac{1}{n^3}\end{aligned}\quad (4.29)$$

식 (4.29)을 통해 Spin-orbit coupling 에 의해 Energy Level 이 변한 정도가 $E_n^0 = -13.6\text{eV} \times \frac{1}{n^2}$ 에 비해 매우 작음을 확인할 수 있다. 이전 subsection 과 마찬가지로 quantum number n, j, l 에 따른 $\langle H'_{SO} \rangle$ 의 값을 표 4.4에 넣었다. 전자는 spin $\frac{1}{2}$ particle 이므로 $s(s+1) = 3/4$ 임을 이용하였다.⁶

4.3 Zeeman Effect

○ section 은 hydrogen atom 에 uniform한 magnetic field 를 걸었을 때 electron의 Energy level에 어떤 변화가 있는지에 관심을 두고 있다. 필자는 다시, 여러분들이 section 1.3을 읽고 오기를 권장한다. section 3.2.2 Spin-orbit coupling 에서 살펴본 내용을 다시 생각해보자. nucleus 를 공전하는 electron 입장에서 생각해 보면, electron 은 정지해 있는거 같고 양(+)전하를 띤 nucleus 가 electron 주위를 공전하는 거 같아서 electron 은 식(4.23)과 같은 magnetic field를 느낀다(이하 \mathbf{B}_{int}). 만약 외부에서 가해진 magnetic field가 식(4.23)의 field 보다 세면, spin-orbit coupling 에 의한 효과가 더 우세할 것이며(Weak-Field Zeeman Effect), 외부에서 가해진 field 가 \mathbf{B}_{int} 보다 더 세다면 이 field에 의한 효과가 spin-orbit coupling

⁶Addition of angular momentum 에서 $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ 이면 $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ 이다. 여기서 $j_1 = l, j_2 = s$ 이므로 주어진 l 값에 따라 가능한 j 의 범위는 $|l - 1/2| \leq j \leq l + 1/2$ 이다. 또한, $l = 0$ 인 level 에서는 j 가 가질 수 있는 값이 $j = s = 1/2$ 밖에 없다. 이 level 에서 $j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - 0 \cdot 1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} = 0$ 이므로 표 4.4에서 $l = 0$ 인 level은 생략하였다.

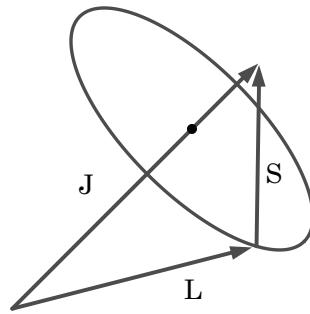


Figure 4.1: $B_{ext} \ll B_{int}$ 인 경우, \mathbf{J} , \mathbf{L} , \mathbf{S} 의 관계를 나타낸 그림

에 의한 효과보다 더 우세할 것이다 (Strong Field Zeeman, Pachen-Back Effect). magnetic field 의 세기는 4T을 기준으로 나눈다. 외부에서 가해준 magnetic field 를 \mathbf{B}_{ext} 라고 하겠다.

4.3.1 Weak-Field Zeeman Effect

먼저, $B_{ext} \ll B_{int}$ 인 경우부터 살펴보겠다.

$$H'_Z = \frac{e}{2m_e} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}_{ext} = \frac{e}{2m_e} (\mathbf{J} + \mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}_{ext} \quad (4.30)$$

이다. 이 상황에서 H'_Z 보다 식 (4.24)의 H'_{SO} 에 의한 효과가 더 dominant 하다. 또한, subsection 3.2.2 에서처럼 energy eigen ket 을 $|njlsm_j\rangle$ 를 사용시, $\mathbf{J}^2, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}$ 은 conserved 되고, \mathbf{L}, \mathbf{S} 의 expectation value 는 time dependancy 를 가지고 있다. $\mathbf{J}, \mathbf{L}, \mathbf{S}$ 의 관계를 그림으로 나타내면 다음과 같다. 그림에서 $\mathbf{J}, \mathbf{L}, \mathbf{S}$ 세 벡터의 크기가 일정하기 유지된다. \mathbf{J} 는 방향까지 일정한 반면, \mathbf{L}, \mathbf{S} 는 방향이 시간에 따라 바뀌면서 운동하고 있게 된다. \mathbf{L} 벡터는 \mathbf{J} 의 시작점에서 시작하여 그림상의 원, 혹은 \mathbf{S} 의 시작점을 가리키고 있고, \mathbf{S} 는 \mathbf{J} 의 끝을 가리키고 있는 모양이다. 식(4.30)에서 H'_Z 는 \mathbf{S} 의 z성분을 포함하는데 spin 의 eigenstate 를 사용해서 $\langle H'_Z \rangle$ 을 계산하면, 시간에 따라 값이 변하는 S_z 때문에 $\langle H'_Z \rangle$ 도 시간에 따라 변하게 되어, 이 결과는 time-independent perturbation 의 범위에서 벗어나게 된다. 그러므로, 이 문제를 해결하기 위해서 다음과 같이 \mathbf{S} 의 average 값을 \mathbf{J} 에 내린 projection 으로 정의한다.

$$\mathbf{S}_{avg} = \mathbf{J} \frac{(\mathbf{S} \cdot \mathbf{J})}{\mathbf{J}^2} \quad (4.31)$$

여기서, $\mathbf{L} = \mathbf{J} - \mathbf{S}$ 이고, $\mathbf{L}^2 = \mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - 2\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}$ 이므로

$$\begin{aligned} (\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}) |njlsm_j\rangle &= \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2) |njlsm_j\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)] |njlsm_j\rangle \end{aligned} \quad (4.32)$$

임을 알 수 있다. 계속해서 식을 적으면

$$\begin{aligned} \langle njlsm_j | (\mathbf{J} + \mathbf{S}_{avg}) \cdot \mathbf{B}_{ext} | njlsm_j \rangle &= \langle njlsm_j | \mathbf{J} \left(1 + \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{J}^2} \right) \cdot \mathbf{B}_{ext} | njlsm_j \rangle \\ &= \langle njlsm_j | \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}_{ext} \left[1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)} \right] | njlsm_j \rangle \\ &= m_j \hbar B_z \left[1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)} \right] \end{aligned} \quad (4.33)$$

식(4.33)의 square braket 안에 있는 term 은 Landé g-factor g_j 라고 한다. 또한 Bohr magneton $\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e}$ 을 정의하면 $\langle H'_Z \rangle$ 을 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\langle H'_Z \rangle_{|nlsm_j\rangle} = \mu_B g_j B_Z m_j \quad (4.34)$$

Bohr magnetron 은 크기가 $\mu_B = 5.488 \times 10^{-5}$ eV/T 이고, Landé g-factor g_j 의 값은 다음의 표에 정리하여 담았다.

Table 4.5: j, l 에 따른 Landé g-factor g_j 의 값을 정리한 표

l	j	g_j
0	1/2	3
1	1/2	1/3
	3/2	5/3
2	3/2	3/5
	5/2	7/5
3	5/2	5/7
	7/2	9/7

4.3.2 Strong-Field Zeeman Effect

$B_{ext} \gg B_{int}$ 이면, 즉, $|\mathbf{B}_{ext}| > 4T$ 이면, electron의 energy level splitting 은 spin-orbit coupling 에 의한 효과보다 external magnetic field 에 의한 효과를 더 많이 받게 된다(Paschen-Back effect). Week field effect 에서와 달리, 4T 보다 센 magnetic field 가 z 방향으로, uniform 하게 걸리면, H'_{SO} 보다 $H'_Z = \frac{e}{2m}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}_{ext}$ 를 사용하는게 더 좋다. $H = H_0 + H'_Z$ 와는 $L_z, S_z, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2$ 가 commute 하고, \mathbf{J}^2 하고는 commute 하지 않으므로, total angular momentum 의 eigenstate $|nlsm_j\rangle$ 을 사용하면, $\langle H'_Z \rangle$ 가 time dependancy 를 가지게 된다. 그러므로, strong field Zeeman effect 에서는 $|nlsm_l m_s\rangle$ 을 사용하는것이 좋다. 이제, $\langle H'_Z \rangle$ 는 매우 간단히 계산될 것이다.

$$\begin{aligned} \langle H'_Z \rangle &= \left\langle \frac{e}{2m}(L_z + 2S_z)B_z \right\rangle \\ &= \frac{e\hbar}{2m_e}(m_l + 2m_s)B_z \end{aligned} \quad (4.35)$$

또한, 해당 state에서 $\langle H'_{SO} \rangle$ 를 계산하면 다음과 같이 나온다.

$$\begin{aligned} \langle H'_{SO} \rangle &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \right\rangle \\ &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} [L_z S_z + \frac{1}{2}(L_+ S_- + L_- S_+)] \right\rangle \\ &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} L_z S_z \right\rangle \\ &= \frac{e^2 \hbar^2 m_l m_s}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)n^3 a^3} \end{aligned} \quad (4.36)$$

4.4 Problems

1. The Hamiltonian matrix for a two-state system can be written as

$$H = \begin{pmatrix} E_1^0 & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & E_2^0 \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

- (a) Obtain the energy eigenfunctions ϕ_1^0 and ϕ_2^0 for the unperturbed problem ($\lambda = 0$).
 - (b) Solve the problem for the Hamiltonian (4.37) *exactly* to find the eigenvalue E_1 and E_2 , and the energy eigenstates $|\psi_1\rangle$ and $|\psi_2\rangle$.
 - (c) Assume that $\lambda\Delta \ll |E_1^0 - E_2^0|$, solve the same problem by using formalism of time-independent perturbation theory up to the second order of λ .
 - (d) Expand the energy eigenvalues E_1 and E_2 obtained at (b) up to second order of λ , and compare the result obtained at (c).
-

2. Let us consider a 1-dimensional simple harmonic oscillator of the Hamiltonian

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}X^2 \quad (4.38)$$

and a linear perturbation of the perturbing Hamiltonian

$$H' = \lambda F_0 x \quad (4.39)$$

- (a) Find the approximate ground energy for the Hamiltonian $H = H_0 + H'$ to the second order of λ using the time-independent perturbation theory.
 - (b) Find the Energy eigenvalue of Hamiltonian $H = H_0 + H'$ *exactly*, and compare the result obtained at (a).
-

3. Hyperfine structure Since proton and electron spin, both of them themselves constitutes a magnetic dipole. Here, magnetic moment of proton is much smaller ($\frac{g_p e}{2m_{proton}} |\mathbf{S}_p| \ll \frac{e}{m_{electron}} |\mathbf{S}_e|$) because mass on the denominator is much larger than electron.

- (a) According to classical electrodynamics, when there is a dipole $\boldsymbol{\mu}$, there is a vector potential

$$\mathbf{A}_{dip}(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\boldsymbol{\mu} \times \hat{r}}{r^2} \quad (4.40)$$

Using vecor potential given in (4.40), derive the magnetic field produced by magnetic dipole.

⁷Answer:

$$\mathbf{B}_{dip}(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3(\boldsymbol{\mu} \cdot \hat{r})\hat{r} - \boldsymbol{\mu}}{r^3} + \frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu} \delta^3(\mathbf{x}) \right] \quad (4.41)$$

- (b) At (b), regard $\boldsymbol{\mu}$ as moment formed by proton ($\frac{g_p e}{2m_{proton}}$). By plugging in magnetic field of (4.41) in to $H'_{hf} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_{dip}$, we have

$$H'_{hf} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \frac{[3(\mathbf{S}_p \cdot \hat{r})(\mathbf{S}_e \cdot \hat{r}) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e]}{r^3} + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3m_p m_e} \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \delta^3(\mathbf{x})$$

⁷You might be unfamiliar with delta term. You may just derive the term except delta one. For spinning spining sphere, which is uniformly charged, magnetic field near the sphere is $\mathbf{B} = \frac{2\mu_0}{3} \mathbf{M}$. If its size is negligibly small, and charge is infinitely big, magnetization goes $\mathbf{M} = \boldsymbol{\mu} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ where \mathbf{x}' is position of magnetic dipole.

Calculate energy splitting in ground state ($n = 1$), for spin triplet state and spin singlet state.

Answer:

$$\langle H'_{fs} \rangle = \frac{4g_p\hbar^4}{3m_p m_e^2 c^2 a^4} \begin{cases} +1/4, & (\text{triplet}) \\ -3/4 & (\text{singlet}) \end{cases}$$

4. Consider a spin-1 particle (with no orbital degrees of freedom). Let

$$H = AS_z^2 + B(S_x^2 - S_y^2)$$

where S_i are 3×3 spin matrices, and $A \gg B$. Treating the B term as a perturbation,

- (a) Find the eigenstates of $H^0 = AS_z^2$.
 - (b) Calculate the energy shifts to first order in B .
-

5. Let's consider Hamiltonian operator of a 1-dimensional simple harmonic oscillator.

$$H^0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}X^2$$

When particle is in relativistic motion, Hamiltonian is written as

$$H = (\sqrt{P^2c^2 + m^2c^4} - mc^2) + \frac{m\omega^2}{2}X^2$$

When particle moves much slower than speed of light, difference between H and H_0 becomes

$$H - H_0 = H' = \sqrt{P^2c^2 + m^2c^4} - mc^2 - \frac{P^2}{2m} = -\frac{P^4}{8m^3c^2} + \frac{P^6}{16m^5c^4} + \dots$$

Find first order energy $E_n^1 = \langle n^0 | H' | n^0 \rangle$ to forth order of P , and then compute $|E_n^1/E_n^0|$ when $\omega = 10^{10} \text{ sec}$.

6. Prove the Thomas-Reiche-Kuhn sum rule

$$\sum_{n'} (E_{n'} - E_n) |\langle n' | X | n \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}$$

where $|n\rangle$ and $|n'\rangle$ are eigenstates of $H(X, P) = \frac{P^2}{2m} + V(X)$.

CHAPTER 5

WKB Method

5.1 Classical Quantum Theory

이 장은 송희성 양자역학을 많이 참조하였다. Bohr는 그의 원자 모델에서 두가지 가정을 하였다.

1. 전자는 원자핵 주변을 Coulomb 힘을 받으며 원운동한다. 핵의 전하를 $-Ze$ 라 할 때 다음이 성립한다.

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2} \quad (5.1)$$

2. 전자의 각운동량은 \hbar 의 정수배이다. Bohr는 전자가 이러한 원궤도를 만족하면 안정 상태이기 때문에 가속을 받고 있어도 전자파를 방출하지 않는다고 생각하였다. 이를 식으로 쓰면

$$mvr = n\hbar \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (5.2)$$

위의 두 식을 이용하여 v 와 r, E 를 구하는 과정은 고등학교 화학시간에도 했던 계산이므로 이상은 생략한다.

여기부터는 좀 더 세련된 가정을 해보자. 고전역학에서 비슷한 끌인 중력에서 배웠듯이, 전자는 Coulomb 힘을 받고 일반적으로 타원운동을 할 것이다. 이것을 Wilson과 Sommerfeld는 다음과 같은 가정을 했다.

$$\oint p_i dq_i = nh \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \text{(not a sum of i's)} \quad (5.3)$$

물론 여기서 q_i 와 p_i 는 각각 generalized coordinate 와 그 conjugate momentum이다. 뭔가 생긴계 action angle variable에서 본 것과 비슷한 느낌이 온다. 혼자 조금 더 생각해 보는 것도 좋을 것이다. 이것으로 몇 가지 계산을 해보자.

Bohr model Lagrangian은 다음과 같다.

$$L = \frac{1}{2}mr^2\dot{\phi}^2 + \frac{Ze^2}{r} \quad (5.4)$$

$L \equiv \phi$ 를 cyclic 변수로 가지므로 p_ϕ 는 상수이다. 따라서 Wilson-Sommerfeld 양자화 조건 (5.3)에서

$$\oint p_\phi d\phi = nh \quad (5.5)$$

$$p_\phi 2\pi = nh \quad (5.6)$$

$$p_\phi = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

따라서 각운동량이 \hbar 의 정수배가 된다는 동일한 가정을 하게 된다.

Ellipse orbit 고전역학에서 이미 풀었듯이, 구심력 문제는 2차원평면문제로 옮길 수 있으며 다음의 Lagrangian

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) + \frac{Ze^2}{r} \quad (5.7)$$

에서 계산하면, (Goldstein 3.7 Kepler Problem 단원에 자세한 계산이 있다. 모든 notation은 거기서 가져왔다. $l \rightarrow p_\phi$ 로, $k \rightarrow Ze^2$ 로, $\theta - \theta' \rightarrow \phi - \pi$ 로(어차피 π 는 위상차이라서 상관없다.), $a \rightarrow$ 바꾸면 된다. Goldstein의 eccentricity e 를 여기서는 ε 로 표기한다.)

$$u = \frac{1}{r}$$

$$p_\phi = mr^2\dot{\phi}$$

$$mr^2d\phi = ldt \quad (5.8)$$

$$\begin{aligned} \dot{r} &= \dot{u}/u = \frac{d\phi}{dt} \frac{d}{d\phi} \left(\frac{1}{u} \right) \\ &= \frac{p_\phi}{mr^2} \frac{d}{d\phi} \left(\frac{1}{u} \right) \\ &= -\frac{p_\phi}{m} \frac{du}{d\phi} \end{aligned} \quad (5.9)$$

$$p_r = m\dot{r} = -p_\phi \frac{du}{d\phi}$$

$$dr = -\frac{1}{u^2} du \quad (5.10)$$

$$\varepsilon^2 = 1 + \frac{2p_\phi^2}{mZ^2e^4}E \quad (< 1)$$

$$(5.11)$$

를 얻는다. 고전역학하기 싫은 사람들은 그냥 $r = 1/u$ 기억하고 적당히 넘기자.

그럼 (5.3)로부터

$$\oint p_r dr = n_r h$$

$$\oint p_\phi d\phi = kh \quad (n_r, k = 1, 2, 3, \dots)$$

이다. 그런데 p_ϕ 는 cyclic이므로, 위에서 이미 한대로

$$p_\phi = k\hbar \quad (5.12)$$

이다. 이제 p_r 계산을 하도록하자. 아 진짜 깨닳다 근데 이거 적을라고 이 단원 넣은거임 ㅎㅎ 일단 residue 기억안나면 수리물리부터 어서 보고오시고. 먼저

$$p_r dr = \frac{p_\phi}{u^2} \frac{du}{d\phi} du = \frac{p_\phi}{u^2} \left(\frac{du}{d\phi} \right)^2 d\phi \quad (5.13)$$

이다. 그런데 $u = 1/r$ 이고, r 는 (5.8)의므로,

$$\frac{du}{d\phi} = \frac{\varepsilon \sin \phi}{p_\phi^2 / Ze^2 m} \quad (5.14)$$

이다. 이제 적분과정을 세세히 적어가보자.

$$\begin{aligned} n_r h &= \oint p_r dr \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{p_\phi}{u^2} \left(\frac{\varepsilon \sin \phi}{p_\phi^2 / Ze^2 m} \right)^2 d\phi \\ &= \int_0^{2\pi} p_\phi \left(\frac{p_\phi^2 / Ze^2 m}{1 - \varepsilon \cos \phi} \right)^2 \left(\frac{\varepsilon \sin \phi}{p_\phi^2 / Ze^2 m} \right)^2 d\phi \\ &= \int_0^{2\pi} p_\phi \left(\frac{\varepsilon \sin \phi}{1 - \varepsilon \cos \phi} \right)^2 d\phi \\ &= p_\phi \int_0^{2\pi} \left(\frac{1}{(1 - \varepsilon \cos \phi)^2} \right)' (-\varepsilon \sin \phi) d\phi \\ &= p_\phi \left(\frac{-\varepsilon \sin \phi}{1 - \varepsilon \cos \phi} \Big|_0^{2\pi} + \varepsilon \int_0^{2\pi} \frac{\cos \phi}{1 - \varepsilon \cos \phi} d\phi \right) \\ &= p_\phi \varepsilon \int_0^{2\pi} \frac{\cos \phi}{1 - \varepsilon \cos \phi} d\phi \end{aligned} \quad (5.15)$$

이제 남은 적분은 residue로 해결할 것이다.

$$\begin{aligned} z &= e^{i\phi}, \quad d\phi = dz/ie^{i\phi} \\ \cos \phi &= \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} = \frac{z^2 + 1}{2z} \end{aligned} \quad (5.16)$$

로 치환하여 복소적분으로 바꾸자.

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \frac{\varepsilon \cos \phi}{1 - \varepsilon \cos \phi} d\phi &= \int_0^{2\pi} \left(-1 + \frac{1}{1 - \varepsilon \cos \phi} \right) d\phi \\ &= \oint \frac{-idz/z}{1 - \varepsilon \left(\frac{z^2 + 1}{2z} \right)} - 2\pi \\ &= -2i \oint \frac{dz}{2z - \varepsilon(z^2 + 1)} - 2\pi \\ &= 2i \oint \frac{dz}{\varepsilon z^2 - 2z + \varepsilon} - 2\pi \end{aligned} \quad (5.17)$$

여기서 적분 경로는 $z = e^{i\phi}$ 를 생각하면 복소평면에서 반경이 1인 원이다. pole은

$$z_1, z_2 = \frac{1}{\varepsilon} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{\varepsilon} \right)^2 - 1} \quad (5.18)$$

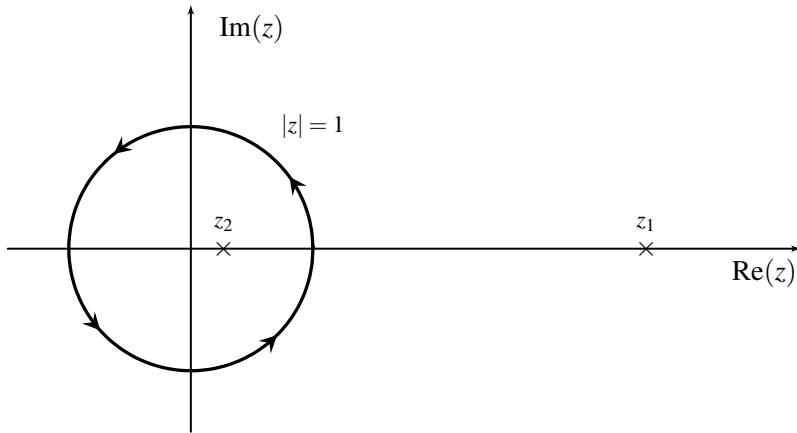


Figure 5.1: Contour for integral in Eq(5.17).

이며 이 중 원 안에 있는 pole은 z_2 뿐이므로, 적분은 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
 \int_0^{2\pi} \frac{\varepsilon \cos \phi}{1 - \varepsilon \cos \phi} d\phi &= (-2i) 2\pi i \frac{1}{2 - 2\varepsilon z} \Big|_{z=z_2} - 2\pi \\
 &= 4\pi \frac{1}{2\sqrt{1-\varepsilon^2}} - 2\pi \\
 &= 2\pi \left(\frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} - 1 \right)
 \end{aligned} \tag{5.19}$$

이다. 이를 이용하여 (5.15)를 풀면,

$$\begin{aligned}
 n_r h &= p_q 2\pi \left[\frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} - 1 \right] \\
 &= 2\pi k h \left[\frac{1}{\sqrt{-2E p_\phi^2 / Z^2 e^4 m}} - 1 \right]
 \end{aligned}$$

이를 다시 E 에 대해 정리하면,

$$\begin{aligned}
 E &= -\frac{Z^2 e^4 m}{2(k\hbar)^2} \frac{k^2}{(n_r + k)^2} \\
 &= -\frac{m Z^2 e^4}{2(n)^2 \hbar^2} \quad (n \equiv n_r + k)
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

를 얻는다. 여기서 n 은 주양자수이며, 같은 n 값에 대해 다른 k 값들이 있다는 점에서 이전에 수소원자에서 보았던 에너지준위의 degeneracy에 대한 고전양자적인 설명이 가능하다.

Harmonic Oscillator 아 이건 빼놓을 수 없지. 일단 귀찮으니까 여기부터 시작하자.

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{(2E/k)} = 1 \quad (5.21)$$

그러면 Sommerfeld quantization 조건을 통해,

$$\begin{aligned} \oint p dx &= nh \\ &= \pi \sqrt{\frac{2E}{k}} \sqrt{2Em} = 2\pi E \sqrt{\frac{m}{k}}, \\ E_n &= \sqrt{\frac{k}{m}} \hbar n = n\hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (5.22)$$

우리가 양자역학 1에서 배웠던 결과와 $\frac{1}{2}$ 만큼 차이가 난다. 역시 뭔가 문제가 있는 모델인 것 같다.

마지막으로 de Broglie에 대해 짧게 복습하고 이 section을 끝낸다. 다들 교양서적이나 고딩때 배워서 잘 알겠지만, 정지 질량이 0인 photon에 대해 다음이 성립한다.

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (5.23)$$

이걸 다시 Sommerfeld quantization 조건에 넣으면,

$$\begin{aligned} \oint \frac{h}{\lambda} dq &= nh \\ \oint dq &= n\lambda \end{aligned} \quad (5.24)$$

즉 궤도의 길이가 전자의 파장의 정수배이다. 이러한 고전양자화에 대한 고찰은 semiclassical method 중 하나인 WKB에 대한 이해를 더욱 자연스럽게 하도록 도울 것이다.

5.2 WKB Formulation

WKB가 무엇인가? 그거슨 Wentzel, Kramer, Brillouin(고체물리학 할 때 많이 볼 이름들이다.)의 앞자를 딴 것이다. 치졸한 네덜란드 코쟁이들은 KWB라고, 프랑스 양념들은 BWK, 가장 양심없는 England 놈들은 JWKB (Jeffreys 넣음) 라고 부른다고 한다. 이 얼마나 끔찍한 상상이니. 뭐길래 이렇게 이름이 많은가? time independent Schrödinger equation을 근사적으로 푸는 테크닉이다. 이걸로 많은 계산들이 행해져왔으니, 학부때 한번 진득히 배워보는 것은 아주 좋다. 먼저 말하지만, path integral을 공부했다면 상카 교재(WKB단원에 짧게)를 좀 보면 좋다. 여기 앞부분 formulation은 상카의 것을 따왔다. 그리피스의 접근은 그대로 나쁘진 않지만.

먼저 $p(x)$ 를 다음과 같이 두면, 이것이 constant V 의 solution과 연관이 있다는 것은 이미 모두 알고 있을 것이다.

$$p = [2m(E - V)]^{1/2}, \quad \psi(x) = \psi(0)e^{\pm ipx/\hbar} \quad (5.25)$$

물론 이는 $E > V$ 일 때이며, $E < V$ 일 때는,

$$\psi(x) = Ae^{\pm\kappa x}, \quad \kappa \equiv \sqrt{2m(V-E)}/\hbar \quad (5.26)$$

가 되는것을 모두 기억할 것이다. 그런데, 만약 V 가 constant가 아니지만 상당히 느리게 변한다면 어떨까? 즉,

$$\lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)} = \frac{2\pi\hbar}{\{2m[E - V(x)]\}^{1/2}} \quad (5.27)$$

에 대해, 이 λ 가 x 에 대해 아주 느리게 변한다는 것이다. 그럼 이때 wave는

$$\psi(x) = \psi(0) \exp \left[\pm(i/\hbar) \int_0^x p(x') dx' \right] \quad (5.28)$$

의 꼴이 될 것이다. 이런 조건은 λ 가 천천히 변한다, 즉,

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \quad (5.29)$$

는 조건에서 잘 성립할 것이다. 너무 야매로 한 것 같으니까 좀 더 체계적으로 해보자. 그리피스 본문에서는 다르게 했으며(그래봤자 예제에는 다 있다...), 여기서는 양카의 접근을 따른다.

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \right\} \psi(x) = 0 \quad (5.30)$$

혹은,

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2} p^2(x) \right] \psi(x) = 0 \quad (5.31)$$

여기에서 ansatz를 고르면,

$$\psi(x) = \exp[i\phi(x)/\hbar] \quad (5.32)$$

여기서 ϕ 를 실수라고 한 적이 없으므로, loss of generality는 없다. 이를 대입하면 다음을 얻는다.

$$-\left(\frac{\phi'}{\hbar}\right)^2 + \frac{i\phi''}{\hbar} + \frac{p^2(x)}{\hbar^2} = 0 \quad (5.33)$$

이제 여기가 재미있는 시도이다. 우리는 이미 \hbar 가 엄청나게 작은 상수라는 것을 알고 있다.¹ 그러면 \hbar 에 대해 expansion해도 괜찮지 않을까? expansion하고 \hbar 의 같은 차수끼리 비교해도 괜찮지 않을까? 마치 time independent perturbation 할 때의 dimensionless small parameter λ 처럼. 그래서

$$\phi = \phi_0 + \hbar\phi_1 + \hbar^2\phi_2 + \dots \quad (5.34)$$

로 expansion 하자는 것이다. $\hbar \rightarrow 0$ 에서는 $\lambda = 2\pi\hbar/p \rightarrow 0$ 이므로, (5.29)에서 문자가 이미 0에 가깝다고 봐도 괜찮을 것이다. 이제 계산을 해보자. 위의 식을 대입하면,

$$\frac{-(\phi'_0)^2 + p^2(x)}{\hbar^2} + \frac{i\phi''_0 - 2\phi'_1\phi'_0}{\hbar} + O(\hbar^0) = 0 \quad (5.35)$$

이다. $1/\hbar^2$ 항 먼저 보면,

$$\phi_0(x) = \pm \int^x p(x') dx' \quad (5.36)$$

가 나올 것이다. 이때 ψ 는

$$\psi(x) = A \exp \left[\pm(i/\hbar) \int^x p(x') dx' \right] \quad (5.37)$$

가 되어, 위에서 대충 만들어본 것과 비슷하다. 이제 $1/\hbar$ 항을 계산해보자.

$$\begin{aligned} i\phi'_0 &= 2\phi''_1\phi'_0 \\ \frac{\phi''_0}{\phi'_0} &= -2i\phi'_1 \\ \ln \phi'_0 &= -2i\phi_1 + c \end{aligned} \quad (5.38)$$

¹ $\hbar \equiv 1.05457 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

$$\phi_1 = +i \ln (\phi'_0)^{1/2} + c/2i = i \ln p^{1/2} + \tilde{c} \quad (5.39)$$

이제 ϕ_2 까지만 살려서 ψ 를 써보면,

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{i\phi(x)/\hbar} = A e^{-\ln[p(x)]^{1/2}} \exp \left[\pm \left(\frac{i}{\hbar} \right) \int^x p(x') dx' \right] \\ &= \frac{A}{[p(x)]^{1/2}} \exp \left[\pm (i/\hbar) \int^x p(x') dx' \right] \end{aligned} \quad (5.40)$$

뭐 A 정도야 그냥 normalization constant 정도 될 것이다. 심기 불편한 이들을 위해 다시 적어주면 아래와 같이 될 것이다.

$$\psi(x) = \psi(x_0) \left[\frac{p(x_0)}{p(x)} \right]^{1/2} \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' \right] \quad (5.41)$$

여기서 확률 해석을 잠깐 해보자.

$$|\psi(x)|^2 \cong \frac{|A|^2}{p(x)} \quad (5.42)$$

그리피스 2e 1단원 예제 1.1을 보면 고전적인 해석과 비슷함을 느낄 수 있을 것이다. 관련 예제를 풀어보고싶으면 그냥 그리피스를 펴도록 하자.

다음에 보여줄 formulation은 나중에 scattering 할 때도 비슷하게 등장하는 것이다. 막상 wkb단원에서 이걸 이용해 계산할 일은 별로 없으니 독자들은 그냥 한번 눈요기만 하길 바란다. (5.31)에서, 이 미분방정식의 가장 일반적인 해는 다음과 같다.

$$\psi(x) = C \exp \left(\pm i \int_a^x dx \sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2} \pm i \frac{d}{dx} \sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2} \pm i \frac{d}{dx} \sqrt{\dots}}} \right) \quad (5.43)$$

왜인지 한번 증명이나 하자. 일단 C 는 무시하고,

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= \frac{d}{dx} e^{\pm i \int dx \sqrt{\dots}} \\ &= e^{\pm i \int dx \sqrt{\dots}} \cdot \left(\pm i \sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2} \pm i \frac{d}{dx} \sqrt{\dots}} \right) \end{aligned} \quad (5.44)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} e^{\pm i \int dx \sqrt{\dots}} \right) \\ &= e^{\pm i \int dx \sqrt{\dots}} \cdot \left(\pm i \sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2} \pm i \frac{d}{dx} \sqrt{\dots}} \right)^2 \\ &\quad + e^{\pm i \int dx \sqrt{\dots}} \cdot \left(\pm i \frac{d}{dx} \sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2} \pm i \frac{d}{dx} \sqrt{\dots}} \right) \\ &= e^{\pm i \int dx \sqrt{\dots}} \cdot \left\{ -\frac{p^2}{\hbar^2} \mp i \frac{d}{dx} \sqrt{\dots} \pm i \frac{d}{dx} \sqrt{\dots} \right\} \\ &\quad - \frac{p^2}{\hbar^2} \psi(x) \end{aligned} \quad (5.45)$$

이제 $\sqrt{-}$ 안에 있는 둘의 절댓값 차이가 크게 난다면, 즉,

$$\frac{d}{dx} \sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2} + i \frac{d}{dx} \sqrt{\dots}} \ll \frac{p^2}{\hbar^2} \quad (5.46)$$

이라면 $\sqrt{-}$ 안에 있는 값을 근사하여 전개할 수 있다.

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2} \pm i \frac{d}{dx} \sqrt{\dots}} &\simeq \frac{p}{\hbar} \sqrt{1 \pm \frac{\hbar^2}{p^2} i \frac{d}{dx} \sqrt{\frac{p^2}{\hbar^2}}} \\ &\simeq \frac{p}{\hbar} \left(1 \pm \frac{1}{2} i \frac{\hbar^2}{p^2} \cdot \frac{d}{dx} \frac{p}{\hbar} \right) \\ &= \frac{p}{\hbar} \pm \frac{1}{2p} i \frac{dp}{dx} \\ &= \frac{p}{\hbar} \pm \frac{1}{2} i \frac{d}{dx} (\ln p) \end{aligned} \quad (5.47)$$

를 얻으면 이것을 (5.43)에 대신 넣어보자. 그러면,

$$\begin{aligned} \psi(x) &\simeq C e^{\pm i \int \left[\frac{p}{\hbar} \pm \frac{i}{2p} \frac{dp}{dx} \right] dx} \\ &= C e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p dx} \cdot e^{-\frac{1}{2} \int \frac{dp}{p}} \\ &= \frac{C}{\sqrt{p}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p dx} \end{aligned} \quad (5.48)$$

를 얻는다.

지금까지 두 가지의 WKB formulation을 다루었다. 그리피스 WKB 단원을 보면 또 하나가 있으므로, 관심이 있는 독자는 한번 보면 괜찮겠다. 아무튼, 여러 가지를 통해 결국 우리가 계산에 당장 이용할 것은 다음 (5.49)임을 예상할 것이다.

5.3 Airy Function and Connection Formulas

그럼 우리는 $E < V$ 에서는 무엇을 써야 좋을까. 그저 $p(x)$ 가 imaginary 가 되었을 뿐이라 생각하면,

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx} \quad (5.49)$$

가 괜찮지 않을까? 이를 이용한 alpha decay에 대한 초창기 계산이 또한 킹리피스에 실려있다. 착한 독자들은 꼭 그리피스 wkb 단원을 읽어보자. 여기서 내가 다루려는 것은 그럼 $E \leq V$ 근처에서는 어떻게 써야 하는지에 대한 것이다. 먼저 편의를 위해 $x < 0$ 에서는 $E > V$ 이고, $x > 0$ 에서는 $E < V$ 라고 하자. 그럼 ψ 는 다음으로 근사된다.

$$\begin{aligned} \psi(x) &\cong \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[B e^{\frac{i}{\hbar} \int_r'' p(x') dx'} + C e^{-\frac{i}{\hbar} \int_r'^0 p(x') dx'} \right], \quad \text{if } x < 0 \\ &\cong \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} D e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'}, \quad \text{if } x > 0 \end{aligned} \quad (5.50)$$

이건 지금까지 한 것을 한번에 모아 쓴 것에 불과하다. 그다음은 potential을 근사하는 것이다.

$$V(x) \cong E + V'(0)x \quad (5.51)$$

그럼 Schrodinger equation은

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_p}{dx^2} + [E + V'(0)x] \psi_p = E\psi_p \quad (5.52)$$

혹은,

$$\frac{d^2\psi_p}{dx^2} = \alpha^3 x \psi_p, \quad \text{where } \alpha \equiv \left[\frac{2m}{\hbar^2} V'(0) \right]^{1/3} \quad (5.53)$$

여기서 다음과 같이 정의하면

$$z \equiv \alpha x \quad (5.54)$$

다음을 얻는다.

$$\frac{d^2\psi_p}{dz^2} = z\psi_p \quad (5.55)$$

근데 이게 머임?? 이 2차 미분방정식의 sol 2개가 Airy functions입니다. wow. 2차니까 두개고, 이제부터 $Ai(z)$, $Bi(z)$ 라고 쓰겠습니다. 미분방정식의 해는 $Ai(z)$, $Bi(z)$ 둘의 linear combination이 될 것이고. 그래서 $Ai(z)$, $Bi(z)$ 가 어떻게 되는 친구들인가 보면 가장 깔끔하게는 이렇게 쓰인다.

$$\begin{aligned} Ai(z) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos \left(\frac{s^3}{3} + sz \right) ds \\ Bi(z) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left[e^{-\frac{i^2}{3} + si} + \sin \left(\frac{s^3}{3} + si \right) \right] ds \end{aligned} \quad (5.56)$$

근데 이거 너무 못생겨서... 이하의 Asymptotic Forms를 사용하게 될 것이다.

$$\begin{aligned} Ai(z) &\sim \frac{1}{2\sqrt{\pi} z^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} \\ Bi(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi} z^{1/4}} e^{\frac{2}{3}z^{3/2}} \quad \text{for } z \gg 0 \end{aligned} \quad (5.57)$$

$$\begin{aligned} Ai(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \sin \left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \\ Bi(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \cos \left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \quad \text{for } z \ll 0 \end{aligned} \quad (5.58)$$

이제 할 일은 명확하다. 경계에서 (5.56)부터 (5.58)까지와 (5.50)의 계수를 비교하는 것이다. 먼저 p 부터 살펴보자.

$$p(x) \cong \sqrt{2m(E - E - V'(0)x)} = \hbar\alpha^{3/2}\sqrt{-x} \quad (5.59)$$

물론 이 운동량은 고전적으로 ‘turning point’에 해당하는 점 근처에서만 성립한다. 경계조건을 맞추는게 지금의 목표이다. $x > 0$ 에서 먼저 맞춰보자. (5.50)에 p 를 대입하면,

$$\begin{aligned} \int_0^x |p(x')| dx' &\cong \hbar\alpha^{3/2} \int_0^x \sqrt{x'} dx' = \frac{2}{3} \hbar(\alpha x)^{3/2} \\ \psi(x) &\cong \frac{D}{\sqrt{\hbar\alpha^{3/4} x^{1/4}}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \end{aligned} \quad (5.60)$$

이 나온다. 이를 (5.57)와 비교하자.

$$\psi_p(x) \cong \frac{a}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \quad (5.61)$$

계수비교를 하면 다음을 얻는다.

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha\hbar}}D, \quad \text{and} \quad b = 0 \quad (5.62)$$

좋아 이제 $x < 0$ 에서, 즉 $E > V$ 에서 한번 보자. 다시 (5.50)를 풀면

$$\begin{aligned} \int_x^0 p(x') dx' &\cong \frac{2}{3} h(-\alpha x)^{3/2} \\ \psi(x) &\cong \frac{1}{\sqrt{\hbar\alpha^{3/4}}(-x)^{1/4}} \left[Be^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} + Ce^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right] \end{aligned} \quad (5.63)$$

x 는 0보다 작으니까 이렇게 쓰는게 맞습니다. 그럼 이걸 (5.58)와 비교하면,

$$\psi_p(x) \cong \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \sin \left[\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \quad (5.64)$$

$$= \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \frac{1}{2i} \left[e^{i\pi/4} e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} - e^{-i\pi/4} e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right] \quad (5.65)$$

가 된다. 위의 둘을 비교하면 다음을 얻는다.

$$\frac{a}{2i\sqrt{\pi}} e^{i\pi/4} = \frac{B}{\sqrt{\hbar\alpha}} \quad \text{and} \quad \frac{-a}{2i\sqrt{\pi}} e^{-i\pi/4} = \frac{C}{\sqrt{\hbar\alpha}}$$

그런데 변수는 적을수록 좋다. (5.62)에서 a 대신 D 로 바꿀 수 있겠다.

$$B = -ie^{i\pi/4}D. \quad \text{and} \quad C = ie^{-i\pi/4}D \quad (5.66)$$

그럼 얻은 (5.62)와 (5.66) 둘을 connection formulas 라고 한다. 물론 어떤 사람이 나는 이거 싫다, V 를 2차까지 해야겠다 선언하면 Airy를 못쓰고 다른 hypergeometric function을 가져다 쓰면 될 수도 있겠는데 저자는 잘 모르겠다... 아무튼 얻은 귀중한 connection formulas를 가져다가 (5.50)에 다시 넣으면, classical turning point x_2 에 대해

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], & \text{if } x < x_2 \\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx' \right], & \text{if } x > x_2 \end{cases} \quad (5.67)$$

가 된다.

Potential with vertical wall and harmonic oscillator 그림5.2처럼 $x = 0$ 에는 무한페텐셜벽이 있고, $x > 0$ 에서는 harmonic oscillator처럼 근사 가능한 potential이 있다고 하자. 그럼 $x < 0$ 의 (5.67)에서, $\psi(0) = 0$ 이므로,

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{x_2} p(x) dx + \frac{\pi}{4} = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

혹은

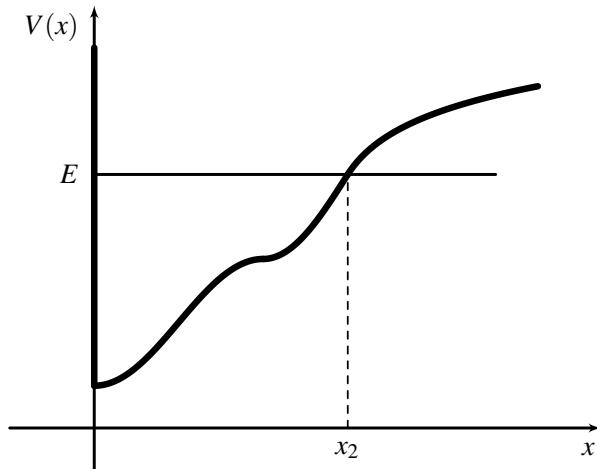
$$\int_0^{x_2} p(x) dx = \left(n - \frac{1}{4} \right) \pi \hbar \quad (5.68)$$

Sommerfeld 선생님... 당신이 옳다 말았읍니다... 그럼 나머지 부분을($x > 0$) 풀어보자. half-harmonic oscillator 라 카믄

$$p(x) = \sqrt{2m[E - (1/2)m\omega^2x^2]} = m\omega\sqrt{x_2^2 - x^2} \quad (5.69)$$

고전적으로 생각하면 당연히 x_2 는,

$$x_2 = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

Figure 5.2: Potential well with one vertical well at $x = 0$.

이다. (5.68)와 비교하여 풀면 E 에 대한 답이 나온다.

$$\int_0^{x_2} p(x)dx = m\omega \int_0^{x_2} \sqrt{x_2^2 - x^2} dx = \frac{\pi}{4} m\omega x_2^2 = \frac{\pi E}{2\omega} \quad (5.70)$$

이것과 (5.68)를 비교하면,

$$E_n = \left(2n - \frac{1}{2}\right) \hbar\omega = \left(\frac{3}{2}, \frac{7}{2}, \frac{11}{2}, \dots\right) \hbar\omega \quad (5.71)$$

와! 이건 사실 아주 정답이다. 실제로 harmonic oscillator의 해는

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (5.72)$$

이며, 여기에 $\psi(0) = 0$ 조건을 넣으면 Hermite polynomial 특성에 따라 짹수 n 이 없어진다는 사실을 기억하고 있는지는 모르겠다. 잘 기억 안나시면 (그리피스 책의) harmonic oscillator 단원에 가서 Hermite polynomial을 찾아보라.

Potential well with no vertical walls 이건 음.. 그냥 착한 어린이들은 그리피스 2e 예제 8.4를 읽으세요. 그 책에서는 위의 formulation에서 다룬 것은 x 가 증가함에 따라 V 도 증가하는 경우였는데, 오히려 감소하는 경우에는 어떨까?에 대해 다루었다. 결과만 쓰면

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi\hbar \quad \text{with } n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.73)$$

Sommerfeld 연전연승. 고전역학에서 action angle variable했던 생각도 조금 나고 그래요? 이정도면 학부때 너무 많은 걸 했어요 수고했어요 ㅎ ㅎ

CHAPTER 6

Time Dependent Perturbation

Chapter 4. Time Independent Perturbation 에서와 달리, 이 chapter 에서는 Perturbing Hamiltonian H' 에 time dependency 가 있는 경우를 다룬다. Chapter 4에서와 마찬가지로, 기본 Formalism 을 먼저 다루고, 이의 응용으로 수소원자에 가시광선을 가하는 경우를 section 6.2, 6.3에서 살펴볼 것이다.

6.1 Formalism

Time dependent Perturbation 에서도, Time Independent Perturbation과 마찬가지로 perturbing term H' 가 unperturbed system의 Energy Eigenvalue를 크게 변화시키지 않는다는 assumption 이 기본적으로 깔려 있다. 이에 덧붙여, Time dependent Perturbation 에서는, H' 가 너무 small 해서, system 에 주는 영향이 너무 작아서 Energy Eigenvalue를 변화시키는 정도가 없다고 가정하고 있다.

Time dependent Perturbation 에서는 다음과 같은 time dependent schrödinger equation 이 system 의 dynamics 를 govern 한다.

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H'(t) \\ H |\psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (6.1)$$

만약, $H = H_0$ 이라면, 상수 c_n 에 대해서 ¹

$$\psi(t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$$

이라고 쓸 수 있다. 허나, $H = H_0 + H'(t)$, perturbing term 이 더해지면,

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \quad (6.2)$$

$|n\rangle$ 에 붙은 계수 c_n 도 time dependancy를 가지게 된다. $c_n(t) = \langle n|\psi(t)\rangle$, 에서, c_n 은 입자가 n -state 에 있을 probability 이다. 그렇다. Time dependent Perturbation 에서는 입자가 한 state 에서 출발해서 다른 state로 transition 할 확률이 시간에 따라 어떻게 변하는지에 관심을 둔다.² 그래서, $t = 0$ 일 때, 입자는 initially, state $|a\rangle$ 에 있다고 가정한다.

$$|\psi(t=0)\rangle = |a\rangle$$

¹여기서는 perturbing term 이 Energy eigenvalue 와 eigenstate를 바꾼지 않는다고 가정하고 있다. 따라서 Time Independent Perturbation 에서 같은 $|n^0\rangle$ 가 아닌 $|n\rangle$ 라고 표시하겠다.

²또한, Energy Eigenvalue 에 degeneracy 가 있는 것도 여기서는 Time Independent Perturbation 에서처럼 그리 큰 문제가 되지 않는다.

이제, c_n 에 관련된 식을 찾아보자. 식 (6.2)을 (6.1)에 대입해서 정리해보자.

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t) e^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle$$

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= \left[\sum_m c_m(t) E_m e^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle \right] + \sum_m c_m(t) e^{-iE_m t/\hbar} H' |m\rangle \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle &= \sum_m i\hbar \frac{dc_m}{dt} e^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle + \boxed{\sum_m c_m(t) E_m e^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle} \end{aligned}$$

위 식에서 boxed 에 들어간 부분을 날리고, 식을 적으면

$$\sum_m \frac{dc_m}{dt} e^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle = \left(\frac{1}{i\hbar} \right) \sum_m c_m(t) e^{-iE_m t/\hbar} H' |m\rangle$$

양변에 $\langle b|$ 을 곱하면

$$\begin{aligned} \sum_m \frac{dc_m}{dt} e^{-iE_m t/\hbar} \underbrace{\langle b|m\rangle}_{=\delta_{b,m}} &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right) \sum_m c_m(t) e^{-iE_m t/\hbar} \langle b|H'|m\rangle \\ \frac{dc_b}{dt} &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right) \sum_m c_m(t) e^{i\frac{E_b - E_m}{\hbar}} \langle b|H'|m\rangle \end{aligned} \quad (6.3)$$

이렇게 $\frac{dc_b}{dt}$ 와 c_b, H' 의 관계식을 얻었다. 수식이 너무 복잡하므로 $\frac{E_b - E_m}{\hbar} = \omega_{b,m}$ 이라고 나타내겠다.

Perturbation Series Time Independent Perturbation 에서 $\Delta E_b, \Delta |b\rangle$ 을 계산한 과정을 remind 해 보자. 우리는 이 두 놈들을 정확하게 계산할 수 없어서 H' 에 대해서 order by order expansion 하였다. Time Independent Perturbation 에서도 마찬가지로 식(6.3)의 미분방정식을 풀어 $c_b(t)$ 를 정확하게 계산하는 것은 힘드므로, perturbation expansion 을 하여 approximate solution 을 구할 것이다.³

$$c_b(t) = c_b^{(0)} + c_b^{(1)} + c_b^{(2)} + c_b^{(3)} + \dots \quad (6.4)$$

식(6.4)에서 $c_b^{(0)}, c_b^{(1)}, c_b^{(2)}$ 은 각각 H' 에 대해서 0차, 1차, 2차인 term 들이다. $c_b^{(0)}$ 은 H' 에 대해서 0 차이고, $|\psi(t)\rangle$ 는 $t = 0$ 일 때 $|a\rangle$ 인 점에 착안해서,

$$c_b^{(0)} = \delta_{b,a} \quad (6.5)$$

라고 할 수 있다. 또한, 식(6.3)을 다음과 같이 적어볼 수 있다.

$$\begin{aligned} 0 \text{ th order: } \frac{dc_b^{(0)}(t)}{dt} &= 0 \\ 1 \text{ st order: } \frac{dc_b^{(1)}(t)}{dt} &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right) \sum_m \langle b | H'(t) | m \rangle e^{i\omega_{b,m} t} c_m^{(0)}(t) \\ 2 \text{ nd order: } \frac{dc_b^{(2)}(t)}{dt} &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right) \sum_m \langle b | H'(t) | m \rangle e^{i\omega_{b,m} t} c_m^{(1)}(t) \\ &\vdots \\ n \text{ th order: } \frac{dc_b^{(n)}(t)}{dt} &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right) \sum_m \langle b | H'(t) | m \rangle e^{i\omega_{b,m} t} c_m^{(n-1)}(t) \end{aligned} \quad (6.6)$$

³여기서 $|a\rangle$ 는 initial state, $|b\rangle$ 는 final state 이다.

식(6.5)을 (6.6)에 대입하면 이런 결과를 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} c_b^{(0)} &= \delta_{b,a} \\ c_b^{(1)} &= \left(\frac{1}{i\hbar}\right) \int_0^t e^{i\omega_{b,a} t_1} \langle b | H'(t_1) | a \rangle dt_1 \\ c_b^{(2)} &= \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t \int_0^{t_2} \sum_n e^{i\omega_{b,n} t_2} \langle b | H'(t_2) | n \rangle \langle n | H'(t_1) | a \rangle e^{i\omega_{n,a} t_1} dt_1 dt_2 \end{aligned} \quad (6.7)$$

식(6.7)에서 $c_b^{(n)}(t)$ 가 H' 에 대해서 n 차 임을 확인함을 알 수 있다. 그러나, 우리는 앞으로 $c_b(t) \simeq c_b^{(0)} + c_b^{(1)}$ 까지만 계산할 것이다. 왜냐하면 $c_b(t)$ 가 2차 이상의 항으로 올라갈수록 계산량이 기하급수적으로 많아지는 이유도 있다. 그리고, H' 은 small 하다고 처음에 전제를 했는데 order 가 높아질수록 H' 이 여러번 곱해져서 significance가 떨어지는 까닭도 있다.

엄청 중요한 내용은 아니지만, 식(6.4)과 (6.7)의 perturbation series 를 다음과 같이 생각할 수 있다. 1차항은 system 이 시간 0에서 t 로 evolve 할 때, state $|a\rangle$ 에서 $|b\rangle$ 로 transition 하는 거와 관련 있다. 또한, system 이 시간 0에서 t_2 로 evolve 할 때, $|a\rangle$ 에서 $|n\rangle$ 으로 transition 하고, ($|a\rangle$ 에서 $|b\rangle$)로 바로 가지 않고, 중간에 한 단계 거쳐서 시간 t_2 에서 t 로 evolve 할 때 $|n\rangle$ 에서 $|b\rangle$ 로 transition 할 수도 있는데, 2차항은 이를 가능한 모든 n 에 대해서 summation 을 해준것과 관련이 있는 것으로 볼 수 있다.

Transition Probability and Transition Rate Perturbation Series 를 다루기 전에 본문에서 다른 내용을 다시 생각해보자. $c_n(t) = \langle n | \psi(t) \rangle$, 여기서, $|c_n|^2$ 은 입자가 t 라는 시간이 경과 후 n -state에 있을 확률, 즉 **Transition Probability** $P_{a \rightarrow b}(t)$ 라고 할 수 있다. 다시, 우리는 입자가 $t=0$ 일 때 $|a\rangle$ 라는 state에서 출발해서 $|b\rangle$ 라는 다른 state 으로 transition 하는 것에 관심을 두고 있다. $c_b(t) = c_b^{(0)} + c_b^{(1)}$ 에서 $c_b^{(0)} = \delta_{b,a}$ 인데 $b \neq a$ 이므로

$$P_{a \rightarrow b}(t) = |c_b^{(1)}(t)|^2$$

라고 보면 된다.

허나, 다음 내용에도 나오겠지만, $H'(t)$ 가 시간 t 에 대해서 주기적이고, 충분히 긴 시간이 경과한 경우 ($t \rightarrow +\infty$), $P_{a \rightarrow b}(t)$ 이 무한대로 발산한다. 이런 상황에서, 다음과 같은 **Transition Rate** 가 도입된다.

$$\boxed{\Gamma_{a \rightarrow b}(t) = \frac{P_{a \rightarrow b}(t)}{t}}$$

앞서, Transition Probability 는 $c_b(t)$ 의 1차항만 생각하므로 $\Gamma_{a \rightarrow b}(t) = \frac{|c_b^{(1)}(t)|^2}{t}$ 라고 쓴다.⁴

6.1.1 Example: Harmonic Perturbation

여기서는 Perturbing term 이 시간에 대해서 주기적으로 변하는 경우를 살펴볼 것이다. 필자는 이 부분이 이 section, chapter 를 쓰는 궁극적인 이유라고 생각한다.

$$H'(t) = V \sin(\omega t + \phi)$$

여기서도 V 는 Hermitian 하고, \mathbf{x}, \mathbf{p} 에 depend 하는 operator 이다. 여기서, 우리는 계산의 편의상 위의 식을 다음과 같이 분리시킬 것이다.

$$H'(t) = \frac{1}{i} H_1 e^{i(\omega t + \phi)} - \frac{1}{i} H_2 e^{i(-\omega t - \phi)} \quad (6.8)$$

⁴ 사실, 필자는 이 책에 Transition Rate 의 물리적 의미를 상세히 쓰고 싶었으나, 그러지 못하였다. 책들에서는 Trasition Probability per time 이라고만 적혀있고, 필자도 그냥 이렇게 이해했다: 세로축이 $P_{a \rightarrow b}$ 이고 가로축이 t 인 그래프에서 곡선에서의 특정 지점과 원점을 이은 직선의 기울기라고.

여기서도 H_1, H_2 는 Hermitian 하다. 식 (6.8)을 (6.7)에 대입해서 $c_b^{(1)}$ 을 계산해보자.

$$\begin{aligned}
 c_b^{(1)} &= \left(\frac{1}{i\hbar}\right) \left(\frac{1}{i}\right) \int_0^t e^{i((\omega - \omega_{a,b})t' + \phi)} \langle b | H_1 | a \rangle - \left(\frac{1}{i\hbar}\right) \left(\frac{1}{i}\right) \int_0^t e^{-i((\omega - \omega_{b,a})t + \phi)} \langle b | H_2 | a \rangle dt' \\
 &= -\frac{\langle b | H_1 | a \rangle e^{i\phi}}{\hbar} \int_0^t e^{i(\omega - \omega_{a,b})t'} dt' + \frac{\langle b | H_2 | a \rangle e^{-i\phi}}{\hbar} \int_0^t e^{-i(\omega - \omega_{b,a})t'} dt' \\
 &= -\frac{\langle b | H_1 | a \rangle e^{i\phi}}{\hbar e^{i\frac{\pi}{2}}} \frac{e^{i(\omega - \omega_{a,b})t} - 1}{\omega - \omega_{a,b}} + \frac{\langle b | H_2 | a \rangle e^{-i\phi}}{\hbar e^{-i\frac{\pi}{2}}} \frac{e^{-i(\omega - \omega_{b,a})t} - 1}{\omega - \omega_{b,a}} \\
 &= \frac{1}{\hbar} \left[\underbrace{\langle b | H_1 | a \rangle e^{i(\phi - \frac{\pi}{2})} \frac{e^{i(\omega - \omega_{a,b})t} - 1}{\omega - \omega_{a,b}}}_{=z_1} + \underbrace{\langle b | H_2 | a \rangle e^{-i(\phi - \frac{\pi}{2})} \frac{e^{-i(\omega - \omega_{b,a})t} - 1}{\omega - \omega_{b,a}}}_{=z_2} \right] \tag{6.9}
 \end{aligned}$$

에서 Transition Probability 를 다음과 같이 간략하게 나타내보자.

$$P_{a \rightarrow b}(t) = |c_b^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} [|z_1|^2 + |z_2|^2 + z_1 z_2^* + z_1^* z_2] \tag{6.10}$$

Transition Rate 의 극한을 취하면, $\left(\Gamma_{a \rightarrow b} \equiv \lim_{t \rightarrow +\infty} \Gamma_{a \rightarrow b}(t) \right)$, $\frac{z_1 z_2^* + z_1^* z_2}{t}$ 는 0 으로 수렴한다.⁵ (6.9)과 (6.10) 을 이용해서 Transition Rate 의 극한을 계속 계산해보자.

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{a \rightarrow b} &= \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{|c_b^{(1)}(t)|^2}{t} \\
 &= \frac{1}{\hbar^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\frac{|z_1|^2 + |z_2|^2 + z_1 z_2^* + z_1^* z_2}{t} \right] = \frac{1}{\hbar^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|z_1|^2 + |z_2|^2}{t} \\
 &= \frac{1}{\hbar^2} \lim_{t \rightarrow +\infty} \left[|\langle b | H_1 | a \rangle|^2 \frac{\sin^2 \left(\frac{\omega - \omega_{a,b}}{2} t \right)}{\left(\frac{\omega - \omega_{a,b}}{2} \right)^2 t} + |\langle b | H_2 | a \rangle|^2 \frac{\sin^2 \left(\frac{\omega - \omega_{b,a}}{2} t \right)}{\left(\frac{\omega - \omega_{b,a}}{2} \right)^2 t} \right] \tag{6.11}
 \end{aligned}$$

식(6.11)의 마지막 줄에서 우리는 다음의 극한을 활용해야 한다. \sin 의 제곱이 왜 Dirac Delta 가 되는지는 Chapter 7 에 그림까지 덧붙여서 상세하게 설명하였다. 혼을 다해 타이핑을 하였으니 꼭 읽고 오시길 바란다.

$$\boxed{\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{\sin^2((\omega - \omega')t)}{(\omega - \omega')^2 t} = \pi \delta(\omega - \omega')}$$

⁵ 계산 과정이 너무 길어져서 생략하겠다. 타이핑하느라 손가락이랑 모카지랑 눈깔이 너무 아프다 흑흑

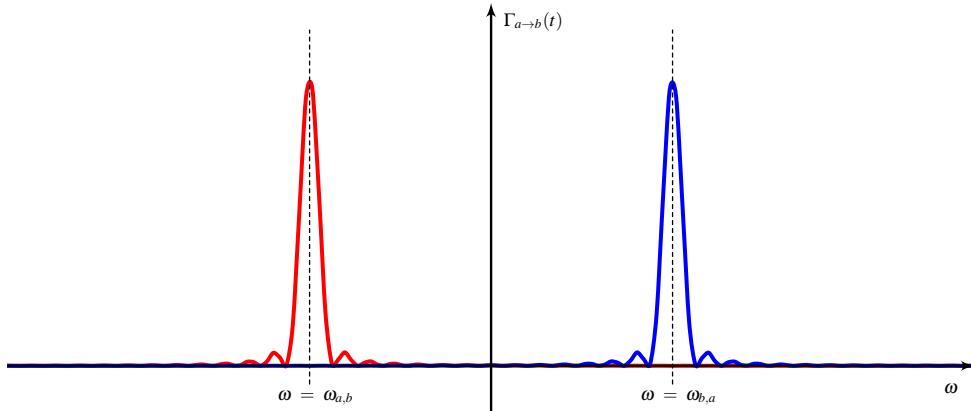


Figure 6.1: 식(6.11)의 마지막 줄을 이용해서 Transition Rate $\Gamma_{a \rightarrow b}(t)$ 의 그래프를 그렸다. $\omega = \omega_{a,b}$ 와 $\omega = \omega_{b,a}$ 에서 그래프의 폭이 좁고 날카롭게 치솟은 것을 확인할 수 있다.

이를 이용하여 식(6.11)의 Transition Rate의 극한을 먼저 계산해보자.

$$\begin{aligned}\Gamma_{a \rightarrow b} &= \frac{1}{\hbar^2} \lim_{t \rightarrow +\infty} \left[|\langle b | H_1 | a \rangle|^2 \frac{\sin^2 \left(\frac{\omega - \omega_{a,b}}{2} t \right)}{\left(\frac{\omega - \omega_{a,b}}{2} \right)^2 t} + |\langle b | H_2 | a \rangle|^2 \frac{\sin^2 \left(\frac{\omega - \omega_{b,a}}{2} t \right)}{\left(\frac{\omega - \omega_{b,a}}{2} \right)^2 t} \right] \\ &= \frac{\pi}{\hbar^2} \left[|\langle b | H_1 | a \rangle|^2 \delta \left(\frac{\omega - \omega_{a,b}}{2} \right) + |\langle b | H_2 | a \rangle|^2 \delta \left(\frac{\omega - \omega_{b,a}}{2} \right) \right]\end{aligned}$$

다음을 이용하여 위 식의 delta 함수를 더 정리해보자.

$$\frac{1}{\hbar} \delta \left(\frac{\omega - \omega_{a,b}}{2} \right) = \frac{2}{\hbar} \delta(\omega - \omega_{a,b}) = 2\delta(\hbar\omega - E_a + E_b)$$

다시 한번 Transition Rate 의 극한을 적어보면, 다음과 같이 간결해진다.

$$\begin{aligned}\Gamma_{a \rightarrow b} &= \frac{\pi}{\hbar^2} \left[|\langle b | H_1 | a \rangle|^2 \delta \left(\frac{\omega - \omega_{a,b}}{2} \right) + |\langle b | H_2 | a \rangle|^2 \delta \left(\frac{\omega - \omega_{b,a}}{2} \right) \right] \\ &= \boxed{\frac{2\pi}{\hbar} \left[|\langle b | H_1 | a \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - [E_a - E_b]) + |\langle b | H_2 | a \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - [E_b - E_a]) \right]} \quad (6.12)\end{aligned}$$

식(6.12)에서 Perturbing term H' 이 시간 t 에 대해서 periodic 한 경우, Transition Rate 가 Dirac Delta 로 나옴을 확인할 수 있다. Perturbation 이 Constant 할 때는 Dirac Delta 가 하나만 나오는데, 이는 Harmonic Perturbation 에서 $\omega = 0$ 인 특정한 경우라고 간주하면 된다. Harmonic Perturbation 에서 Dirac Delta 가 2개 나오는 것에 대해 필자는 다음과 같이 생각한다. 식(6.12)의 두번째 줄에서 $\Gamma_{a \rightarrow b}$ 를 Harmonic Perturbation 의 angular frequency ω 에 대한 함수로 본다면,

1. **When $E_a > E_b$,** 이 경우에는 $\omega_{a,b} > 0, \omega_{b,a} < 0$ 이다. angular frequency ω 는 음수 일 수가 없으므로 파란색 Dirac Delta 는 항상 0이고, 빨간색 Dirac Delta 만 의미있게 된다.
2. **When $E_b > E_a$,** 이 경우에는 $\omega_{a,b} < 0, \omega_{b,a} > 0$ 이다. 마찬가지로 여기서는 빨간색 Dirac Delta 는 항상 0이고, 파란색 Dirac Delta 만 의미있게 된다.⁶

⁶ 1-D Simple Harmonic Oscillator 의 경우, 모든 Energy Level 들 사이의 간격은 일정하다. 만약 Perturbation 의 frequency 와 Oscillator 자체의 frequency 가 일치한다면, Absorption, Emission 둘 다 일어날 수 있다고 이론적으로 볼 수 있다. 하지만, 완벽한 1-D Oscillator 는 실제로 존재하지 않으므로, Dirac Delta 하나에 Absorption, Emission 이 둘다 속하는 경우는 생기지 않는다.

요약하자면, initial state에서의 Energy E_a 와 final state에서의 Energy E_b 의 대소 관계가 어떻게 될지를 보정하기 위해 Transition Rate의 $t \rightarrow +\infty$ 의 극한이 Dirac Delta 두개의 모양으로 나오는 것이다.

또, 위와 같이 Perturbation이 Time-Harmonic 하여 Transition Rate가 ω 에 대한 Dirac Delta가 나오는 것을, Fermi's Golden Rule이라고 한다. $\Gamma_{a \rightarrow b}$ 가 Dirac Delta로 나오는 것은 final state의 Energy가 initial state의 Energy보다 $\hbar\omega$ 만큼 높거나 낮을 때만 transition이 일어나며, 이는 oscillating field 한테 energy quanta $\hbar\omega$ 를 흡수/방출하는 것에 해당한다.

6.2 Perturbative Quantum Process: When Electromagnetic Wave is applied

System이 monochromatic electromagnetic wave가 가해지는 경우를 생각해보자. section 1.1,에서 electromagnetic wave는

$$\mathbf{E}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{X} - \omega t + \phi)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{X}, t) = \left(\frac{1}{c} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E} \right) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{X} - \omega t + \phi)$$

로 나타내어지고, section 1.2에서는 이 wave가

$$\Phi(\mathbf{X}, t) = 0 \quad (6.13)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{X}, t) = \frac{1}{\omega} \mathbf{E}_0 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{X} - \omega t + \phi) \quad (6.14)$$

의 potential에서 나옴을 확인했다. 또, section 1.3에서는 system에 이런 electromagnetic wave가 가해진 경우, Hamiltonian은

$$H' = \frac{1}{2m} (-q\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{P} \cdot q\mathbf{A}) + q\Phi$$

이런 term이 perturbation으로서 추가됨을 봤다. 하지만, 위 potentials의 경우, $\Phi = 0$ 이고 $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}$ 이므로⁷ H' 을 다음과 같이 적을 수 있다.⁸

$$H'(t) = \frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} = \frac{eE_0}{m\omega} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{X} - \omega t + \phi) \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{P}$$

$$= \frac{1}{i} \left[\underbrace{\frac{-eE_0}{2m\omega} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{X}} (\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{P})}_{=H_1} \right] e^{i(\omega t - \phi)} - \frac{1}{i} \left[\underbrace{\frac{-eE_0}{2m\omega} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{X}} (\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{P})}_{=H_2} \right] e^{-i(\omega t - \phi)} \quad (6.15)$$

여기서, 우리는 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}$ 을 0으로 근사시킬 수 있다. 전자기파의 진동수를 ω , 전자기파의 wave vector를 k 라고 하면,

$$\omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$$

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{\Delta E}{\hbar c}$$

이다. 수소원자 내에서 전자가 다른 Energy level로 전이하면서 방출·흡수하는 에너지는 $0 < \Delta E < 13.6\text{eV}$ 이므로 k 의 범위는 $0 < k < 6.88 \times 10^7 \text{m}^{-1}$ 이다. $|\mathbf{x}| \simeq a = 5.29 \times 10^{-11} \text{m}$ 이라고 하면,

⁷ 두 operator들의 inner product의 순서를 바꿔도 결과가 같음을 보이는 과정이 chapter6에 나와있다. 궁금하면 읽어보시라.

⁸ 여기서 $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{\mathbf{e}}$ 라고 표현하고 있다.

$(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})_{max} \simeq 3.64 \times 10^{-3}$ 이므로, 이는 negligible 하다. (6.15)를 (6.12)에 대입해서 Transition Rate 를 계산해보면,

$$\begin{aligned}\Gamma_{a \rightarrow b} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left[|\langle b | H_1 | a \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - [E_a - E_b]) + |\langle b | H_2 | a \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - [E_b - E_a]) \right] \\ &= \frac{\pi e^2 E_0^2}{2m^2 \omega^2 \hbar} |\langle b | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{P} | a \rangle|^2 \left[\delta(\hbar\omega - [E_a - E_b]) + \delta(\hbar\omega - [E_b - E_a]) \right]\end{aligned}\quad (6.16)$$

여기서, $\mathbf{P} = -\frac{im}{\hbar} [\mathbf{X}, H_0]$ 임을 이용하면,⁹

$$\begin{aligned}\Gamma_{a \rightarrow b} &= \frac{\pi e^2 E_0^2}{2\omega^2 \hbar^3} |\langle b | [\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{X}, H_0] | a \rangle|^2 \left[\delta(\hbar\omega - [E_a - E_b]) + \delta(\hbar\omega - [E_b - E_a]) \right] \\ &= \frac{\pi e^2 E_0^2}{2\hbar\omega^2} |\langle b | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{X} | a \rangle|^2 \left[\omega_{a,b}^2 \delta(\hbar\omega - [E_a - E_b]) + \omega_{b,a}^2 \delta(\hbar\omega - [E_b - E_a]) \right]\end{aligned}\quad (6.17)$$

Electromagnetic wave 가 가해져도 식(6.17)처럼 Transition Rate 가 두개의 Dirac Delta 로 나온다. 위에서처럼 delta 함수가 2개가 나오는 것에 대하여 우리는 세가지 mechanism 을 생각할 수 있다; Absorption, Stimulated emission, Spontaneous emission.

E_a 가 E_b 보다 Energy level 이 낮다고 하자. 입자가 처음에 $|a\rangle$ 에 있었다. Angular frequency 가 $\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$ 인 polarized, monochromatic 인 빛이 (혹은 전자기파) 가해지면 입자는 높은 상태인 $|b\rangle$ 로 전이한다. 이 과정에서, 입자는 electromagnetic field 로 부터 $E_b - E_a = \hbar\omega_0$ 만큼의 energy 를 얻었고, 우리는 이 입자가 photon 을 absorb 하였다고 말한다.¹⁰

반대로, 입자가 처음에 높은 상태 $|b\rangle$ 에 있고, angular frequency 가 ω_0 인 빛을 가하는 상황을 생각해보자. 앞에서는 입자에 빛이 가해져 높은 상태로 전이를 한 반면, 여기서는 입자가 낮은 상태 $|a\rangle$ 로 전이한다. 이 과정은 **stimulated emission** 이라고 부른다. 이 경우에, electromagnetic field 는 입자로부터 $\hbar\omega_0$ 만큼의 energy 를 얻는다. 빛이 가해져서 입자로부터 에너지가 방출되는 상황은, 이렇게 생각하면 될 것이다: photon 하나가 들어가서 emission 을 유도하고, 입자가 낮은 상태로 전이하면서 다른 photon 하나를 방출해서, 총 두개의 photon 이 나온다. 이 과정으로 인해서 빛의 *amplification* 이 일어날 수 있다. 만약, 여러개의 입자들이 $|b\rangle$ 에 있는데, 의 $\hbar\omega_0$ 의 energy 를 가진 photon 이 들어와서 입자 하나를 $|a\rangle$ 로 전이시키면서 2개의 photon 이 되고, 2개의 photon 은 입자 두개를 전이시키면서 4개의 photon 이 되고, … 이 과정으로 동일한 phase 와 frequency 를 가진 엄청나게 많은 photon 이 발생할 것이다. 이 과정이 바로 LASER (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) 의 작동원리이다. LASER 가 작동하기 위해선 "밀도 반전" (대부분의 입자들이 높은 상태에 있어야 함) 이 essential 하다. 왜냐하면 높은 상태와 낮은 상태의 energy gap 에 해당하는 photon 이 가해질 경우, 입자들이 두 상태에 고르게 분포되어 있다면, 높은 상태로 전이하는 입자들과 낮은 상태로 전이하는 입자들이 있게 되어 photon 의 발생이 absorption 에 의해 상쇄될 수 있기 때문이고, 우리가 원하는 만큼 amplification 도 얻을 수 없다.

세번째로 확인할 수 있는 mechanism 은 바로 **spontaneous emission** 이다. 이름에서처럼, 입자가 photon 을 release 하면서 높은 상태 $|b\rangle$ 에서 낮은 상태 $|a\rangle$ 로 전이한다. 하지만, stimulated emission

⁹ 밑 식의 첫 줄에서 두 번째 줄로 넘어갈 때 이런 계산 과정이 쓰였다.

$$\begin{aligned}\langle a | [Q, H_0] | b \rangle &= \langle a | Q H_0 | b \rangle - \langle a | H_0 Q | b \rangle \\ &= \langle a | Q | H_0 b \rangle - \langle H_0 a | Q | b \rangle \\ &= E_b^0 \langle a | Q | b \rangle - E_a^0 \langle a | Q | b \rangle \\ &= \hbar\omega_{b,a} \langle a | Q | b \rangle\end{aligned}$$

이 것을 왜 하나 의문이 들 수가 있는데, Selection Rule section 에서 Matrix element 를 계산하는 과정을 보면 이렇게 바꾸는 게 매우 편하다.

¹⁰ 참고로, photon 은 quantum Electrodynamics 의 범위에 있는 용어로, 여전히 electromagnetic field 를 classic, 혹은 continuous 하다고 다루는 양자역학의 범위 밖이다. 하지만, 이 context 에서는 "photon" 이라는 용어가 계속 쓸 것이므로 그냥 이 정도만 알아놓자.

에서와 다르게, 외부에서 가해진 field 없이도 낮은 상태로의 전이가 일어난다. 그냥 보면, 또 외부에서 가해준 perturbation 도 없겠다, 입자는 그 높은 상태에 영원히 있을거 같아 보인다. 하지만, simple harmonic oscillator 에서처럼, 바닥 상태의 energy 가 non-zero 인거처럼, quantum Electrodynamics 에서는, 바닥상태에 있어도 field 가 non-zero 이다.¹¹ 입자한테 아무런 빛을 가하지 않고, 온도도 absolute zero 로 낮춘다 할지언정, 여전히 electromagnetic radiation 이 있고, 아 radiation 때문에 emission 이 일어나는 것이다. 정확히 말하면 spontaneous emission 의 말 그래도 입자가 자기 혼자서 낮은 상태로 transition 하는 것이 아니라, 바로 그 non-zero field 에 의해서 transition 이 일어나는 것이다. 완전히 spontaneous 한 과정은 아니오나, 필자는 photon 에 의해서 emission 이 일어나는 현상과 구분하기 위해 이런 명칭을 지은게 아닌가 생각한다.

6.3 Selection Rule

식(6.17)에서 나온 Transition Rate 을 떠올려보자. $\Gamma_{a \rightarrow b}$ 를 ω 에 대한 함수로 보면, $\omega = \omega_{a,b}$ 와 $\omega = \omega_{b,a}$ 에서 날카롭게 치솟은 delta 함수 2개의 합을 $H_{1,2}$ 의 matrix element 와 곱한 형태로 되어 있다. Dirac delta 의 부분은 다음과 같이 해석한다: 외부 (periodic) perturbation 의 frequency ω 곱하기 \hbar 이 initial 과 final state 사이의 energy gap 만큼 해당할 경우에만 transition 일어난다. 하지만, 이렇게 frequency 가 맞아 떨어진다 하더라도, transition 이 일어나는지 아닌지를 결정해주는 요소가 더 있다.

앞 section 에서 electromagnetic wave 가 perturbation 으로서 가해진 경우, transition rate 의 $t \rightarrow +\infty$ 극한이 다음과 같이 나옴을 확인하였다.

$$\begin{aligned} \Gamma_{a \rightarrow b} &= \frac{\pi e^2 E_0^2}{2\hbar\omega^2} |\langle b | \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{X} | a \rangle|^2 \left[\color{red} \omega_{a,b}^2 \delta(\hbar\omega - [E_a - E_b]) \right. \\ &\quad \left. + \color{blue} \omega_{b,a}^2 \delta(\hbar\omega - [E_b - E_a]) \right] \\ &= \frac{\pi e^2 E_0^2}{2\hbar\omega^2} |\langle b | \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{X} | a \rangle|^2 \left[\frac{\omega_{a,b}^2}{\hbar} \delta(\omega - \omega_{a,b}) + \frac{\omega_{b,a}^2}{\hbar} \delta(\omega - \omega_{b,a}) \right] \\ &= \frac{\pi e^2 E_0^2}{2\hbar^2} |\langle b | \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{X} | a \rangle|^2 \left[\color{red} \delta(\omega - \omega_{a,b}) + \color{blue} \delta(\omega - \omega_{b,a}) \right] \end{aligned} \quad (6.18)$$

Transition Rate 에 delta 함수가 나오는 것은 이미 확인 하였고, 우리가 관심을 가져야 할 것은

$$\begin{aligned} \langle b | \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{X} | a \rangle &= \hat{\epsilon} \cdot \langle b | \mathbf{X} | a \rangle \\ &= \varepsilon_x \boxed{\langle b | X | a \rangle} + \varepsilon_y \boxed{\langle b | Y | a \rangle} + \varepsilon_z \boxed{\langle b | Z | a \rangle} \end{aligned} \quad (6.19)$$

바로 이 matrix element 들이다. 이 matrix element 들이 dirac delta 외에도 해당 transition 이 일어나는지 아닌지를 결정해주는 역할을 해준다. 우리는 이 matrix element 들을 수소원자의 Eigenstates 을 이용해서 계산할 것이므로, $|a\rangle$ 대신에 $|nlm\rangle$ 를, $|b\rangle$ 대신에 $\langle n'l'm' |$ 로 표시해서 쓸 것이다.

Selection rules involving m and m' 우선, 식(6.19) 의 matrix element 들을 계산하기 전에, 다음의 matrix element 들을 계산하자.

$$[L_z, X], \quad [L_z, Y], \quad [L_z, Z] \quad (6.20)$$

¹¹문장이 의미가 잘 안 와 닿을수 있는데, 양해바랍니다. 사실, Griffiths 내용 거의 그대로 길어온 부분이에요 ㅠㅠㅠ

여기서 $L_k = \sum_{i,j} X_i P_j \epsilon_{ijk}$, 그리고 $L_z = \sum_{i,j} X_i P_j \epsilon_{ij3}$ 임을 이용하면,

$$\begin{aligned}[L_z, X_b] &= \sum_{i,j} [X_i P_j, X_b] \epsilon_{ij3} \\ &= \sum_{i,j} (X_i [P_j, X_b] + [X_i, X_b] P_j) \epsilon_{ij3} \\ &= -i\hbar \sum_{i,j} X_i \delta_{j,b} \epsilon_{ij3} \\ &= -i\hbar \sum_i X_i \epsilon_{ib3} \\ \therefore [L_z, X] &= i\hbar Y, \quad [L_z, Y] = -i\hbar X, \quad [L_z, Z] = 0 \end{aligned} \quad (6.21)$$

식(6.21)의 3번째 commutation relation 을 활용해보자.

$$\begin{aligned} 0 &= \langle n' l' m' | [L_z, Z] | nlm \rangle = \langle n' l' m' | L_z Z - Z L_z | nlm \rangle \\ &= \langle n' l' m' | [(m'\hbar)Z - Z(m\hbar)] | nlm \rangle = (m' - m)\hbar \boxed{\langle n' l' m' | Z | nlm \rangle} \end{aligned} \quad (6.22)$$

Conclusion:

$$\begin{aligned} \text{When } m \neq m', \quad &\langle n' l' m' | Z | nlm \rangle = 0. \\ \text{When } m = m', \quad &\text{The value of } \langle n' l' m' | Z | nlm \rangle \text{ doesn't matter.} \end{aligned} \quad (6.23)$$

따라서, $m' \neq m$ 이면, Z 의 matrix element 는 항상 0 이다.

이번엔, L_z 와 X 의 commutator 를 계산해보자.

$$\begin{aligned} \langle n' l' m' | [L_z, X] | nlm \rangle &= \langle n' l' m' | (L_z X - X L_z) | nlm \rangle \\ &= (m' - m)\hbar \boxed{\langle n' l' m' | X | nlm \rangle} = i\hbar \langle n' l' m' | Y | nlm \rangle \end{aligned}$$

Conclusion:

$$(m' - m) \langle n' l' m' | X | nlm \rangle = i \langle n' l' m' | Y | nlm \rangle \quad (6.24)$$

계속해서 L_z 와 Y 의 commutator 를 계산해보자.

$$\begin{aligned} \langle n' l' m' | [L_z, Y] | nlm \rangle &= \langle n' l' m' | (L_z Y - Y L_z) | nlm_l \rangle \\ &= (m' - m)\hbar \boxed{\langle n' l' m' | Y | nlm_l \rangle} = -i\hbar \langle n' l' m' | X | nlm_l \rangle \end{aligned}$$

Conclusion:

$$(m' - m) \langle n' l' m' | Y | nlm \rangle = -i \langle n' l' m' | X | nlm_l \rangle \quad (6.25)$$

식(6.24)과 (6.25)을 조합하면 다음을 얻을 수 있다.

$$(m' - m)^2 \langle n' l' m' | X | nlm_l \rangle = \langle n' l' m' | X | nlm_l \rangle$$

$$(m' - m)^2 \langle n' l' m' | Y | nlm_l \rangle = \langle n' l' m' | Y | nlm_l \rangle$$

$$[(m' - m)^2 - 1] \langle n' l' m' | X | nlm_l \rangle = 0 \quad (6.27)$$

$$[(m' - m)^2 - 1] \langle n' l' m' | Y | nlm_l \rangle = 0 \quad (6.28)$$

$$(m' - m) \langle n' l' m' | Z | nlm \rangle = 0 \quad (6.29)$$

지금까지 계산한 것들을 바탕으로, $\langle n' l' m' | X | nlm \rangle$ 이 0 이 되는 조건을 살펴보자. 먼저, (6.24)에서 $m' \neq m$ 이면 Z 의 matrix element 가 0 이 될수 밖에 없을 것이다. 다음으로 (6.25)와 (6.26)을 보자. $m' \neq m$

이면서 $m' - m \neq \pm 1$ 이면 X, Y 의 matrix element 들도 0 이 될 수 밖에 없을 것이다. 요컨데, $m' \neq m$ 이면서 $m' - m \neq \pm 1$ 이면 X, Y, Z 의 matrix element 들이 모두 0이 되버리고, 식(6.18)에 나온 Transition Rate 는 0가 되어, 해당 transition 이 일어나지 않음을 뜻한다. 그러므로,

Selection rule 1.

$$\text{No transition occur unless } \Delta m = \pm 1 \text{ or } \Delta m = 0 \quad (6.30)$$

위 결과는 Photon 의 spin 양자수가 $s = 1$ 인 점을 생각해보면 쉽게 납득이 될 것이다. $s = 1$ 이므로 photon 의 spin angular momentum 의 z-component 가 가질 수 있는 값은 \hbar 의 $-1, 0, 1$ 배 뿐이므로, 전자에 빛이 가해져서 angular momentum 의 z-component 는 변하지 않거나, $\pm \hbar$ 범위에서만 변하거나 할 것이다.

Selection Rules involving l and l' : 해당 selection rule 은 다음 commutation relation 에서 출발한다. 이 식이 유도되는 과정은 Griffiths 저 양자역학 2e. 9.12 번 문항을 참고하시기 바란다.¹²

$$[L^2, [L^2, \mathbf{X}]] = 2\hbar(\mathbf{X}^2 L^2 + L^2 \mathbf{X}^2) \quad (6.31)$$

식(6.31)의 좌변을 살펴보면

$$\begin{aligned} [L^2, [L^2, \mathbf{X}]] &= L^2(L^2 \mathbf{X}^2 - \mathbf{X}^2 L^2) - (L^2 \mathbf{X}^2 - \mathbf{X}^2 L^2)L^2 \\ &= L^2 L^2 \mathbf{X}^2 - 2L^2 \mathbf{X}^2 L^2 + \mathbf{X}^2 L^2 L^2 \end{aligned}$$

인데, 이 양변에 $\langle n'l'm' |$ 과 $|nlm \rangle$ 으로 sandwich 하면,

$$\begin{aligned} \langle n'l'm' | [L^2, [L^2, \mathbf{X}]] | nlm \rangle &= \langle n'l'm' | L^2 L^2 \mathbf{X}^2 - 2L^2 \mathbf{X}^2 L^2 + \mathbf{X}^2 L^2 L^2 | nlm \rangle \\ &= \hbar^4 \left(l'^2(l'+1)^2 - 2l'(l'+1)l(l+1) + l^2(l+1)^2 \right) \langle n'l'm' | \mathbf{X} | nlm \rangle \\ &= [l'(l'+1) - l(l+1)]^2 \hbar^4 \langle n'l'm' | \mathbf{X} | nlm \rangle \end{aligned} \quad (6.32)$$

식(6.31)의 우변도 똑같이 sandwich 해주면,

$$\langle n'l'm' | 2\hbar(\mathbf{X}^2 L^2 + L^2 \mathbf{X}^2) | nlm \rangle = 2\hbar^4 (l'(l'+1) + l(l+1)) \langle n'l'm' | \mathbf{X} | nlm \rangle \quad (6.33)$$

식(6.31), (6.32), (6.33) 에서, $l'(l'+1) = A$, $l(l+1) = B$, 그리고 $\langle n'l'm' | \mathbf{X} | nlm \rangle = \mathcal{M}$ 이라고 하면,

$$\begin{aligned} (A - B)^2 \hbar^4 \mathcal{M} &= 2\hbar^4 (A + B) \mathcal{M} \\ [(A - B)^2 - 2(A + B)] \mathcal{M} &= 0 \end{aligned} \quad (6.34)$$

에서, 반드시 $\mathcal{M} = \langle n'l'm' | \mathbf{X} | nlm \rangle = 0$ 이 될 수 밖에 없는 조건을 살펴보자. 그러기 위해선 $(A - B)^2 \neq 2(A + B)$ 이여야 하므로 이를 풀면,

$$\begin{aligned} (A - B)^2 - 2(A + B) &= [l'(l'+1) - l(l+1)]^2 - 2[l'(l'+1) + l(l+1)] \\ &= \left[\underbrace{(l'+l+1)}_C \underbrace{(l'-l)}_D \right]^2 - [(l'+l+1)^2 + (l'-l)^2 - 1] \\ &= C^2 D^2 - C^2 - D^2 + 1 \\ &= (C^2 - 1)(D^2 - 1) \neq 0. \end{aligned} \quad (6.35)$$

¹²필자는 타이핑하다가 아주 지쳤다 ㅠㅠㅠ

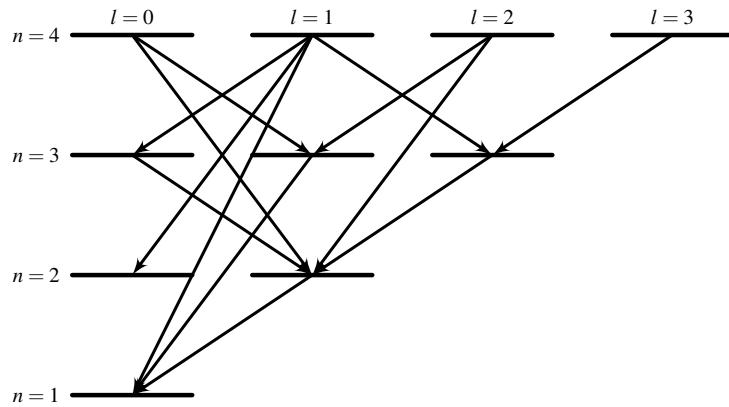


Figure 6.2: Allowed decays for the first four Bohr levels in hydrogen.

여기서 $(C^2 - 1)(D^2 - 1) = 0$ 을 풀자.

$$\begin{aligned} (C^2 - 1)(D^2 - 1) &= (C - 1)(C + 1)(D - 1)(D + 1) \\ &= \underbrace{(l' + l)}_{\text{always } \geq 0} \underbrace{(l' + l + 2)}_{\text{always } > 0} (l' - l - 1)(l' - l + 1) = 0 \end{aligned} \quad (6.36)$$

식(6.36)의 첫번째 소괄호에 있는 term은 $l' = l = 0$ 이 아닌 이상, 0이 될 수 없다. 그러므로 가능한 경우는 세번째와 네번째 소괄호가 0이 되는 경우이다.

(6.34)에서 부터 지금까지 한 말을 요약해보겠다. $\mathcal{M} = \langle n'l'm' | \mathbf{X} | nlm \rangle = 0$ 이 되게 하려면, 즉, Transition Rate가 0이 되게 하려면 $(l' + l)(l' + l + 2)(l' - l - 1)(l' - l + 1) \neq 0$ 이여야 한다. 즉, $\Delta l \neq \pm 1$ 이면 $\mathcal{M} = 0$ 이 될 수 밖에 없으므로 이 경우에 해당 transition은 일어나지 않음을 알 수 있다. 다시 말해

Selection rule 2.

$$\text{No transitions occur unless } \Delta l = \pm 1 \quad (6.37)$$

위 식도 식(6.30)과 같이 photon의 spin 양자수가 $s = 1$ 이라는 점을 생각하면 쉽게 이해되는 결과이다. Selection rule 1. 과 2.의 내용을 정리하여 그림 6.2에 넣었다.

앞 section Perturbative Quantum Process에서도 말했지만, 양자역학에서는(QM) system에 가해지는 electromagnetic field를 *classical*하게, 혹은 *continuous*하게 다룬다. QM은 수소원자의 에너지 스펙트럼, 각운동량의 양자화 등의 현상을 잘 설명할 수 있으나, 앞에서 나왔던 spontaneous emission, 그리고 이런 transition에서 입자가 전이하면서 energy를 어디서 흡수하고 방출된 것은 어디로 가는지, photon은 어디서 생겨나고 사라지는지 등을 설명하는 데에 한계가 있다. 이를 보완하기 위해 physical observable 뿐만 아니라 field도 quantize하는 이론이 등장하였고, 이것이 Quantum Field Theory (QFT), Quantum Electrodynamics (QED)이며, quantized 된 field가 바로 빛 알갱이, photon인 것이다. field까지 quantize하는 부분은 이 책, 아니, QM의 범위를 넘어선 내용이므로, 여기까지만 comment 하겠다. QFT부터는 흥미가 있으시다면 여러분들이 직접 찾아서 공부하시길 바란다.

6.4 Problems

1. The unperturbed Hamiltonian of a two-state system is represented by

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix}$$

There is, in addition, a time-dependent perturbation

$$V(t) = \begin{pmatrix} 0 & \lambda \cos \omega t \\ \lambda \cos \omega t & 0 \end{pmatrix} (\lambda \text{ is real.})$$

Answer followings.

- (a) At $t = 0$, the system is known to be in the first state, represented by $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Using time-dependent perturbation theory and assuming that $E_1^0 - E_2^0$ is *not* close to $\pm \hbar\omega$, derive an expression for the probability that the system is found in the second state represented by $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ as a function of $t (t > 0)$.
 - (b) Why is this procedure not valid when $E_1^0 - E_2^0$ is close to $\pm \hbar\omega$?
-

2. Consider Hamiltonian operator of a 3-dimensional simple harmonic oscillator.

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{X}^2$$

When electromagnetic field with potentials in (6.13) is applied, perturbing term is added to the original Hamiltonian.

$$H' = -\frac{q}{m}\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}$$

Where \mathbf{A}^2 term is omitted. Using equation Eq(6.19), construct a selection rule in 3-dimensional harmonic oscillator. It is easier to solve problem in a Castesian coordinate than in a spherical coordinate.

Part III

POSTLUDE

CHAPTER 7

Some Calculations From Previous Chapters

Preface 에서 적었듯이, 필자는 본문상에서 생략한 일부 계산들 및 설명들을 이 chapter 에 적었다. 긴 말 할 거 없이 바로 계산 대환장 파티를 시작하겠다.

7.1 Section 1.1

vector field $\mathbf{F} = \langle F_x, F_y, F_z \rangle$ 한테 curl 을 두 번 취하는 계산을 해보겠다. 다음 식의 두 번째 줄에서 세 번째 줄로 넘어갈 때

$$\sum_b \epsilon_{pqb} \epsilon_{abc} = \delta_{q,a} \delta_{p,c} - \delta_{p,a} \delta_{q,c}$$

를 활용하였다.

$$\begin{aligned}
 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{F}) &= \sum_{abc} \frac{\partial}{\partial x_a} (\nabla \times \mathbf{F})_b \epsilon_{abc} \hat{e}_c = \sum_{abc} \frac{\partial}{\partial x_a} \left(\sum_{pqb} \frac{\partial F_q}{\partial x_p} \epsilon_{pqb} \right) \hat{e}_c \\
 &= \sum_{pqabc} \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial x_p} F_q \epsilon_{pqb} \epsilon_{abc} \hat{e}_c \\
 &= \sum_{pqac} \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial x_p} F_q (\delta_{q,a} \delta_{p,c} - \delta_{p,a} \delta_{q,c}) \hat{e}_c \\
 &= \sum_{pq} \frac{\partial}{\partial x_q} \frac{\partial}{\partial x_p} F_q \hat{e}_q - \sum_{pq} \frac{\partial^2 F_q}{\partial x_p^2} \hat{e}_q \\
 &= \sum_q \hat{e}_q \frac{\partial}{\partial x_q} \left(\sum_p \frac{\partial F_p}{\partial x_p} \right) - \sum_q \hat{e}_q \left(\sum_p \frac{\partial^2 F_q}{\partial x_p^2} \right) \\
 &= \sum_q \hat{e}_q \frac{\partial}{\partial x_q} (\nabla \cdot \mathbf{F}) - \sum_q \hat{e}_q (\nabla^2 F_q) \\
 &= \boxed{\nabla(\nabla \cdot \mathbf{F}) - \nabla^2 \mathbf{F}}
 \end{aligned} \tag{7.1}$$

여기서 $\nabla^2 \mathbf{F}$ 는 \mathbf{F} 의 세 성분을 Laplacian 을 취한 것으로 보면 된다. 일반적으로 \mathbf{F} 의 세 성분 F_x, F_y, F_z 모두 x, y, z 에 대한 함수이므로 다음과 같이 생각하면 된다.

$$\nabla^2 \mathbf{F} = \langle \nabla^2 F_x, \nabla^2 F_y, \nabla^2 F_z \rangle$$

7.2 Section 1.3

본문에서 다음과 같은 식이 나왔다.

$$\mathbf{F} = \frac{d}{dt}(m\dot{\mathbf{x}}) = -\nabla V + q(-\nabla\Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \dot{\mathbf{x}} \times (\nabla \times \mathbf{A})) \quad (7.2)$$

먼저, 여기서도 $\sum_b \epsilon_{pqb} \epsilon_{abc} = \delta_{q,a} \delta_{p,c} - \delta_{p,a} \delta_{q,c}$ 을 이용하여 $\dot{\mathbf{x}} \times (\nabla \times \mathbf{A})$ 를 정리해 보겠다.

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}} \times (\nabla \times \mathbf{A}) &= \sum_{abc} \dot{x}_a (\nabla \times \mathbf{A})_b \epsilon_{abc} \hat{e}_c = \sum_{abc} \dot{x}_a \left(\sum_{pqb} \frac{\partial A_q}{\partial x_p} \epsilon_{pqb} \right) \epsilon_{abc} \hat{e}_c \\ &= \sum_{acpq} \dot{x}_a \frac{\partial}{\partial x_p} A_q \epsilon_{pqb} \epsilon_{abc} \hat{e}_c \\ &= \sum_{acpq} \dot{x}_a \frac{\partial A_q}{\partial x_p} (\delta_{q,a} \delta_{p,c} - \delta_{p,a} \delta_{q,c}) \\ &= \sum_{pq} \dot{x}_q \frac{\partial A_q}{\partial x_p} \hat{e}_p - \sum_{pq} \dot{x}_p \frac{\partial A_q}{\partial x_p} \hat{e}_q \\ &= \sum_p \frac{\partial}{\partial x_p} \left(\sum_q \dot{x}_q A_q \right) \hat{e}_p - \sum_{pq} \dot{x}_p \frac{\partial}{\partial x_p} \left(\sum_q A_q \hat{e}_q \right) \\ &= \sum_p \frac{\partial}{\partial x_p} (\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}) \hat{e}_p - \sum_p \dot{x}_p \frac{\partial}{\partial x_p} \mathbf{A} \\ &= \nabla(\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}) - (\dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla)\mathbf{A} \end{aligned} \quad (7.3)$$

에서 $\dot{\mathbf{x}} \times (\nabla \times \mathbf{A}) = -(\dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla)\mathbf{A} + \nabla(\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A})$ 임을 알 수 있다. 이를 식(7.2)에 대입하면

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(m\dot{\mathbf{x}}) &= -\nabla V - q\nabla\Phi - q\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + q\nabla(\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}) - q(\dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla)\mathbf{A} \\ &= -\nabla(V + q\Phi - q(\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A})) - q\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - q(\dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla)\mathbf{A} \end{aligned} \quad (7.4)$$

여기서 total derivative를 짚고 넘어가겠다. $f = f(x, y, z, t)$ 일 때, 미분적분학에서 배운 chain rule을 이용하면 $df = dx \frac{\partial f}{\partial x} + dy \frac{\partial f}{\partial y} + dz \frac{\partial f}{\partial z} + dt \frac{\partial f}{\partial t}$ 임을 알 수 있다. 여기서 양변을 dt 로 나누면,

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{dx}{dt} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{dy}{dt} \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{dz}{dt} \frac{\partial f}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial t} \\ &= \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla f + \frac{\partial f}{\partial t} \\ \therefore \frac{d}{dt} f &= (\dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla) f + \frac{\partial}{\partial t} f \end{aligned} \quad (7.5)$$

식 (7.5)은 앞으로도 많이 나오는 미분이므로 꼭 알고 가자. Total derivative 를 이용해서 식(7.4)을 다시 적으면

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(m\dot{\mathbf{x}}) &= -\nabla(V + q\Phi - q(\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A})) - q\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - q(\dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla)\mathbf{A} \\ &= -\nabla(V + q\Phi - q(\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A})) - q\frac{d\mathbf{A}}{dt} \end{aligned} \quad (7.6)$$

$$\therefore \frac{d}{dt}(m\dot{\mathbf{x}} + q\mathbf{A}) = -\nabla(V + q\Phi - q(\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A})) \quad (7.7)$$

또한, 균일한 magnetic field $\mathbf{B} = B_x \hat{e}_x + B_y \hat{e}_y + B_z \hat{e}_z$ 에 대해서 vector potential $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{x}$ 가 \mathbf{B} 를 yield 하는 것도 확인해보자. $\hat{e}_i \times \hat{e}_j = \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{e}_k$ 를 활용하면

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &= \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_a B_a \hat{e}_a \right) \times \left(\sum_b x_b \hat{e}_b \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_a \sum_b \sum_c \epsilon_{abc} B_a x_b \hat{e}_c\end{aligned}$$

$A_k = \frac{1}{2} \sum_a \sum_b \epsilon_{abk} B_a x_b$ 라고 하고, $\nabla \times \mathbf{A}$ 를 계산해보면

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{A} &= \left(\sum_i \hat{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \times \left(\sum_j \hat{e}_j A_j \right) \\ &= \sum_i \sum_j \sum_k \epsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_i} A_j \hat{e}_k \\ &= \sum_i \sum_j \sum_k \epsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_j} A_k \hat{e}_i \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ijk} \sum_{ab} \epsilon_{ijk} \epsilon_{abk} \frac{\partial}{\partial x_j} (B_a x_b) \hat{e}_i\end{aligned}$$

여기서 $\sum_k \epsilon_{ijk} \epsilon_{abk} = \delta_{ia} \delta_{jb} - \delta_{ib} \delta_{ja}$, $\frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \delta_{i,j}$ 을 활용하면,

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{A} &= \frac{1}{2} \sum_{ijk} \sum_{ab} (\delta_{i,a} \delta_{j,b} - \delta_{i,b} \delta_{j,a}) \frac{\partial}{\partial x_j} (B_a x_b) \hat{e}_i \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} (B_i x_j) \hat{e}_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} (B_j x_i) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 B_i \hat{e}_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} \delta_{i,j} B_j \hat{e}_i \\ &= \frac{3}{2} \sum_{i=1}^3 B_i \hat{e}_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 B_i \hat{e}_i \\ &= \mathbf{B}\end{aligned}$$

또한, ○] vector potential \mathbf{A} 가 Coulomb Gauge 를 만족하는지도 확인해보자.

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{A} &= \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} A_k \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_{abk} \epsilon_{abk} B_a x_b \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ijk} \sum_{ab} \epsilon_{abk} B_a \delta_{b,k} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ijk} \boxed{\epsilon_{akk}} B_a\end{aligned}$$

여기서 □에 들어간 부분을 보자. LeviCivita permutation의 밑 첨자에 들어간 문자 3개 중 2개가 같으므로 $\epsilon_{akk} = 0$ 이다. 따라서, $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ 이다.

그러면 vector potential 과 position 을 operator 로 생각해서, $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{X}$ 가 $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}$ 이 성립하는 것도 보여보자.

$$\begin{aligned}\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} &= \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{X}) \cdot \mathbf{P} \\ &= \frac{1}{2} \sum_c (\mathbf{B} \times \mathbf{X})_c P_c \\ &= \frac{1}{2} \sum_{abc} B_a X_b P_c \epsilon_{abc} \\ &= \frac{1}{2} \sum_a B_a \left(\sum_{bc} X_b P_c \epsilon_{abc} \right).\end{aligned}\tag{7.8}$$

마찬가지로

$$\begin{aligned}\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} &= \frac{1}{2} \sum_{abc} P_c B_a X_b \epsilon_{abc} \\ &= \frac{1}{2} \sum_a B_a \left(\sum_{bc} P_c X_b \epsilon_{abc} \right).\end{aligned}\tag{7.9}$$

이제 두 operator 들을 내적한 순서를 다르게 했을때 나오는 결과의 차이를 canonical commutator 를 이용해서 살펴보자.

$$\begin{aligned}\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{P} \cdot \mathbf{A} &= \frac{1}{2} \sum_a B_a \left(\sum_{bc} \underbrace{[X_b, P_c]}_{=i\hbar\delta_{b,c}} \epsilon_{abc} \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2} \sum_a B_a \left(\sum_b \underbrace{\epsilon_{abb}}_{=0} \right) \\ &= 0\end{aligned}\tag{7.10}$$

$$\therefore \quad \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}.\tag{7.11}$$

7.3 Section 2.2

Chapter 2. 의 필자는 Chapter 7. 의 필자에게 다음의 Baker–Campbell–Hausdorff formula를 보이라는 미션을 던졌다.

$$e^A B e^{-A} = B - [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \cdots = \sum_{n=0}^{+\infty} \underbrace{\frac{(-1)^n}{n!} [A, \cdots [A, B]]}_{n^s A^s} \quad (7.12)$$

수 차례의 개 짱 노가다를 한 끝에 정리된 식을 얻었으므로 ~~흐마내사간ㅠㅠㅠ~~ 이를 설명해보겠다.

$$\begin{aligned} e^A B e^{-A} &= \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} A^m \right) B \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} A^n \right) \\ &= \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} A^m \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} B A^n \right) \end{aligned}$$

필자는 이 맥락에서 다음과 같이 $f(n), g(m), h(n, m)$ 이라는 새로운 notation 을 사용할 것이다.

$$f(n) = \frac{1}{n!} B A^n$$

$$g(m) = \frac{1}{m!} A^m$$

$$h(m, n) = f(n)g(m)$$

이를 이용하여 위의 식을 다시 정리해보면,

$$\begin{aligned} e^A B e^{-A} &= \left(g(0) + g(1) + g(2) + g(3) + \cdots \right) \left(f(0) - f(1) + f(2) - f(3) + \cdots \right) \\ &= \underbrace{\left(f(0)g(0) \right)}_{m+n=0} - \underbrace{\left(f(1)g(0) - f(0)g(1) \right)}_{m+n=1} + \underbrace{\left(f(2)g(0) - f(1)g(1) + f(0)g(2) \right)}_{m+n=2} - \cdots \\ &= \underbrace{\left(h(0, 0) \right)}_{m+n=0} - \underbrace{\left(h(1, 0) - h(0, 1) \right)}_{m+n=1} + \underbrace{\left(h(2, 0) - h(1, 1) + h(0, 2) \right)}_{m+n=2} - \cdots \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \left(\sum_{n=0}^i (-1)^n h(i-n, n) \right) = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \left(\sum_0^i \frac{(-1)^n}{(i-n)!n!} A^{i-n} B A^n \right) \end{aligned}$$

위 식의 마지막 줄에서 combination ${}^i C_n = \frac{i!}{(i-n)!n!}$ notation 을 도입하자. 여기서 ${}^{i-1} C_n + {}^i C_{n+1} = {}^i C_{n+1}$ 임을 활용하자.

$$\begin{aligned} e^A B e^{-A} &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!} \left(\sum_{n=0}^i {}^i C_n (-1)^n A^{i-n} B A^n \right) \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!} \left(\sum_{n=0}^{i-1} (-1)^n [{}^{i-1} C_n A^{i-n} B A^n - {}^{i-1} C_n A^{i-n-1} B A^{n+1}] \right) \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!} \left(\sum_0^{i-1} (-1)^n {}^{i-1} C_n A^{i-n-1} [A, B] A^n \right) \end{aligned}$$

o] 번엔 $i-1 C_{n+1} = {}^{i-2}C_n + {}^{i-2}C_{n+1}$ 을 활용하자. 계속해서

$$\begin{aligned}
 e^A B e^{-A} &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!} \left(\sum_{n=0}^{i-2} (-1)^n [{}^{i-2}C_n A^{i-n-1} [A, B] A^n - {}^{i-2}C_n A^{i-n-2} [A, B] A^{n+1}] \right) \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!} \left(\sum_{n=0}^{c-2} (-1)^n A^{i-n-2} [A, [A, B]] A^n \right) \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!} \left(\sum_{n=0}^{c-3} (-1)^n A^{i-n-3} [A, [A, [A, B]]] A^n \right) \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!} \left(\sum_{n=0}^0 (-1)^n A^{i-n-i} [A, \dots [A, B] \dots] A^n \right) \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!} \left(\underbrace{[A, \dots [A, B]]}_{i 'A's} \right)
 \end{aligned}$$

이 부분 타이핑하느라 뒤지는 줄 알았다.

본문에서 또한, complex exponential function의 적분이 dirac delta function이 되는 것을 언급했는데 여기서 필자가 할 수 있는 한 자세히 다루겠다. 먼저, Fourier Transform과 Inverse Fourier Transform을 살펴보자. 우리는 알고 있다. 함수가 어떤 모양이든 간에 여러 주파수 대역의 sinusoidal function $\exp(i\omega t)$ 의 superposition으로 나타낼 수 있다는 사실을, Fourier Transform은, t 에 관한 함수 $f(t)$ 을 frequency 대역에서 보기 위해서 적분변환을 하는 것이다. 즉, 해당 frequency의 sinusoidal function이 $f(t)$ 에서 얼마나 만큼의 비중을 차지하고 있는지를 보는 것이다. t 에 관한 함수 $f(t)$ 의 Fourier Transform은 다음과 같이 정의 된다.

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t') e^{-i\omega t'} dt' \quad (7.13)$$

Inverse Fourier Transform은 frequency 대역에서의 spectrum을 다시 $f(t)$ 로 복원시키는 과정이다. 해당 frequency ω 의 sinusoidal function이 $f(t)$ 에서 차지하는 비중에 $\exp(i\omega t)$ 곱해주면 된다.

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad (7.14)$$

$f(t)$ 가 normalizable 하면, 위 Transform 과 Inverse Transform은 $f(t)$ 의 형태에 상관없이 항상 성립한다. 이 Transform 과 Inverse Transform 이 항상 성립하기 위해선 다음 적분이 성립하여 한다.

$$\begin{aligned} \delta(t - t') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t-t')} d\omega \\ \delta(\omega - \omega') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-\omega')t} dt \end{aligned} \quad (7.15)$$

식 (7.15)을 살펴보자. 먼저, $\omega = \omega'$ 일 때를 보자. 지수 부분이 0 이 되어 식 (7.15)의 integrand는 1이고 해당 적분은 1을 $-\infty$ 에서 ∞ 까지 적분하는 것이므로 적분 결과는 무한대이다. $\omega \neq \omega'$ 일 때, 식 (7.15)의 integrand는 \cos 과 $i\sin$ 의 선형 결합으로 이루어진, 주기가 $\tau = \frac{2\pi}{\omega - \omega'}$ 인 주기함수이다. integrand를 $[0, \tau]$ 에서 t 에 대해서 적분하면 0 이 되는 건 obvious 하다. $[0, 2\tau]$ 에서도, $[-4\tau, 9\tau]$ 에서도, $[-25\tau, 25\tau]$ 에서 적분해도 결과는 0 이다. τ 단위의 구간에서 적분하는 것을 무한한 구간에서 생각해보면, 식 (7.15)의 적분은 ($\omega = \omega'$ 일 때,) 0 이 됨을 알 수 있다. 지금까지 내가 말한 것을 종합해보면, 식 (7.15)의 적분은 $\omega = \omega'$ 일 때 무한대, $\omega \neq \omega'$ 일 때 0 이므로 혹시 $\delta(\omega - \omega')$ 가 아닐까 생각해볼수 있다.

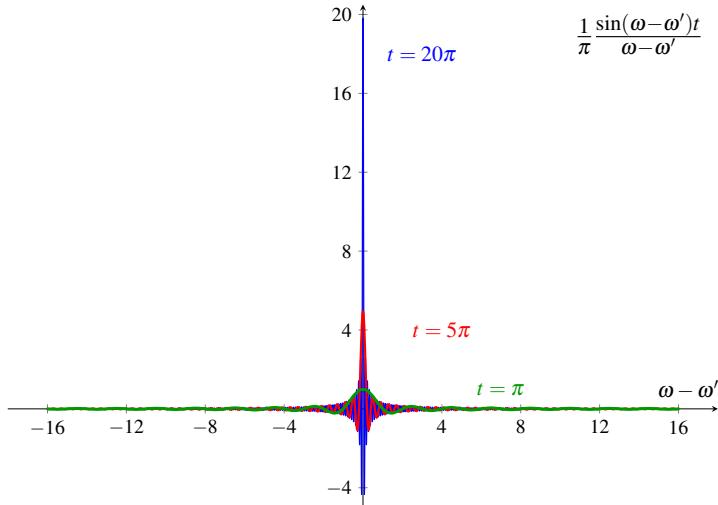


Figure 7.1: 가로축은 $\omega - \omega'$ 에 해당한다. 초록색, 빨간색, 파란색은 각각 $t = \pi, t = 5\pi, t = 20\pi$ 인 경우에 해당한다.

위 적분을 다음과 같은 극한으로 생각해보자.

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-\omega')t} dt \right] &= \frac{1}{2\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t e^{i(\omega-\omega')\tau} d\tau = \frac{1}{2\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t \cos((\omega - \omega')\tau) + i \sin((\omega - \omega')\tau) d\tau \\ &= \frac{1}{2\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t \cos((\omega - \omega')\tau) d\tau = \boxed{\frac{1}{\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin((\omega - \omega')t)}{\omega - \omega'}} \end{aligned} \quad (7.16)$$

위 적분에서 \sin term은 odd symmetry 때문에 소거하였다. 식 (7.16)의 아래쪽의 box에 들어간 term을 몇 개의 그래프를 plot 한 것을 그림7.1에 첨부하였다.

그림 7.1에서 t 가 커짐에 따라 curve가 delta function처럼 sharp 해짐을 볼 수 있을 것이다. 여기서 이론적으로 우리는 예측을 할 수 있다. $\frac{1}{\pi} \frac{\sin((\omega - \omega')t)}{\omega - \omega'}$ 을 t 에 대해서 적분해서 나온 곡선은 $(\omega - \omega') = 0-$ 와 $(\omega - \omega') = 0+$ 에서의 함수값의 차가 1만큼 나는 step function 이 나올 것이라고.

이를 보이기 위해서 우리는, 임의의 $k > 0$ 인 k 에 대해

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(kz)}{z} dz = \pi \quad (7.17)$$

임을 복소적분을 확인해볼 것이다. 일단, 실수인 z 에 대해 $\exp(ikz)$ 의 허수부가 $\sin(kz)$ 이므로 우리는 다음 적분을 계산 한뒤, 그의 허수부분만 살펴볼 것이다.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikz}}{z} dz \quad (7.18)$$

먼저 그림7.2과 같은 적분경로를 구상하여 보자. 필자는 적분 구간을 나눠서 설명을 하기 위해 경로별로 색을 다르게 입혔다. 위 그림에서 빨간색 곡선은 원점을 중심으로 하는 반지름이 $\epsilon (\ll 1)$ 인 반원이고, 검은색 곡선은 원점을 중심으로 하는 반지름이 무한대인 반원이다. 가로축 위에선 z 는 실수이고, ϵ 이 매우 작다는 점을 생각하면 식(7.18)의 적분은 위 그림에서 파란색 경로를 따라 적분한 것으로 간주할 수 있다.

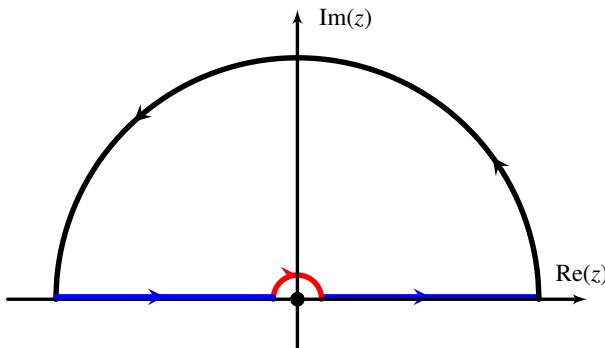


Figure 7.2: Path for complex integral in (7.18). For better explanation, each parts of curve are marked with different colors.

검은색 곡선

여기서의 적분은 0이라고 둘 수 있다. 왜냐하면, 해당 경로 상에서 $|z|$ 는 무한대이고, $z = R e^{i\theta} = x + iy$ 라고 하면 $dz = iR e^{i\theta} d\theta$ ($0 \leq \theta \leq \pi$) 이고, $y > 0$ 이므로 식(7.18)의 적분은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned} \int_{\text{Black}} \frac{e^{ikz}}{z} dz &= \int_0^\pi \frac{e^{ik(x+iy)}}{R e^{i\theta}} iR e^{i\theta} d\theta = i \int_0^\pi e^{ikx-ky} d\theta \\ &= i \int_0^\pi \cos(kR\cos\theta) e^{-kR\sin\theta} d\theta - \int_0^\pi \sin(kR\cos\theta) e^{-kR\sin\theta} d\theta \end{aligned} \quad (7.19)$$

0위 식의 두번째 줄의 적분의 integrand는 $e^{-kR\sin\theta}$ 가 공통적으로 있다. R 이 무한대로 크다고 하였으므로 integrand는 0으로 볼 수 있다. 그리고 실제로 저 식에서 $(kR) \rightarrow +\infty$ 극한을 취하면 적분값이 0으로 수렴하는 것을 볼 수 있으나, 필자는 이거까지 타이핑하기 힘들어서 포기하고 말았다. 이걸 확인하는 것은 여러분들의 몫으로 남겨놓겠다. 아무튼, 검은색 반원상에서의 적분값은 0이다.

빨간색 곡선

여기서의 적분값은 $-i\pi$ 가 나온다. 이 곡선의 반지름은 ϵ 으로 어어어어엄청 작다고 가정하였다. 이 곡선상에서 $z = \epsilon e^{i\theta}$ 라고 둔다면 $dz = ie^{i\theta} d\theta$ 이고, $|z| \lll 1$ 이므로 $e^{ikz} \simeq e^0 = 1$ 라고 두자. 여기서 integrand를 적분하면

$$\int_{\text{Red}} \frac{e^{ikz}}{z} dz = \int_\pi^0 \frac{e^{ikz}}{R e^{i\theta}} iR e^{i\theta} d\theta = -i \int_0^\pi 1 d\theta = -i\pi \quad (7.20)$$

가 나온다.

다음으로 Residue theorem 을 적용해보자. (7.18)의 pole 은 (Integrand 의 분모를 0으로 만드는 복소수를 pole 이라고 함) $z = 0$ 이고, 파란색, 빨간색, 검은색 곡선은 $z = 0$ 을 enclose 하지 않는 폐곡선을 형성한다. 이 폐곡선이 enclose 하는 pole 은 없으므로 여기를 따라 $\oint \frac{e^{ikz}}{z} dz$ 적분한 값은 0 이 나온다. 세 segment 의 적분값을 합한게 0 이 되므로, (파란색 적분은 z 가 순전히 실수인 범위에서만 계산함을 잊지 말으시라!!!!)

$$\begin{aligned} 0 + (-i\pi) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikz}}{z} dz &= 0 \\ \therefore \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikz}}{z} dz &= i\pi \end{aligned} \quad (7.21)$$

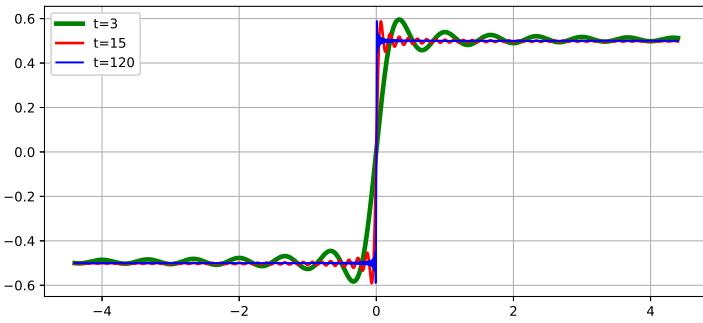


Figure 7.3: 가로축은 $\omega - \omega'$ 에 해당하고, 세로축은 $(1/\pi) \int_{-\infty}^{\infty} (\sin(\omega - \omega')t / \omega - \omega') d\omega$ 의 결과에 해당한다. 초록색, 빨간색, 파란색은 각각 $t = 3, t = 15, t = 120$ 인 경우에 해당한다. 다음 페이지에 이 그림을 얻기 위해 사용된 python 코드도 실어놨으니 읽고 싶으면 읽으시라.

따라서, 우리가 구하고픈 놈 $\int_{-\infty}^{\infty} \sin(kz)/z dz$ 의 적분은 (7.21)의 허수부분 이므로¹

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(kz)}{z} dz = \pi} \quad (7.22)$$

이다. 그림7.3의 그래프를 통해서 시각적으로 확인해보시라. 위 식에서 $k \rightarrow t, z \rightarrow (\omega - \omega'), dz \rightarrow d\omega$ 로 고쳐서 쓰면,

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin(\omega - \omega')t}{\omega - \omega'} d\omega = 1$$

이 나온다. 여기서 좌변에 $t \rightarrow +\infty$ 극한을 취하면 좌변은 $\delta(\omega - \omega')$ 으로 가버리므로

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin(\omega - \omega')t}{\omega - \omega'} d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\omega - \omega') d\omega = 1$$

그렇다. 극한을 취해도 정말 make sense 한다. 지금까지 복소적분이니 그래프니 여러 과정을 통해 다음이 성립함을 확인하였다.

$$\delta(\omega - \omega') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega - \omega')t} dt \quad (7.23)$$

여기서 t 와 ω 를 각각 x 와 k 로 바꾸자.² 여기서 k 는 wave number $\frac{2\pi}{\lambda}$ 이다.

$$\delta(k - k') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k - k')x} dx \quad (7.24)$$

¹참고로, 식(7.21)의 적분은 $k > 0$ 일 때 성립하는 것이다. 그러면 $k < 0$ 일 때는? 그림7.2에서 빨간색과 검은색의 반원을 x 축에 대해서 뒤집어서 생각해보면 된다. 여전히 검은색 반원의 적분은 뒤집어도 0이 나오고, 빨간색 반원은 pole $z = 0$ 을 중심으로 시계반대방향으로 π 만큼 도니까 식(7.21)의 적분은 $k < 0$ 일 때 $-i\pi$ 가 된다는 말이다.

² (t, ω) 를 (x, k) 로 바꾸는 것은 다음과 같은 sinusoidal wave로 부터 알 수 있다. 진폭이 A 이면서 $+x$ 방향으로, v 의 속도로 진행하는 파장이 λ 인 정형파를 생각해보자. 파동의 수직 변위를 y 라고 한다면,

$$y(x, t) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}(x - vt)\right) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - \frac{2\pi v}{\lambda}t\right) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - 2\pi ft\right) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - \frac{2\pi}{\tau}t\right)$$

라고 쓸 수 있다. sin안에, x, t 에 곱해져 있는 값을 보자. $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ 는 wave number, $\omega = \frac{2\pi}{\tau}$ 는 angular frequency 라고 한다. wave number k 는 2π 를 y 가 공간 x 에 대해서 반복되는 주기, 정도'로 나눈 것이다, angular frequency ω 는 2π 를 ' y 가 시간 t 에 대해서 반복되는 주기, 정도'로 나눈 것이다. 따라서, 식(7.23)에서 t 를 x 라고 썼을 때, ω 를 k 로 바꿔주는게 맞다고 볼 수 있다.

식(7.24)에 De Broglie relation $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ 을 대입하면³

$$\delta(p - p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} dx \quad (7.25)$$

이 나온다. 또한, Dirac delta 는 even function 이므로 $\delta(p - p') = \delta(p' - p)$ 이다.

여기는 읽을 사람만 보시라. 그림7.3을 그리는데 사용한 python code 도 설명하려고 한다.

```

1 from matplotlib import pyplot as plt
2 import math
3
4 w=[-4.2] #initial value of omega is -4.2.
5
6 #initial value of y1, y2, y3 is 0.
7 t1=3; y1=[0]; r1=[-.5]; # r1=(integral of y1 dw).
8 t2=15; y2=[0]; r2=[-.5]; # r2=(integral of y2 dw).
9 t3=120; y3=[0]; r3=[-.5]; # r3=(integral of y3 dw).
```

첫 두줄에서 plot에 필요한 python module 을 불러왔다. 4번째를 보시라. Plot 을 $-4.2 \leq (\omega - \omega') \leq 4.2$ 범위에서 하기 위해 $\omega - \omega'$ 에 해당하는 w 리스트의 첫 항목을 -4.2로 하였다. 그 다음 줄들도 보자. 여기서 y 는 $y(w) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin(\omega t)}{w}$ 이고, $r(w) = \int y(w)dw$ 에 해당한다. r 을 $r(w = -4.2) = -0.5$ 이게 하고 싶어서 $r1$, $r2$, $r3$ 리스트의 첫 항목들을 전부 -.5로 설정하였다.

```

1 dw=0.003
2
3 for i in range(int(8.4/dw)): #To carry out for -4.2<w<4.2
4     w.append(w[-1]+dw)
5     #For t=3:
6     y1.append((1/math.pi)*math.sin(w[-1]*t1)/w[-1])
7     r1.append(r1[-1]+y1[-1]*dw)
8     #For t=15:
9     y2.append((1/math.pi)*math.sin(w[-1]*t2)/w[-1])
10    r2.append(r2[-1]+y2[-1]*dw)
11    #For t=120:
12    y3.append((1/math.pi)*math.sin(w[-1]*t3)/w[-1])
13    r3.append(r3[-1]+y3[-1]*dw)
```

이건 plot 하기 위한 구조가 되는 부분이다. for 문을 통하여 w리스트에는 -4.2에서 시작하여 0.003 간격으로 4.2 까지의 float가 채워져 있다. $y1$, $y2$, $y3$ 은 $t=3$, 15 , 120 일 때의 y 에 해당하는 리스트이며, $r1$, $r2$, $r3$ 은 각 y 리스트를 w 에 대해서 적분한 리스트이다. 적분은 위 코드에서 7번째, 10 번째, 13번째 줄과 같이 $\int_a^b f(x)dx = \sum_i f(a + i\Delta x)\Delta x$ 처럼 절끔절끔 더해가는 방법으로 진행하였다.

```

1 plt.figure(1)
2 plt.plot(w,r1,'g',label='t=3') #Plot of integral when t=3.
3 plt.plot(w,r2,'r',label='t=15') #Plot of integral when t=15.
4 plt.plot(w,r3,'b',label='t=120') #Plot of integral when t=120.
5 plt.xlim((-4.5, 4.5))
6 plt.ylim((-0.6, 0.6))
7 plt.legend()
8 plt.grid()
9
10 plt.show()
```

마지막으로 plot을 그리고, 곡선의 색을 설정하고, 격자를 보이게 하는등 그래프를 설정하는 부분이다. 마지막 줄처럼 plt.show()가 반드시 있어야 저 코드를 compile 했을 때 plot 을 그린 창이 뜬다.

³De Broglie's matter wave를 생각해보자. 물질파의 파장 λ 와 물체의 운동량 p 는 $p = \frac{\hbar}{\lambda}$ 의 관계를 가지므로,

$$p = \frac{\hbar}{\lambda} = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

에서 p 가 wave number k 의 \hbar 배임을 확인할 수 있다. 이를 3차원으로 일반화 시키면 $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ 가 된다.

7.4 Section 3.4

Addition of Angular Momentum에서 필자는 다음의 relations를 여기서 확인하라고 하였다.

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_{1(2)}^2] = 0, \quad [\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1] = 2i\hbar\mathbf{J}_1 \times \mathbf{J}_2$$

$$[\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2] = 0, \quad [\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2] = 0$$

\mathbf{J}_1 와 \mathbf{J}_2 가 작용하는 space가 완전히 다르므로 두 operator의 각 성분들은 서로 commute 한다. ($[J_{1a}, J_{2b}] = 0$ For all a, b .) 이 점을 생각하면 세번째와 네번째 relation이 0이 되는 것을 쉽게 납득할 수 있을 것이다. 그러면, 첫번째와 두번째 relation만 살펴보자. $\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}$ 임을 이용하자. $[\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2] = [\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2] = 0$ 이므로

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2] &= 2[J_{1z}J_{2z}, \mathbf{J}_1^2] + [J_{1+}J_{2-}, \mathbf{J}_1^2] + [J_{1-}J_{2+}, \mathbf{J}_1^2] \\ &= 2\underbrace{[J_{1z}, \mathbf{J}_1^2]}_{=0} J_{2z} + \underbrace{[J_{1+}, \mathbf{J}_1^2]}_{=0} J_{2-} + \underbrace{[J_{1-}, \mathbf{J}_1^2]}_{=0} J_{2+} \\ &= 0 \end{aligned}$$

위와 같은 과정을 통해서 $[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_2^2] = 0$ 인 것도 알 수 있다. 이제, 두번째 relation도 확인해보자.

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1] &= \underbrace{[\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_1]}_{=0} + \underbrace{[\mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}_1]}_{=0} + 2[J_{1x}J_{2x} + J_{1y}J_{2y} + J_{1z}J_{2z}, \mathbf{J}_1] \\ &= 2 \left[\sum_a J_{1a}J_{2a}, \sum_b J_b \hat{\epsilon}_b \right] \\ &= 2 \sum_{ab} [J_{1a}J_{2a}, J_{1b}] \hat{\epsilon}_b = 2 \sum_{ab} [J_{1a}, J_{1b}] J_{2a} \hat{\epsilon}_b \\ &= 2i\hbar \sum_{abc} J_{1c} J_{2a} \epsilon_{abc} \hat{\epsilon}_b = 2i\hbar \sum_{abc} J_{1a} J_{2b} \epsilon_{abc} \hat{\epsilon}_c \\ &= 2i\hbar \mathbf{J}_1 \times \mathbf{J}_2 \end{aligned}$$

마찬가지로 $[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_2] = 2i\hbar \mathbf{J}_2 \times \mathbf{J}_1$ 이다.

또한, 필자는 Clebsch Gordon Coefficient 가 다음의 relation 를 보이는 이유를 여기서 확인하라고 하였다.

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j-m)(j+m+1)} C_{m_1, m_2, m+1}^{j_1, j_2, j} \\ &= \sqrt{(j_1 - m_1 + 1)(j_1 + m_1)} C_{m_1-1, m_2, m}^{j_1, j_2, j} + \sqrt{(j_2 - m_2 + 1)(j_2 + m_2)} C_{m_1, m_2-1, m}^{j_1, j_2, j} \\ \\ & \sqrt{(j+m)(j-m+1)} C_{m_1, m_2, m-1}^{j_1, j_2, j} \\ &= \sqrt{(j_1 + m_1 + 1)(j_1 - m_1)} C_{m_1+1, m_2, m}^{j_1, j_2, j} + \sqrt{(j_2 + m_2 + 1)(j_2 - m_2)} C_{m_1, m_2+1, m}^{j_1, j_2, j} \end{aligned} \quad (7.26)$$

$$\begin{aligned} & \left| C_{(m_1=j_1), (m_2=j_2), (m=j_1+j_2)}^{j_1, j_2, (j=j_1+j_2)} \right| \\ &= \left| \langle j_1, j_2, (m_1 = j_1), (m_2 = j_2) | j_1 j_2; (j = j_1 + j_2), (m = j_1 + j_2) \rangle \right| = 1 \end{aligned}$$

(따바 아가 타이핑 겁나 막막하네) 진밀 안 하고 바로 계산과정 들어가겠다. 먼저, 다음의 식에서 시작한다. ($m_{1(2)}$ 에 왜 '이' 왜 붙었나 궁금해 할 수 있는데 변수를 아끼기 위해서 저렇게 해 놓은거니 이해바람.)

$$|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1' m_2' m}^{j_1 j_2 j} |j_1 j_2; m_1' m_2'\rangle \quad (7.27)$$

$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ 에서 $J_+ = J_{1+} + J_{2+}$ 이므로 (7.27)의 좌변에 J_+ 를, 우변에 $J_{1+} + J_{2+}$ 를 붙여보자.

$$J_+ |j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1', m_2'} (J_{1+} + J_{2+}) C_{m_1' m_2' m}^{j_1 j_2 j} |j_1 j_2; m_1' m_2'\rangle$$

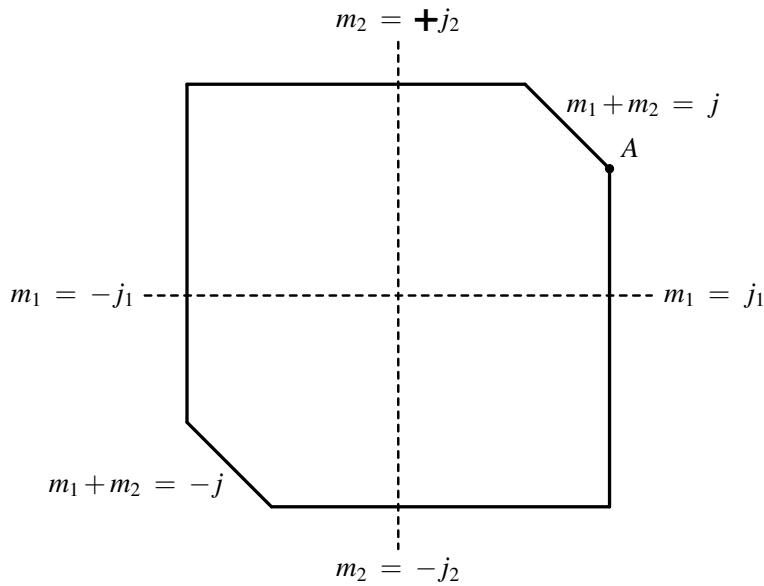
$$\begin{aligned} & \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j_1 j_2; j m+1\rangle \\ &= C_{m_1' m_2' m}^{j_1 j_2 j} \sum_{m_1', m_2'} \left(\sqrt{(j_1 - m_1')(j_1 + m_1' + 1)} |j_1 j_2; m_1' + 1 m_2'\rangle + \sqrt{(j_2 - m_2')(j_2 + m_2' + 1)} |j_1 j_2; m_1' m_2' + 1\rangle \right) \end{aligned}$$

정말로다가 괴상망측한 식이 튀어나왔다. 이제 양변에 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2|$ 를 붙여보자.

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \underbrace{\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m+1 \rangle}_{= C_{m_1 m_2 m+1}^{j_1 j_2 j}} \\ &= \sum_{m_1', m_2'} \sqrt{(j_1 - m_1')(j_1 + m_1' + 1)} C_{m_1' m_2' m}^{j_1 j_2 j} \underbrace{\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | m_1' + 1 m_2'\rangle}_{= \delta_{m_1'+1, m_1} \delta_{m_2', m_2}} \\ &+ \sum_{m_1', m_2'} \sqrt{(j_2 - m_2')(j_2 + m_2' + 1)} C_{m_1' m_2' m}^{j_1 j_2 j} \underbrace{\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | m_1' m_2 + 1'\rangle}_{= \delta_{m_1', m_1} \delta_{m_2', m_2+1}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \therefore \sqrt{(j-m)(j+m+1)} C_{m_1, m_2, m+1}^{j_1, j_2, j} \\ &= \sqrt{(j_1 - m_1 + 1)(j_1 + m_1)} C_{m_1-1, m_2, m}^{j_1, j_2, j} + \sqrt{(j_2 - m_2 + 1)(j_2 + m_2)} C_{m_1, m_2-1, m}^{j_1, j_2, j} \end{aligned}$$

이렇게 함으로써 식(7.26)의 첫번째 식을 유도해냈다. 두번째 식은 J_+ 가 아닌 J_- 를 가하고, 위와 비슷한 주오같은 계산과정을 거쳐서 얻을 수 있다. 이제, (7.26)의 세 번째 식을 확인해보자. 그 전에 2.3.4에서 봤던 그림을 다시 떠올려 보자고. 앞에서도 밀했다시피 가로축은 m_1 에, 세로축은 m_2 에 해당한다. 가로 및 세로축과 평행한 네 개의 선분은 각각 $m_1 = \pm j_1, m_2 = \pm j_2$ 이고, 가로 및 세로축과 45도 각을 이루는



선분은 직선 $m_1 + m_2 = j$ 의 일부이며, j 가 가질 수 있는 값은 $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ 라고 하였다. 그러면 직선 $m_1 + m_2 = j$ \circlearrowleft $m_2 = j_2$ 와 $m_1 = j_1$ 과 만나는 점의 m_1 좌표는 각각 $j - j_2, j_1$ 이 될 것이다. 또한, section 2.3.4 에서 봤던 CG-coefficient의 2번째 성질을 remind 해보라. CG-coefficient 는 $m = m_1 + m_2$ 일때만 의미있다. 그러므로

$$|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2 m}^{j_1 j_2 j} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$$

에서 m_2 에 대한 summation 을 $m_2 = m - m_1$ 으로만 국한시키자. 그러면 summation 은 m_1 에 대해서만 할 건데, 가능한 m_1 의 범위는 $j - j_2 \leq m_1 \leq j_1$ 이다. 그러면,

$$|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1=j-j_2}^{j_1} C_{m_1 (m-m_1) m}^{j_1 j_2 j} |j_1 j_2; m_1 (m-m_1)\rangle.$$

우리는 $j = j_1 + j_2$ \circlearrowleft $m_1 = j_1, m_2 = j_2$ 에서 $m = j_1 + j_2$ 인 경우를 보고 있으므로,

$$\begin{aligned} |j_1 j_2; (j_1 + j_2)(j_1 + j_2)\rangle &= \sum_{m_1=j_1}^{j_1} C_{m_1 (j_1 + j_2 - m_1) (j_1 + j_2)}^{j_1 j_2 (j_1 + j_2)} |j_1 j_2; m_1 (j_1 + j_2 - m_1)\rangle \\ &= C_{(m_1=j_1)(m_2=j_1)(m=j_1+j_2)}^{j_1 j_2 (j=j_1+j_2)} |j_1, j_2; (m_1 = j_1)(m_2 = j_2)\rangle \end{aligned}$$

위 식에서 \square 에 들어간 ket 을 보자. 두 ket 은 normalized 되어 있으므로 두번째 줄에 있는 CG-coefficient 는 1이 될 수 밖에 없다.

7.5 Section 4.2

Fine structure 단원에서 나오는 계산들은 하나같이 주옥같다. 먼저,

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \langle nlm_l | \frac{1}{r} | nlm_l \rangle$$

을 계산하는 과정을 살펴보자. Griffiths 저 양자역학 교재 2e을 읽다 보면 6.12번 문항을 살펴보라고 한다. 6.12번 문항을 보면 4.40번 문항을 보라고 한다. 그래서 4.40번 문항을 보면 3.31번 문항으로 보고 오라고 한다.(아오 짜증나 ㅋㅋㅋㅋ 사람 약올리는거 같다) 그래서 필자는 그 책의 3.31번, 4.40, 6.12번 문항 순서로 설명을 할 것이다.

3.31번

여기서 우리의 목표는 Erhenfest's Theorem 을 이용해서 다음의 식을 보이는 것이다.

$$\frac{d}{dt} \langle xp \rangle = 2\langle T \rangle - \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle = 0 \quad (7.28)$$

Erhenfest's Theorem 에 따르면 time dependancy가 없는 observable Q ,의 기댓값 $\langle Q \rangle$ 는 $H|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle$ 때문에 time dependancy를 가지므로 다음의 식을 따른다.

$$\frac{d}{dt} \langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, Q] \rangle \quad (7.29)$$

여기에 $\hat{Q} = xp$ 를 대입하면,

$$\begin{aligned} [H, xp] &= [H, x]p + x[H, p] \\ &= -\frac{i\hbar p^2}{m} + i\hbar x \frac{dV}{dx} = -i\hbar 2T + i\hbar x \frac{dV}{dx} \end{aligned} \quad (7.30)$$

이므로, 계속 식을 적으면

$$\frac{d}{dt} \langle xp \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, xp] \rangle = 2\langle T \rangle - \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle \quad (7.31)$$

이다. 특정 energy eigenstate 에서 expectation value 를 계산한다면,^a

$$\begin{aligned} \boxed{\langle \hat{Q} \rangle_{t'=t}} &= \langle \psi_n(t' = t) | \hat{Q} | \psi_n(t' = t) \rangle \\ &= \langle \psi_n(t' = 0) | e^{iE_nt/\hbar} \hat{Q} e^{-iE_nt/\hbar} | \psi_n(t' = 0) \rangle \\ &= \langle \psi_n(t' = 0) | \hat{Q} | \psi_n(t' = 0) \rangle = \boxed{\langle \hat{Q} \rangle_{t'=0}} \end{aligned} \quad (7.32)$$

여기서, operator 의 expectation value 는 시간 t 에 대한 dependancy 가 없으므로, 즉, $\frac{d}{dt} \langle xp \rangle = 0$ 다음과 같은 식이 나온다.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle xp \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, xp] \rangle = 2\langle T \rangle - \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle = 0 \\ \therefore 2\langle T \rangle &= \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle \end{aligned} \quad (7.33)$$

^a $|\psi(t' = t)\rangle = \exp(-iE_nt/\hbar) |\psi(t' = 0)\rangle$ 되는 부분에 대한 설명은 본 문서의 chapter2, postulates 5번 항목에 설명되어있다. 또, 식(7.32)처럼 observable Q 의 expectation value가 time dependancy 가 없는 이런 state를 stationary state 라고 부른다.

4.40번

처음에, 살펴봐야 할 문항이 많아서 겁주는 식으로 말하긴 했으나, 이 문항은, actually, 3.31번 문항의 결과를 1차원에서 3차원으로 확장시키는 것에 불과하다. 식(7.33)을 다시 적어보자.

$$\begin{aligned} 2\left\langle \frac{p_x^2}{2m} \right\rangle &= \left\langle x \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \\ 2\left\langle \frac{p_y^2}{2m} \right\rangle &= \left\langle y \frac{\partial V}{\partial y} \right\rangle \\ 2\left\langle \frac{p_z^2}{2m} \right\rangle &= \left\langle z \frac{\partial V}{\partial z} \right\rangle \end{aligned} \quad (7.34)$$

(7.35)

식(7.34)의 세 줄을 모두 더해보면, 이 문제에서 원하는 결론이 나온다.

$$\begin{aligned} 2\left\langle \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} \right\rangle &= 2\langle T \rangle \\ = \left\langle x \frac{\partial V}{\partial x} + y \frac{\partial V}{\partial y} + z \frac{\partial V}{\partial z} \right\rangle &= \langle \mathbf{x} \cdot \nabla V \rangle \\ \therefore 2\langle T \rangle &= \langle \mathbf{x} \cdot \nabla V \rangle \end{aligned} \quad (7.36)$$

6.12번

4.40번까지 풀었으니, 이제 우리는 $\langle \frac{1}{r} \rangle$ 을 구할 차례에 이르렀다. 수소원자의 경우, $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) = T + V$ 이므로, $\langle H \rangle = \langle nlm_l | H | nlm_l \rangle = E_n^0 = \langle T \rangle + \langle V \rangle$ 이다. 또, $\mathbf{x} \cdot \nabla V$ 을 계산해보면,

$$\begin{aligned} \mathbf{x} \cdot \nabla V &= \mathbf{x} \cdot \nabla \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{x}|} \right) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} r \hat{e}_r \cdot \left(\frac{1}{r^2} \hat{e}_r \right) \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -V(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (7.37)$$

한면, 식(7.36)의 결과를 이용하면,

$$2\langle T \rangle = \langle \mathbf{x} \cdot \nabla V \rangle = -\langle V \rangle = 2E_n^0 - 2\langle V \rangle \quad (7.38)$$

식(7.38)에서 $\langle V \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle \frac{1}{r} \rangle$ 이고, $E_n^0 = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{1}{n^2}$ 이므로 계속해서 식을 더 쓰면,

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= 2E_n^0 \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{1}{n^2} \end{aligned} \quad (7.39)$$

이므로, 결국,

$$\boxed{\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \frac{1}{n^2} = \frac{1}{n^2 a}}$$

이제는 relativistic correction에서 $\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle$ 를 계산할 차례이다. 이는 Griffiths 저 양자역학 교재 2e의 6.32번과 6.33번을 이용해서 계산하면 된다.

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \langle nlm_l | \frac{1}{r} | nlm_l \rangle$$

여기서, 우리는 Feynman-Hellmann theorem을 사용할 것이다. 먼저 우리는 Hamiltonian operator가 어떤 parameter λ 에 depend한다고 가정한다. ($H = H(\lambda)$). λ 가 $\lambda + d\lambda$ 로 infinitesimal하게 변할 때, Hamiltonian의 변화량을 taylor expansion 해서 적어보면 다음과 같다.

$$H' = H(\lambda_0 + d\lambda) - H(\lambda_0) = \left(\frac{\partial H}{\partial \lambda} \right) d\lambda \quad (7.40)$$

식(7.40)의 제일 오른쪽에 있는 term은 perturbation으로 볼 수 있고, 이 term의 기댓값은 E_n^1 과 관련있는 것으로 볼 수 있다. $dE_n = E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle = \left\langle \psi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \psi_n \right\rangle d\lambda$ 에서 $\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle \psi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \psi_n \right\rangle$ 으로 볼 수 있다.

Griffiths 저 양자역학 교재 2e의 식(4.70)번에서 수소원자의 전자의 에너지 준위를 다음과 같이 l, j_{max} 를 이용하여 나타낸 부분이 있다.

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 (j_{max} + l + 1)^2} \quad (7.41)$$

위의 위 문단에서 만약 $\lambda = l$ 이면,

$$\frac{\partial E_n}{\partial l} = \frac{2me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 (j_{max} + l + 1)^3} = -\frac{2E_n}{n}; \quad \frac{\partial H}{\partial l} = \frac{\hbar^2}{2mr^2}(2l+1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_n}{\partial l} &= \left\langle \frac{\partial H}{\partial l} \right\rangle \\ &= \frac{2me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 (j_{max} + l + 1)^3} = -\frac{2E_n}{n} = \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{1}{n^3} = \left\langle \frac{\hbar^2}{2mr^2}(2l+1) \right\rangle = \frac{\hbar^2(l+1/2)}{m} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \\ \therefore \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle &= \frac{1}{n^3 (l + \frac{1}{2}) a^2} \end{aligned}$$

다음으로, spin orbin coupling에서 필요할 설명을 첨부하겠다. $H'_{SO} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ 이고, angular momentum operator 들은 $\frac{1}{r^3}$ 과 commute 하므로, H'_{SO} 를 상수들을 모조리 제외하고 $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ 라고 나타내겠다. 다음의 commutation relations를 계산해보자.

$$[\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{L}] = ?$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{L}] &= [\sum_i S_i L_i, \sum_j L_j \hat{e}_j] = \sum_{i,j} [S_i L_i, L_j \hat{e}_j] \\ &= \sum_{i,j} S_i [\mathbf{L}_i, \mathbf{L}_j] \hat{e}_j = \sum_{i,j} S_i \left(i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} \mathbf{L}_k \right) \hat{e}_j \\ &= \sum_{i,j} S_i i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k \hat{e}_j = i\hbar \sum_{i,j,k} \varepsilon_{ijk} S_i L_k \hat{e}_j \\ &= -i\hbar \sum_{i,j,k} \varepsilon_{ijk} S_i L_k \hat{e}_j = -i\hbar \mathbf{S} \times \mathbf{L} = \boxed{i\hbar \mathbf{L} \times \mathbf{S}} \end{aligned} \quad (7.42)$$

$$[\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{S}] = ?$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{S}] &= [\sum_i S_i L_i, \sum_j S_j \hat{e}_j] = \sum_{i,j} [S_i L_i, S_j \hat{e}_j] \\ &= \sum_{i,j} L_i [\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j] \hat{e}_j = \sum_{i,j} L_i \left(i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} S_k \right) \hat{e}_j \\ &= i\hbar \sum_{i,j,k} \varepsilon_{ijk} S_k L_i \hat{e}_j = i\hbar \sum_{i,j,k} \varepsilon_{kij} S_k L_i \hat{e}_j = \boxed{i\hbar \mathbf{S} \times \mathbf{L}} \end{aligned} \quad (7.43)$$

$$[\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{J}] = ?$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{J}] &= [\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{L} + \mathbf{S}] = [\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{L}] + [\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{S}] \\ &\quad i\hbar (\mathbf{L} \times \mathbf{S} + \mathbf{S} \times \mathbf{L}) = \boxed{0} \end{aligned} \quad (7.44)$$

$$[\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{L}^2] = ?$$

$$[\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{L}^2] = [\sum_i S_i L_i, \mathbf{L}^2] = \sum_i S_i \underbrace{[L_i, \mathbf{L}^2]}_{=0} = \boxed{0} \quad (7.45)$$

$$[\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{S}^2] = ?$$

$$[\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{S}^2] = [\sum_i L_i S_i, \mathbf{S}^2] = \sum_i L_i \underbrace{[S_i, \mathbf{S}^2]}_{=0} = \boxed{0} \quad (7.46)$$

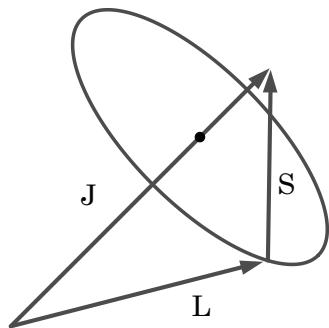
$$[\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{J}^2] = ?$$

$$[\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{J}^2] = [\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{L}^2] + [\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{S}^2] + 2[\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}] = 0 + 0 + 0 = \boxed{0} \quad (7.47)$$

다시, H'_{SO} 는 $\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ 이고, H'_{SO} 는 \mathbf{J} , \mathbf{L}^2 , \mathbf{S}^2 , \mathbf{J}^2 와 commute 함을 위에서 보였다. 이를 다음의 Erhenfest's Theorem 과 연관지어서 생각하자.

$$\frac{d}{dt} \langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, Q] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H_0, Q] \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [H'_{SO}, Q] \rangle$$

일단, $H = H_0 + H'_{SO}$ 이고, 모든 angular momentum operator 들은 H_0 와 commute 한다. Perturbing Hamiltonian 과 commute 하지 않는 operator 는 위 식에 따르면, expectation value 의 time derivative 가 0 이 아닌 값을 가지게 되므로, 즉, expectation value 가 time dependancy 를 가지게 된다. 밑의 그림으로 따지면, \mathbf{J} , \mathbf{L} , \mathbf{S} 의 크기와 \mathbf{J} 의 세 성분은 시간이 지나도 일정하게 유지된다. 한편, $\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ 이므로, \mathbf{L} 과 \mathbf{S} 의 세 성분은 시간에 따라 변화를 하게 된다. 대신, \mathbf{L} 벡터의 화살표 끝은 그림상의 원 궤도를 가리키고 있어야 한다.



따라서, $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ 의 기댓값을 구할 때, 위 6개의 operator 들 중에서, \mathbf{L} 의 eigenstate 인 $|nlsm_l\rangle$ 과 \mathbf{S} 의 eigenstate 인 $|nlsm_s\rangle$ 를 사용하는 거는 좋지 않다. 그러므로, \mathbf{J} 의 eigenstate 인 $|nlsjm_j\rangle$ 를 사용하는 것이 제일 좋다.

7.6 Section 6.1

o) section 에서는 다음의 극한을 살펴볼 것이다.

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2((\omega - \omega')t)}{(\omega - \omega')^2 t} = \delta(\omega - \omega')$$

필자는 (~~나파셜한 방법이다ㅠㅠㅠ~~) 위 식의 좌변을 다음과 같이 두개의 곱으로 나타낸 다음, 각각에 대해서 다루려고 한다.

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2((\omega - \omega')t)}{(\omega - \omega')^2 t} = \left[\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin((\omega - \omega')t)}{(\omega - \omega')} \right] \times \left[\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{\sin((\omega - \omega')t)}{(\omega - \omega')t} \right] \quad (7.48)$$

식(7.48)의 우변의 왼쪽 square bracket 의 극한은 식(7.16)에서 $\delta(\omega - \omega')$ 으로 간다는 것을 살펴봤다. 그러면, 이런 생각을 가져볼 수 있다. 식(7.48)의 우변의 오른쪽 square bracket 의 극한이 1로 가는게 아닐까?

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{\sin((\omega - \omega')t)}{(\omega - \omega')t} \quad (7.49)$$

이 극한을 다음과 같은 두 경우로 나눠서 생각해보자. (일단, t 는 $+\infty$ 로 발산하고 있다.)

- ($\omega - \omega'$)이 0으로 수렴하는 정도가 $t \rightarrow +\infty$ 발산하는 정도보다 더 커서, 즉 $(\omega - \omega')t$ 가 0으로 수렴하는 경우 수식을 여러번 쓰게 되므로 $(\omega - \omega')t = A$ 라고 하겠다. 그러면 식(7.49)의 극한은 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$\lim_{A \rightarrow 0} \frac{\sin(A)}{A} = \lim_{A \rightarrow 0} \frac{1}{A} \left(A - \frac{1}{3!} A^3 + \frac{1}{5!} A^5 - \dots \right) = 1$$

즉, $(\omega - \omega') \rightarrow 0$ 수렴하면, 식(7.49)의 극한은 1로 수렴한다.

- $(\omega - \omega') \neq 0$ 인 경우 t 는 양의 무한대로 발산하고 있으므로, $A \rightarrow +\infty$ 이다.

$$\lim_{A \rightarrow +\infty} \frac{\sin(A)}{A} = \frac{\sin(\text{LARGE})}{\text{LARGE}} = 0$$

바로 위의 식에서 분자는 1과 -1 사이에서 진동하고, 분모는 양의 무한대로 발산한다. 따라서 이 경우에는 식(7.49)의 극한이 0으로 수렴한다.

위의 결과에서 얻은 결론을 Fig 7.4으로 시각적으로 해 볼수 있다. 함수의 극한값은 그림에서의 곡면의 z값(파란색 축의 좌표값)으로 볼 수 있다. ω 와 ω' 가 아주 근접한 지점에서는 함수의 극한값이 1에 가깝고, $t > 0$ 이며 $\omega \neq \omega'$ 인 지점에서는 극한값이 0에 가까운걸 확인할 수 있다.

추가적으로, 비교를 위해 $\frac{1}{\pi} \frac{\sin((\omega - \omega')t)}{(\omega - \omega')}$ 와 $\frac{1}{\pi} \frac{\sin^2((\omega - \omega')t)}{(\omega - \omega')^2 t}$ 의 극한값을 시각적으로 보여주는 것도 Fig7.5에서 그림으로 넣었다. $\delta(\omega - \omega')$ 은 $(\omega - \omega')=0$ 일 때 무한대이고, 아닐 때는 0의 값을 갖는다. Fig7.5(a)의 $t \rightarrow +\infty$ 극한도 $\delta(\omega - \omega')$ 가 나오는데 여기에 $\omega - \omega' = 0$ 인 부분에는 1을 곱해주고 $t > 0, \omega \neq \omega'$ 인 부분에는 0을 곱해주는 $\frac{\sin((\omega - \omega')t)}{(\omega - \omega')t}$ 가 곱해져서 Fig7.5(b)의 $t \rightarrow +\infty$ 극한도 $\delta(\omega - \omega')$ 가 나온다.

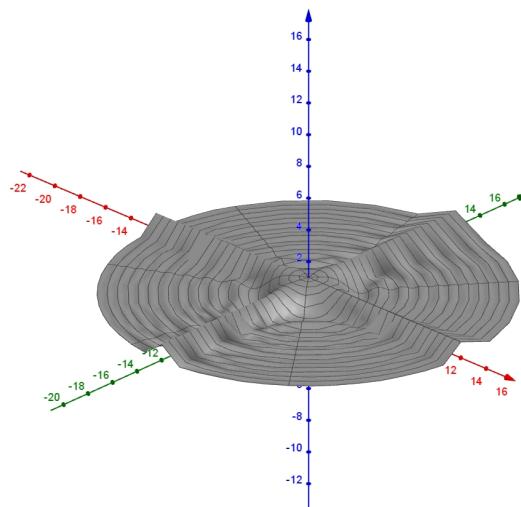


Figure 7.4: $\frac{\sin((\omega-\omega')t)}{(\omega-\omega')t}$ 을 시각적으로 보여주는 3D plot 이다. 그림에서 빨간색 가로축은 $(\omega-\omega')$ 을, 초록색 세로축은 t 를 나타낸다. $(\omega-\omega')$ 가 0 근처인 분에서 곡면의 높이값은(파란색 높이 축, z-value) 1 이고, $(\omega-\omega')$ 가 0이 아닌 부분에서는 높이값이 0 근처로 나온다.

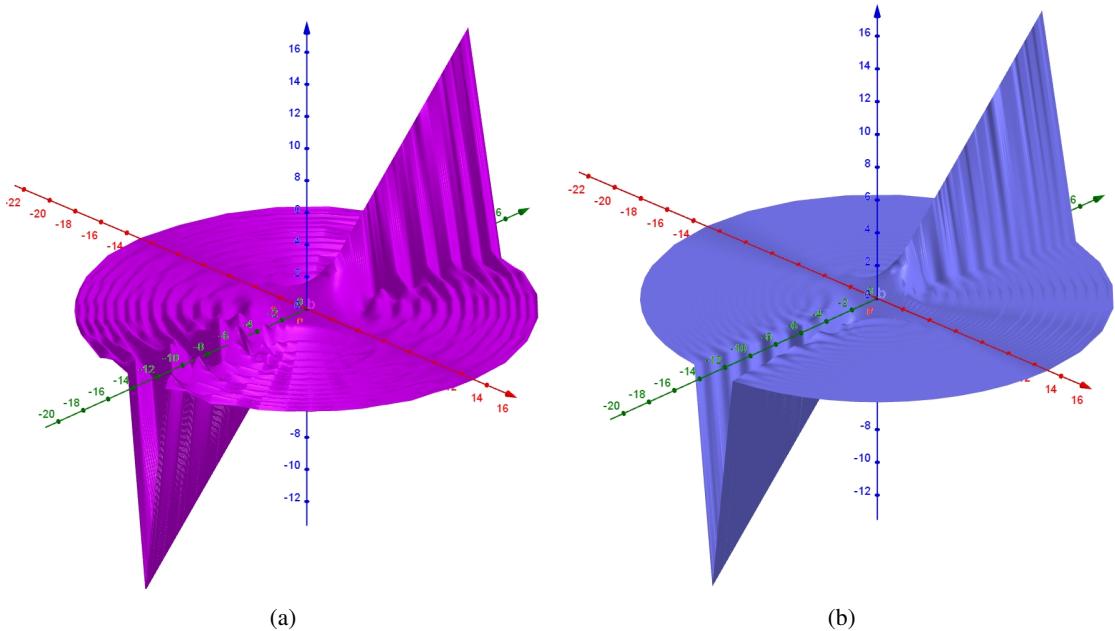


Figure 7.5: (a)와 (b)는 각각 $\frac{1}{\pi} \frac{\sin((\omega-\omega')t)}{(\omega-\omega')}$ 와 $\frac{1}{\pi} \frac{\sin^2((\omega-\omega')t)}{(\omega-\omega')^2 t}$ 을 시각적으로 보여준다. 이 그림에서도 빨간색 가로축은 $(\omega-\omega')$ 을, 초록색 세로축은 t 를 나타낸다.

7.7 Section 6.2

6.2에서의 필자는 7.6에서의 필자에게 다음의 vector potential \mathbf{A} 에 대해 $\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{P}$ 임을 보이라는 임무를 맡겼다.

$$\begin{aligned}\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) &= \frac{\hat{\epsilon}E_0}{\omega} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t) \\ &= \frac{\hat{\epsilon}E_0}{\omega} \sin(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)\end{aligned}$$

$\hat{\epsilon}E_0 = \mathbf{E}_0$ 은 electric field 가 진동하는 방향이고, chapter 1.1에서 \mathbf{k} 와 \mathbf{E}_0 가 수직임을 보였으므로, $\mathbf{k} \cdot \hat{\epsilon} = 0$ 이다. 수식의 반복을 피하기 위해 $O_p = \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{P}$, $O_x = \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t$ 라고 하자. 우선,

$$\begin{aligned}[O_p, O_x] &= [\epsilon_x P_x + \epsilon_y P_y + \epsilon_z P_z, k_x x + k_y y + k_z z - \omega t] \\ &= [\epsilon_x P_x + \epsilon_y P_y + \epsilon_z P_z, k_x x + k_y y + k_z z] \\ &= \underbrace{\epsilon_x k_x [P_x, x]}_{= -i\hbar} + \underbrace{\epsilon_y k_y [P_y, y]}_{= 0} + \underbrace{\epsilon_z k_z [P_z, z]}_{= 0} \\ &= -i\hbar (\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{k}) \\ &= 0\end{aligned}$$

에서, O_p 와 O_x 는 commute 함을 알 수 있다. 계속해서 계산해보자.

$$\begin{aligned}\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} &= \frac{E_0}{\omega} (\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{P}) \left((\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t) - \frac{1}{3!} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)^3 + \frac{1}{5!} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)^5 - \dots \right) \\ \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} &= \frac{E_0}{\omega} \left((\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t) - \frac{1}{3!} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)^3 + \frac{1}{5!} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)^5 - \dots \right) (\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{p}) \\ \mathbf{P} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} &= \frac{E_0}{\omega} \left[O_p, O_x - \frac{1}{3!} O_x^3 + \frac{1}{5!} O_x^5 - \dots \right] \\ &= \frac{E_0}{\omega} \sum_{i=1,3,5,\dots} \frac{(-1)^{\frac{i-1}{2}}}{i!} [O_p, O_x^i]\end{aligned}\tag{7.50}$$

여기서, 귀납적 추론을 이용할 것이다.

Let's say that $[O_p, O_x^n] = 0$ for positive integer n .

$$\begin{aligned}[O_p, O_x^{n+1}] &= O_p O_x^{n+1} - O_x^{n+1} O_p \\ &= O_p O_x^n O_x - O_x^n O_p O_x + O_x^n O_p O_x - O_x^n O_x O_p \\ &= \underbrace{[O_p, O_x^n]}_{= 0} O_x + O_x^n \underbrace{[O_p, O_x]}_{= 0} \\ &= 0\end{aligned}\tag{7.51}$$

(7.52)

식(7.50)과 (7.51)에서, 모든 자연수 n 에 대해 $[O_p, O_x^n] = 0$ 임을 확인할 수 있다. 따라서,

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{P}.$$

APPENDIX A

Physical Constants and Dimension Analysis

Fundamental Constants¹

Planck's constant	$\hbar = 1.05457 \times 10^{-34} \text{ Js}$
Speed of light	$c = 2.99792 \times 10^8 \text{ m/s}$
	$\hbar c = 3.16152 \times 10^{-26} \text{ Jm}$
Mass of electron	$m_e = 9.10938 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Mass of proton	$m_p = 1.67262 \times 10^{-27} \text{ Js}$
Charge of electron	$-e = -1.60218 \times 10^{-19} \text{ C}$
Permittivity of space	$\epsilon_0 = 8.85419 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Jm}$
Permeability of space	$\mu_0 = 1.25663 \times 10^{-6} \text{ N/A}^2$
Boltzmann constant	$k_B = 1.38065 \times 10^{-23} \text{ J/K}$
(at room temperature 23deg C)	$k_B T = 3.76917 \times 10^{-21} \text{ J/K}$ $= 0.0250 \text{ eV}$
Bohr magneton	$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.27401 \times 10^{-24} \text{ J/T}$

¹여기는 모든 단위를 SI unit에서 썼다. $\hbar = c = 1$ 이라고 하는 Natural Unit 과는 헷갈리지 말자.
그리고, $1\text{eV} = 1.60218 \times 10^{-19} \text{ J}$ 이다.

Hydrogen Atom

Fine structure constant	$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137.036}$
Bohr radius	$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m_e c} = 5.29177 \times 10^{-11} \text{ m}$
Bohr energies	$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2} = \frac{E_1}{n^2} (n = 1, 2, 3, \dots)$
Binding energy	$-E_1 = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{2} = 13.6057 \text{ eV}$
Ground state	$\psi_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$
Rydberg formula	$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$
Rydberg constant	$R = -\frac{E_1}{2\pi\hbar c} = 1.09737 \times 10^7 \text{ /m}$

Dimension Analysis

여기서, 물리량들의 차원을 질량(m), 길이(l), 시간(t), 전하량(q), 온도(T)로 나타내보겠다.

Velocity	$[\mathbf{v}] = \frac{l}{t}$
Acceleration	$[\mathbf{a}] = \frac{l}{t^2}$
Spring constant	$[k_{spring}] = \frac{m}{t^2}$
Wave vector	$[k_{wave}] = \frac{1}{l}$
Force	$[\mathbf{F}] = \frac{ml}{t^2}$
Pressure	$[\mathbf{P}] = \frac{m}{lt^2}$
Momentum	$[\mathbf{p}] = \frac{ml}{t}$
Angular momentum	$[\mathbf{J}] = \frac{mll}{t}$
Mass density	$[\rho_m] = \frac{m}{l^3}$
Energy	$[E] = \frac{mll}{t^2}$
Gas constant	$[R] = \frac{mll}{t^2 T}$
Electric charge density	$[\rho_e] = \frac{q}{l^3}$
Electric potential	$[\Phi] = \frac{mll}{qtt}$
Electric field	$[\mathbf{E}] = \frac{ml}{qtt}$
Electric displacement	$[\mathbf{D}] = \frac{q}{l^2}$

Electric polarization	$[\mathbf{P}] = \frac{m}{q t l}$
Space permittivity	$[\epsilon_0] = \frac{q q t}{m l l}$
Conductivity	$[\sigma_{con}] = \frac{q q t}{m l l}$
Electric current	$[\mathbf{I}] = \frac{q}{t}$
Current density	$[\mathbf{j}] = \frac{q}{t l l}$
Magnetic field	$[\mathbf{B}] = \frac{m}{q t}$
Vector potential	$[\mathbf{A}] = \frac{m l}{q t}$
Magnetization	$[\mathbf{M}] = \frac{q}{l t}$
Auxiliary field	$[\mathbf{H}] = \frac{q}{l t}$
Space permeability	$[\mu_0] = \frac{m l}{q q}$
Power	$[P] = \frac{m l l}{t t t}$
Resistance(or Impedance)	$[R] = \frac{m l l}{q q t}$
Inductance	$[L] = \frac{m l l}{q q}$
Capacitance	$[C] = \frac{q q t}{m l l}$
Poynting vector	$[\mathbf{S}] = \frac{m}{t t t}$
Gravitational constant	$[G] = \frac{l l l}{m t t}$

B ■ APPENDIX

Clebsch Gordon Coefficients

Section 2.3.4에서 addition of angular momentum을 다루었다. 여기서 다른 commutation relation 들에 의하면, $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ 에서 \mathbf{J} 의 크기와 \mathbf{J}_1 의 크기, 그리고 \mathbf{J} 의 크기와 \mathbf{J}_2 의 크기는 동시에 측정이 가능하다. 그리고, \mathbf{J}_1 의 각 성분들과 \mathbf{J}_2 의 각 성분들도 동시에 측정이 가능하다. 동시에 측정가능한 물리량들은 하나의 ket vector에 그 정보들을 담을 수 있다. 그러나, \mathbf{J} 의 크기와 $\mathbf{J}_1(\mathbf{J}_2)$ 의 각 성분들은 일반적으로 동시에 측정이 불가능하다. 따라서, $|jm_1\rangle$, $|jm_2\rangle$ 이렇게 적는 것은 불가능하고, $|j_1 j_2; jm\rangle$ 을 $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ 의 linear combination을 나타내야 한다. 이때, $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ 에 붙는 계수 $C_{m_1 m_2 m}^{j_1 j_2 j} = \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle$ 들을 Clebsch-Gordan coefficients라고 부른다. Section 2.3.4에서도 말했듯이 Clebsch-Gordan coefficients의 유도과정을 전부다 적는 것은 너무 기므로 몇몇 j_1, j_2 에 대해서 coefficients들의 값이 어떻게 나오는지 표로 보여주기만 하겠다.

		$m =$
$j_1 \times j_2$		$j = \dots$
$m_1 m_2$		
\vdots		

먼저 표에 숫자들이 어떤식으로 정렬되어 있는지 설명하겠다. 필자는 coefficient들을 특정한 (j_1, j_2) 순서쌍에 대해서 나눴다. 각 순서쌍들에서는 $m = m_1 + m_2$ 에 대해서 표를 나눴다. 그래서 각 표에는 태두리 밖에 다음과 같이 j_1, j_2, m 에 대한 정보가 적혀있을 것이다. 이제, 표들을 제시하겠다.

1. $j_1 = 1/2, j_2 = 1/2$

Table B.1: Clebsch Gordon Coefficients when $j_1 = 1/2, j_2 = 1/2$.

$m = 1$	
$1/2 \times 1/2$	$j = 1$
$1/2, 1/2$	1
	$m = 0$
	$j = 1 \quad j = 0$
$1/2, -1/2$	$1/2 \quad 1/2$
$-1/2, 1/2$	$1/2 \quad -1/2$
	$m = -1$
	$j = 1$
$-1/2, -1/2$	-1

2. $j_1 = 1, j_2 = 1/2$

Table B.2: Clebsch Gordon Coefficients when $j_1 = 1, j_2 = 1/2$.

		$m = 3/2$			
$1 \times 1/2$		$j = 3/2$		$m = 1/2$	
$1, 1/2$		1		$j = 3/2 \quad j = 1/2$	
$1, -1/2$		$1/3$	$2/3$	$j = 3/2$	$j = 1/2$
$0, 1/2$		$2/3$	$-1/3$	$m = -1$	
				$m = -1$	
		$j = 3/2 \quad j = 1/2$		$m = -3/2$	
$0, -1/2$		$2/3$	$1/3$	$j = 3/2$	
$-1, 1/2$		$1/3$	$-2/3$	$m = -3/2$	
				$j = 3/2$	
$-1, -1/2$		1			

3. $j_1 = 1, j_2 = 1$

Table B.3: Clebsch Gordon Coefficients when $j_1 = 1, j_2 = 1$.

		$m = 2$			
1×1		$j = 2$		$m = 1$	
$1, 1$		1		$j = 2 \quad j = 1$	
$1, 0$		$1/2$	$1/2$	$m = 0$	
$0, 1$		$1/2$	$-1/2$	$j = 2 \quad j = 1 \quad j = 0$	
		$j = 2 \quad j = 1 \quad j = 0$		$m = -1$	
$1, -1$		$1/6$	$1/2$	$1/3$	
$0, 0$		$2/3$	0	$-1/3$	
$-1, 1$		$1/6$	$-1/2$	$1/3$	$j = 2 \quad j = 1$
		$0, -1 \quad 1/2 \quad 1/2$		$m = -2$	
$0, -1$		$1/2$	$1/2$	$-1/2$	$j = 2$
$-1, 0$		$1/2$	$-1/2$	$-1, -1$	1

4. $j_1 = 3/2, j_2 = 1/2$

Table B.4: Clebsch Gordon Coefficients when $j_1 = 3/2, j_2 = 1/2$.

		$m = 2$			
$3/2 \times 1/2$		$j = 2$		$m = 1$	
$1, 1$		1		$j = 2 \quad j = 1$	
$3/2, -1/2$		$1/4$	$3/4$	$m = 0$	
$1/2, 1/2$		$3/4$	$-1/4$	$j = 2 \quad j = 1$	
		$j = 2 \quad j = 1$		$m = -1$	
$1/2, -1/2$		$1/2$	$1/2$	$j = 2 \quad j = 1$	
$-1/2, 1/2$		$1/2$	$-1/2$	$-1/2, -1/2 \quad 3/4 \quad 1/4$	
		$-1/2, -1/2 \quad 3/4 \quad 1/4$		$m = -2$	
$-1/2, -1/2$		$1/4$	$-3/4$	$-3/2, -1/2 \quad 1 \quad 1$	

5. $j_1 = 2, j_2 = 1/2$

Table B.5: Clebsch Gordon Coefficients when $j_1 = 2, j_2 = 1/2$.

		$m = 5/2$	
$2 \times 1/2$		$j = 5/2$	
$2, 1/2$		$j = 5/2$	
2	1	$m = 3/2$	
		$j = 5/2$	$j = 3/2$
$2, -1/2$		1/5	4/5
1	1/2	4/5	-1/5
		$m = 1/2$	
		$j = 5/2$	$j = 3/2$
		1, -1/2	2/5 3/5
		0, 1/2	3/5 -2/5
$m = -1/2$			
$j = 5/2$		$j = 3/2$	
0, -1/2	3/5 2/5		
1, 1/2	2/5 -3/5	$m = -3/2$	
		$j = 5/2$	$j = 3/2$
		-1, -1/2	4/5 1/5
		-2, 1/2	1/5 -4/5
		$m = -5/2$	
		$j = 5/2$	
		-2, -1/2	1

진짜 교재에 적혀있는 표 보고 그대로 옮기는데도 타이핑 하기 엄청 오래걸렸다. 이제, 예시를 하나 들어서 저 표를 어떻게 읽는지를 알려주겠다. 다음은 표B.3의 일부를 가져온 것이다.

		$m = 0$		
1×1		$j = 2$	$j = 1$	$j = 0$
1	1	1/6	1/2	1/3
0	0	2/3	0	-1/3
-1	1	1/6	-1/2	1/3

몇몇 숫자들이 굵은 글씨로 표시되어 있다. Clebsch Gordon Coefficient 들은 보통 분수가 square root에 들어가 있는 경우가 많은데 이를 표에 쓰기 번거로워서 근호를 제거하고 표시를 한다. 굵은 글씨로 표시된 column 을 살펴보자. 이 숫자들로 $|j_1 = 1 j_2 = 1; j = 2 m = 0\rangle$ 을 $|j_1 = 1 j_2 = 1; m_1 m_2\rangle$ 들의 선형결합으로 나타내는데 필요한 계수를 알 수 있다. 다시, total angular momentum \mathbf{J} 의 eigenstate 는 $|j_1 j_2; jm\rangle$ 으로, \mathbf{J}_1 과 \mathbf{J}_2 의 simultaneous eigenstate 는 $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ 로 나타낸다. 헷갈리지 말자. 따라서 위 표를 참고하면

$$|11; 20\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}}|11; 1-1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|11; 00\rangle + \sqrt{\frac{1}{6}}|11; -1-1\rangle \quad (\text{B.1})$$

이다. 표들을 보면 위에 예시로 가져온 놈에서 처럼 간혹가다가 분수에 - 부호가 붙은 경우가 있다. 위 표의 경우, $-1/2$ 는 $-\sqrt{\frac{1}{2}}$ 를 나타낸 것이라고 보면 된다. 다른 음의 분수들도 마찬가지이다.

INDEX

- Absorption, 91
Action Angle Variables, 18
Action Variable, 18
Airy Function, 80–82
Angle Variable, 18

Baker–Campbell–Hausdorff formula, 30, 103
Bohr model, 73
Bohr Radius, 65

Canonical Transformation, 14, 31
 Extended Canonical Transformation, 14
Classical Quantum Theory, 73–77
Clebsch Gordon Coefficients, 53, 55, 125
Complete Set, 25
Continuity Equation, 20

Dirac Delta, 26, 88, 89, 105, 109, 118, 119
Direct Product, 49, 50, 56

Erhenfest’s Theorem, 113, 117

Feynman–Hellmann theorem, 115
Fine Structure, 63
 Hyper Fine Structure, 70
 Relativistic correction, 64, 65
 Spin–Orbit Coupling, 66, 67
Fourier Transform, 38, 105

Gauge
 Coulomb Gauge, 9
 Lorenz Gauge, 10
Generating Function, 14

Hamilton’s characteristic function, 17
Hamilton–Jacobi equation, H–J equation, 15
Harmonic Oscillator, 17–19, 34–36, 40, 58, 70,
 77, 82, 83
Heisenberg’s Uncertainty Principle, 32, 46
Hermitian Adjoint, 24
Hermitian Operator, 24

Identity Operator, 25
Infinitesimal Time Evolution, 30
Infinitesimal Translation, 29, 31, 32

Lamor Precession, 39
LASER, 91

Magnetic Moment, 13, 66
Maxwell Equations, 5

Orthonormal, 25

Perturbation, 59
 Time Dependent Perturbation, 85
 Time Independent Perturbation, 59
Perturbation Series, 86
photon, 91
Picture
 Heisenberg Picture, 30
 Schrödinger Picture, 30
Plane Wave, 6
Postulates, 21–30

Quantum Electrodynamics, 92, 95
Quantum Field Theory, 95

Schwinger’s Oscillator model of Angular
 Momentum, 58
Selection Rule, 92–94
Sommerfeld Quantization, 73
Spontaneous Emission, 91
Stimulated emission, 91

Total Derivative, 100
Transition Probability, 87
Transition Rate, 87–90, 92, 95

Velocity Dependent Potential, 10–12

WKB Method, 73, 77–83

Zeeman Effect, 67–69