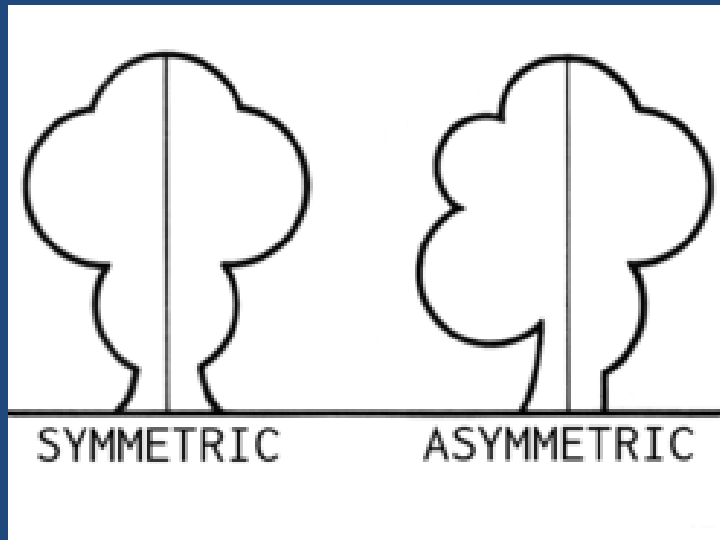


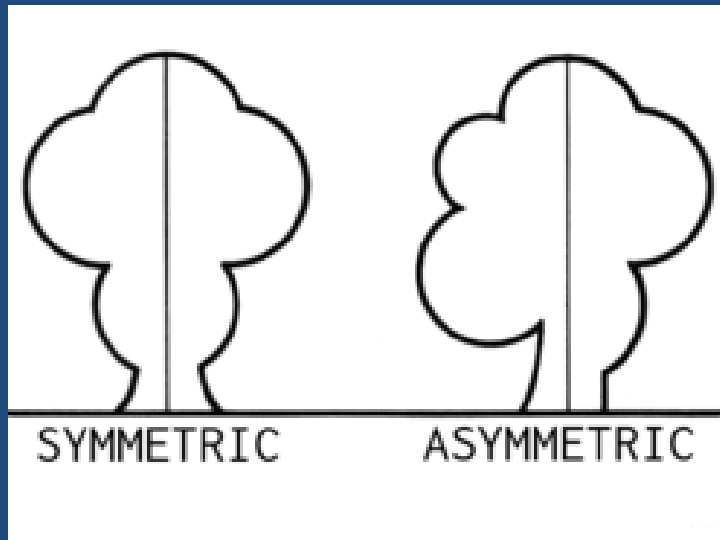
제6장

대칭성과 보존 법칙

이번 장에서는 대칭성과 보존 법칙에 대해 알아보시다.
먼저, 대칭성symmetry이란 무엇일까요?

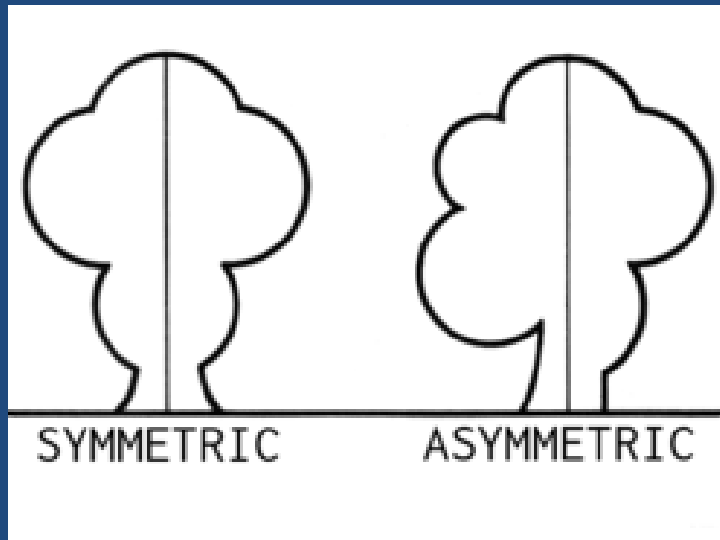


뭔가를 바꾸는 **변환**에 대해 **무엇인가가 불변**인 경우
여기에 대칭성이 있다고 합니다.



뭔가를 바꾸는 **변환**에 대해 무엇인가가 **불변**인 경우
여기에 대칭성이 있다고 합니다.

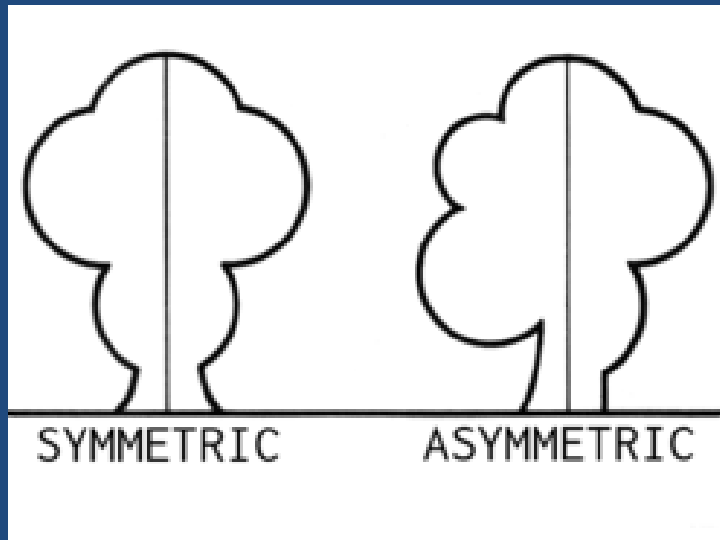
공간/각도/시간...
전하
연속적/불연속적...



뭔가를 바꾸는 변환에 대해 무엇인가가 불변인 경우
여기에 대칭성이 있다고 합니다.

공간/각도/시간...
전하
연속적/불연속적...

해밀토니안



뭔가를 바꾸는 변환에 대해 무엇인가가 불변인 경우
여기에 대칭성이 있다고 합니다.

공간/각도/시간...
전하
연속적/불연속적...

상태에 작용하는
연산자의 방법으로
정의되는 변환

해밀토니안

우리는 이번 장에서 다음과 같은
몇 가지 변환에 대해 대칭성이 있는 경우
어떤 물리적 의미를 가지고 있는지에 대해 살펴볼 것입니다.

공간 이동:	$\hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x - a)$
각도 회전:	$\hat{R}_z(\varphi)\psi(r, \theta, \phi) = \psi'(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi + \varphi)$
시간 이동:	$\hat{U}(t)\psi(x, 0) = \psi'(x, 0) = \psi(x, t)$
전하 켤레:	$\hat{C}\psi(x) = \psi'(x) = \psi^*(x)$
공간 반전:	$\hat{P}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$
시간 역전:	$\hat{T}\psi(x, t) = \psi'(x, t) = \psi(x, -t)$

처음 세 개의 변환은 연속적인 변환입니다.

$$\begin{array}{ll}\text{공간 이동:} & \hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x-a) \\ \text{각도 회전:} & \hat{R}_z(\varphi)\psi(r,\theta,\phi) = \psi'(r,\theta,\phi) = \psi(r,\theta,\phi+\varphi) \\ \text{시간 이동:} & \hat{U}(t)\psi(x,0) = \psi'(x,0) = \psi(x,t)\end{array}$$

$$\begin{array}{ll}\text{전하 켄레:} & \hat{C}\psi(x) = \psi'(x) = \psi^*(x) \\ \text{공간 반전:} & \hat{P}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x) \\ \text{시간 역전:} & \hat{T}\psi(x,t) = \psi'(x,t) = \psi(x,-t)\end{array}$$

연속적인 변환이기 때문에 테일러 전개가 가능합니다.

공간 이동:

$$\hat{T}(a)\psi(x) = \psi(x-a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-a)^n \frac{d^n}{dx^n} \psi(x) = e^{-i\frac{a}{\hbar} \hat{p}} \psi(x)$$

각도 회전:

$$\hat{R}_n(\varphi)\psi(r, \theta, \phi) = e^{-i\frac{\varphi}{\hbar} \hat{n} \cdot \hat{L}} \psi(r, \theta, \phi)$$

시간 이동:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t)\psi(x, 0) &= \psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n \frac{d^n}{dt^n} \psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar} t \right)^n \psi(x, 0) \\ &= e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar} t} \psi(x, 0) \end{aligned}$$

연속적인 변환이기 때문에 테일러 전개가 가능합니다.

공간 이동:

$$\hat{T}(a)\psi(x) = \psi(x-a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-a)^n \frac{d^n}{dx^n} \psi(x) = e^{-i\frac{a}{\hbar} \hat{p}} \psi(x)$$

각도 회전:

$$\hat{R}_n(\varphi)\psi(r, \theta, \phi) = e^{-i\frac{\varphi}{\hbar} \hat{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}} \psi(r, \theta, \phi)$$

시간 이동:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t)\psi(x, 0) &= \psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n \frac{d^n}{dt^n} \psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar} t \right)^n \psi(x, 0) \\ &= e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar} t} \psi(x, 0) \end{aligned}$$

연속적인 변환이기 때문에 테일러 전개가 가능합니다.

공간 이동:

$$\hat{T}(a)\psi(x) = \psi(x-a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-a)^n \frac{d^n}{dx^n} \psi(x) = e^{-i\frac{a}{\hbar} \hat{p}} \psi(x)$$

각도 회전:

$$\hat{R}_n(\varphi)\psi(r, \theta, \phi) = e^{-i\frac{\varphi}{\hbar} \hat{n} \cdot \hat{L}} \psi(r, \theta, \phi)$$

시간 이동:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t)\psi(x, 0) = \psi(x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n \frac{d^n}{dt^n} \psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar} t \right)^n \psi(x, 0) \\ &= e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar} t} \psi(x, 0) \end{aligned}$$

미소 변수에 대한 변환의 경우 다음과 같이 전개됩니다.

공간 이동:

$$\hat{T}(\epsilon)\psi(x) = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{p}}\psi(x) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{p}\right)\psi(x)$$

각도 회전:

$$\hat{R}_n(\epsilon)\psi(r,\theta,\phi) = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{n}\cdot\hat{L}}\psi(r,\theta,\phi) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{n}\cdot\hat{L}\right)\psi(r,\theta,\phi)$$

시간 이동:

$$\hat{U}(\epsilon)\psi(x,0) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\epsilon}\psi(x,0) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{H}\right)\psi(x,0)$$

그 다음 세 개의 변환은 불연속적인 변환입니다.

공간 이동:	$\hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x - a)$
각도 회전:	$\hat{R}_z(\varphi)\psi(r, \theta, \phi) = \psi'(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi + \varphi)$
시간 이동:	$\hat{U}(t)\psi(x, 0) = \psi'(x, 0) = \psi(x, t)$
전하 켤레:	$\hat{\mathcal{C}}\psi(x) = \psi'(x) = \psi^*(x)$
공간 반전:	$\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$
시간 역전:	$\hat{\mathcal{T}}\psi(x, t) = \psi'(x, t) = \psi(x, -t)$

전하 켤레 변환과 시간 역전 변환은 우리가 자세히 다루지 않지만
물리적으로 아주 중요한 의미를 가지고 있습니다.

공간 이동:	$\hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x - a)$
각도 회전:	$\hat{R}_z(\varphi)\psi(r, \theta, \phi) = \psi'(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi + \varphi)$
시간 이동:	$\hat{U}(t)\psi(x, 0) = \psi'(x, 0) = \psi(x, t)$

전하 켤레:	$\hat{\mathcal{C}}\psi(x) = \psi'(x) = \psi^*(x)$
공간 반전:	$\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$
시간 역전:	$\hat{\mathcal{T}}\psi(x, t) = \psi'(x, t) = \psi(x, -t)$

CPT 정리

로렌츠 공변covariant이고 국소적local이고
해밀토니안이 에르미트Hermitian인 양자장론은
 CPT -대칭을 가진다.

$$\langle \psi' | \hat{Q} | \psi' \rangle = \langle \psi | \hat{Q}' | \psi \rangle$$

이제 이러한 변환이 다른 연산자를 어떻게 바꾸는지를 살펴봅시다.
이것은 연산자의 기댓값을 동일하게 하는 변환으로 정의합니다.

$$\langle \psi' | \hat{Q} | \psi' \rangle = \langle \psi | \hat{Q}' | \psi \rangle$$

$$\hat{Q}' = \hat{T}^\dagger \hat{Q} \hat{T}$$

이 연산자의 변환에 대해 해밀토니안이 불변인 경우
이 이론에는 주어진 변환에 대해 대칭성이 있다고 합니다.
이 때 어떤 의미가 있는지를 살펴봅시다.

$$\langle \psi' | \hat{Q} | \psi' \rangle = \langle \psi | \hat{Q}' | \psi \rangle$$

$$\hat{T} \hat{Q}' = \hat{Q} \hat{T}$$

변환 연산자가 유니터리한 경우
위와 같이 바꿀 수 있습니다.

$$\langle \psi' | \hat{H} | \psi' \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$$

$$[\hat{H}, \hat{T}] = 0$$

따라서 해밀토니안이 대칭성을 가진다면,
해밀토니안과 변환 연산자가 **교환 관계**를 가지게 됩니다.

공간 이동:

$$\hat{T}(\epsilon)\psi(x) = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{p}}\psi(x) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{p}\right)\psi(x) \longrightarrow [\hat{p}, \hat{H}] = 0$$

각도 회전:

$$\hat{R}_n(\epsilon)\psi(r, \theta, \phi) = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{n} \cdot \hat{L}}\psi(r, \theta, \phi) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{n} \cdot \hat{L}\right)\psi(r, \theta, \phi) \longrightarrow [\hat{L}, \hat{H}] = 0$$

시간 이동:

$$\hat{U}(\epsilon)\psi(x, 0) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\epsilon}\psi(x, 0) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{H}\right)\psi(x, 0) \longrightarrow \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$$

따라서 연속적인 변환의 경우
대칭성은 위와 같은 관계에 의해 표현됩니다.

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$$

공간 이동:

$$\hat{T}(\epsilon)\psi(x) = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{p}}\psi(x) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{p}\right)\psi(x) \longrightarrow [\hat{p}, \hat{H}] = 0$$

각도 회전:

$$\hat{R}_n(\epsilon)\psi(r, \theta, \phi) = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{n}\cdot\hat{L}}\psi(r, \theta, \phi) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{n}\cdot\hat{L}\right)\psi(r, \theta, \phi) \longrightarrow [\hat{L}, \hat{H}] = 0$$

시간 이동:

$$\hat{U}(\epsilon)\psi(x, 0) = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{H}}\psi(x, 0) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{H}\right)\psi(x, 0) \longrightarrow \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$$

여기에 에렌페스트 정리를 적용하면
공간, 각도, 시간 이동의 대칭에 대해
각각 운동량, 각운동량, 에너지의 기댓값이
보존된다는 것을 알 수 있습니다.

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$$

공간 이동:

$$\hat{T}(\epsilon)\psi(x) = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{p}}\psi(x) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{p}\right)\psi(x) \longrightarrow [\hat{p}, \hat{H}] = 0$$

각도 회전:

$$\hat{R}_n(\epsilon)\psi(r, \theta, \phi) = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{n}\cdot\hat{L}}\psi(r, \theta, \phi) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{n}\cdot\hat{L}\right)\psi(r, \theta, \phi) \longrightarrow [\hat{L}, \hat{H}] = 0$$

시간 이동:

$$\hat{U}(\epsilon)\psi(x, 0) = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{H}}\psi(x, 0) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{H}\right)\psi(x, 0) \longrightarrow \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$$

연산자들이 시간에 명시적으로 의존하지 않는다면
동시에 측정되는 고윳값들이 시간에 의존하지 않게 됩니다.

이러한 대칭성에 대해 어떤 물리적 의미가 있는지
차례로 살펴봅시다.

공간 이동: $\hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x-a)$

블로흐 정리/운동량 보존

각도 회전: $\hat{R}_z(\varphi)\psi(r,\theta,\phi) = \psi'(r,\theta,\phi) = \psi(r,\theta,\phi + \varphi)$

시간 이동: $\hat{U}(t)\psi(x,0) = \psi'(x,0) = \psi(x,t)$

전하 켤레: $\hat{C}\psi(x) = \psi'(x) = \psi^*(x)$

공간 반전: $\hat{P}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$

시간 역전: $\hat{T}\psi(x,t) = \psi'(x,t) = \psi(x,-t)$

우리는 다음과 같은 물리적 의미를 살펴볼 것입니다.

공간 이동: $\hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x-a)$

블로흐 정리/운동량 보존

각도 회전: $\hat{R}_z(\varphi)\psi(r,\theta,\phi) = \psi'(r,\theta,\phi) = \psi(r,\theta,\phi + \varphi)$

시간 이동: $\hat{U}(t)\psi(x,0) = \psi'(x,0) = \psi(x,t)$

전하 켤레: $\hat{C}\psi(x) = \psi'(x) = \psi^*(x)$

공간 반전: $\hat{P}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$

라포르테의 규칙

시간 역전: $\hat{T}\psi(x,t) = \psi'(x,t) = \psi(x,-t)$

우리는 다음과 같은 물리적 의미를 살펴볼 것입니다.

공간 이동: $\hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x-a)$

블로흐 정리/운동량 보존

각도 회전: $\hat{R}_z(\varphi)\psi(r,\theta,\phi) = \psi'(r,\theta,\phi) = \psi(r,\theta,\phi+\varphi)$

비그너-에카르트 정리
각운동량 보존

시간 이동: $\hat{U}(t)\psi(x,0) = \psi'(x,0) = \psi(x,t)$

전하 켤레: $\hat{C}\psi(x) = \psi'(x) = \psi^*(x)$

공간 반전: $\hat{P}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$

라포르테의 규칙

시간 역전: $\hat{T}\psi(x,t) = \psi'(x,t) = \psi(x,-t)$

우리는 다음과 같은 물리적 의미를 살펴볼 것입니다.

공간 이동: $\hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x-a)$

블로흐 정리/운동량 보존

각도 회전: $\hat{R}_z(\varphi)\psi(r,\theta,\phi) = \psi'(r,\theta,\phi) = \psi(r,\theta,\phi+\varphi)$

비그너-에카르트 정리
각운동량 보존

시간 이동: $\hat{U}(t)\psi(x,0) = \psi'(x,0) = \psi(x,t)$

하이젠베르크 운동 방정식
에너지 보존

전하 켤레: $\hat{C}\psi(x) = \psi'(x) = \psi^*(x)$

공간 반전: $\hat{P}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$

라포르테의 규칙

시간 역전: $\hat{T}\psi(x,t) = \psi'(x,t) = \psi(x,-t)$

우리는 다음과 같은 물리적 의미를 살펴볼 것입니다.

공간 이동: $\hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x-a)$

블로흐 정리/운동량 보존

각도 회전: $\hat{R}_z(\varphi)\psi(r,\theta,\phi) = \psi'(r,\theta,\phi) = \psi(r,\theta,\phi+\varphi)$

비그너-에카르트 정리
각운동량 보존

시간 이동: $\hat{U}(t)\psi(x,0) = \psi'(x,0) = \psi(x,t)$

하이젠베르크 운동 방정식
에너지 보존

전하 켤레: $\hat{C}\psi(x) = \psi'(x) = \psi^*(x)$

공간 반전: $\hat{P}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$

라포르테의 규칙

시간 역전: $\hat{T}\psi(x,t) = \psi'(x,t) = \psi(x,-t)$

여기에서 연속적 대칭에 대해
보존 법칙이 대응된다는 것을 우리가 확인해 보았습니다.

공간 이동: $\hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x-a)$

블로흐 정리/운동량 보존

각도 회전: $\hat{R}_z(\varphi)\psi(r,\theta,\phi) = \psi'(r,\theta,\phi) = \psi(r,\theta,\phi+\varphi)$

비그너-에카르트 정리
각운동량 보존

시간 이동: $\hat{U}(t)\psi(x,0) = \psi'(x,0) = \psi(x,t)$

하이젠베르크 운동 방정식
에너지 보존

전하 켤레: $\hat{C}\psi(x) = \psi'(x) = \psi^*(x)$

공간 반전: $\hat{P}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$

라포르테의 규칙

시간 역전: $\hat{T}\psi(x,t) = \psi'(x,t) = \psi(x,-t)$

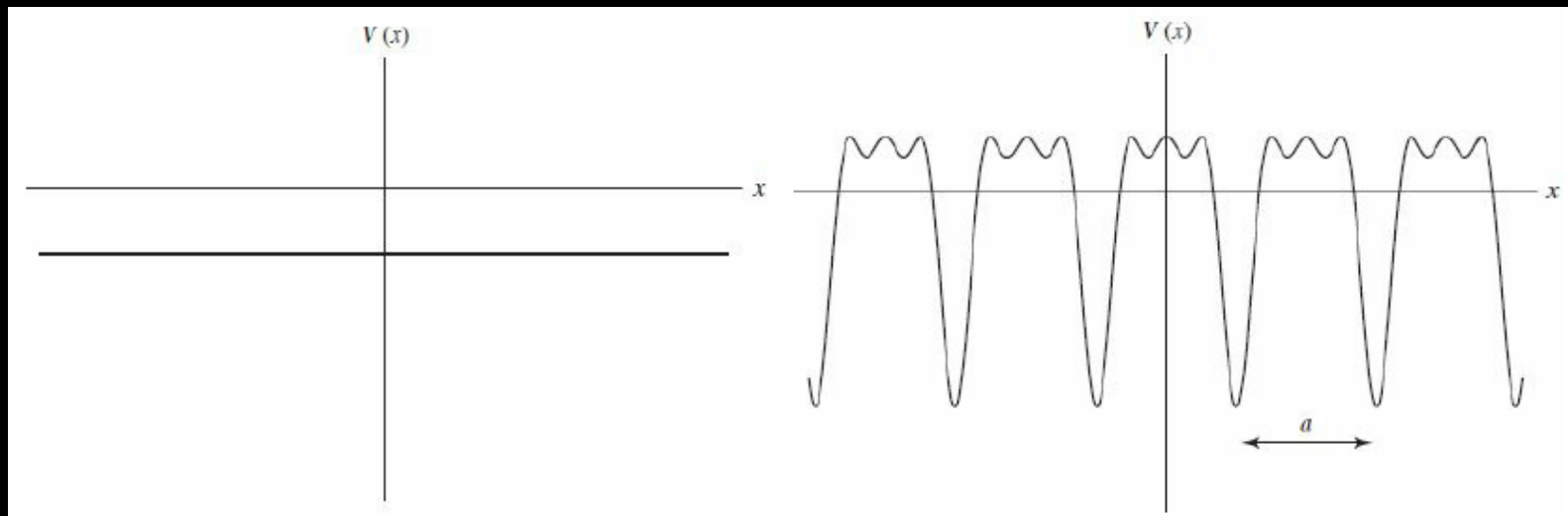
비그너-에카르트 정리와 라포르테의 규칙은
선택 규칙(selection rule)의 예가 됩니다.

연산자의 행렬 요소 또는 기댓값을 계산할 때
계산을 좀 더 쉽게 해줄 수 있습니다.

1. 이동 대칭성

$$\hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x-a)$$

$$[\hat{T}, \hat{H}] = 0$$



이동 대칭성이 임의의 a 에 대해 성립한다면
연속 이동 대칭성을 가지고,
특정한 a 에 대해 성립한다면
불연속 이동 대칭성을 가지게 됩니다.

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$$

$$\hat{T}(\epsilon)\psi(x) = e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{p}}\psi(x) \simeq \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar}\hat{p}\right)\psi(x)$$

$$[\hat{p}, \hat{H}] = 0$$

연속 이동 대칭성의 경우에는
미소 변화에 대해서도 대칭성이 성립하므로,
위에서 살펴본 것처럼 **운동량**이 **보존**됩니다.

$$V(x) = V(x + a)$$

이제 불연속 이동 대칭성의 경우를 살펴봅시다.

$$V(x) = V(x + a)$$

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{T}\psi = \lambda\psi$$

이 때, $[\hat{T}, \hat{H}] = 0$ 이 만족되므로
 $\hat{T}$ 와 $\hat{H}$ 모두에 대한 고유상태를 잡을 수 있습니다.

$$V(x) = V(x + a)$$

$$\psi(x - a) = e^{-iqa} \psi(x)$$

한 편, $\hat{T}$ 가 유니터리이므로, $\lambda = e^{i\phi}$ 와 같은 형태가 되어야 합니다.
 $\phi \equiv -qa$ 와 같이 정의하도록 합니다.
이 때 위와 같은 관계를 얻을 수 있습니다.

$$V(x) = V(x + a)$$

$$\psi(x - a) = e^{-iqa} \psi(x)$$

$$\psi(x) = e^{iqx} u(x)$$

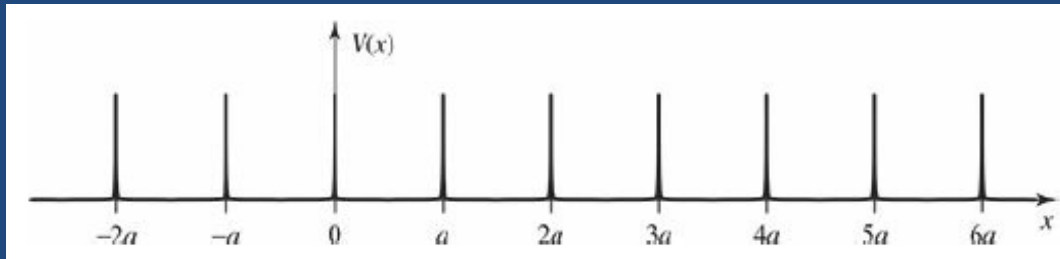
같은 식을 다른 관점에서 표현할 수 있습니다.
만일 $u(x) = u(x + a)$ 와 같은 주기 함수가 존재한다면,
일반성을 잃지 않고 위와 같이 적을 수 있습니다.
이것을 **블로흐Bloch 정리**라고 합니다.

$$V(x) = V(x + a)$$

$$\psi(x - a) = e^{-iqa} \psi(x)$$

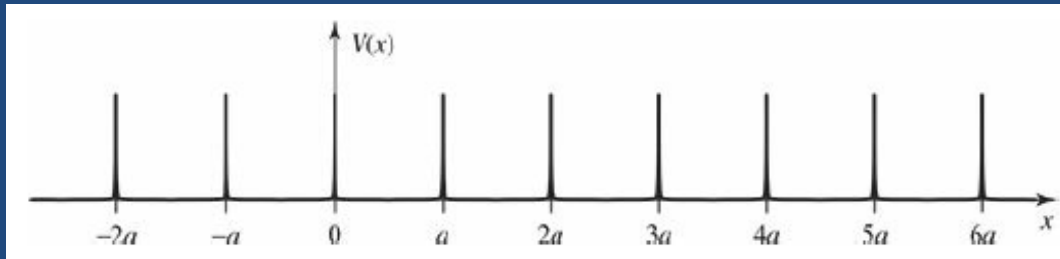
$$\psi(x) = e^{iqx} u(x)$$

블로흐 정리는 주기적인 퍼텐셜의 파동 함수에
주기적인 성분 뿐만 아니라 진행하는 성분도
존재한다는 것을 보여줍니다.



$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja)$$

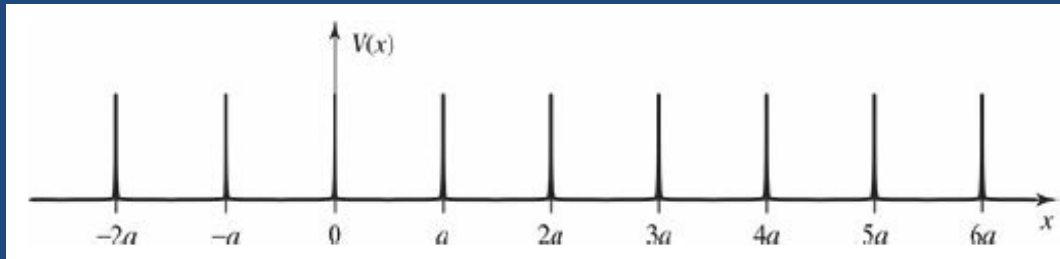
블로흐 정리가 적용되는 중요한 예로 위와 같은
주기적인 퍼텐셜 모델을 생각해봅시다.
이것을 **디랙의 빛 모형**이라고 합니다.



$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja)$$

$$\psi(x + Na) = \psi(x)$$

계산상의 편의를 위해 위와 같이
주기적인 경계조건periodic boundary condition을 부여합니다.
우리는 N 이 아주 큰 경우를 생각합니다.



$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja)$$

$$\psi(x + Na) = \psi(x)$$

그러면 블로흐 정리에 의해 다음 관계를 얻습니다.

$$e^{iNqa}\psi(x) = \psi(x + Na) = \psi(x)$$

$$q = \frac{2\pi n}{Na} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

$$0 < x < a$$

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

블로흐의 정리는 우리가 $0 < x < a$ 인 영역에서만 풀면
충분하다는 것을 보여줍니다.

$$0 < x < a$$

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

$$-a < x < 0$$

$$\psi(x) = e^{-iqa}(A \sin k(x + a) + B \cos k(x + a))$$

그러면 다시 한 번 블로흐의 정리에 의해
 $-a < x < 0$ 에서의 해에 대해 적을 수 있습니다.

$$0 < x < a$$

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

$$-a < x < 0$$

$$\psi(x) = e^{-iqa}(A \sin k(x+a) + B \cos k(x+a))$$

$$B = e^{-iqa}(A \sin ka + B \cos ka)$$

$$kA - e^{-iqa}k(A \cos ka - B \sin ka) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}B$$

이제 우리는 2장에서 다룬 것처럼
 $x = 0$ 에서 디랙 델타 함수형 퍼텐셜의
 두 가지 **경계조건**을 적용할 수 있습니다.

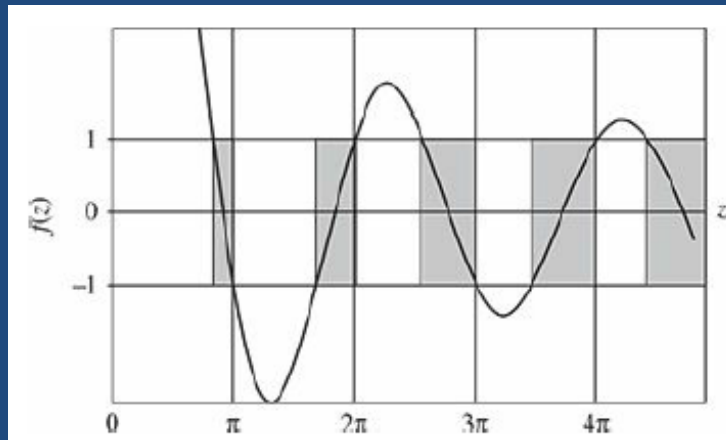
$$\cos qa = \cos ka + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \sin ka$$

이 관계식들을 풀어서 허용되는 에너지의 조건을 구합니다.

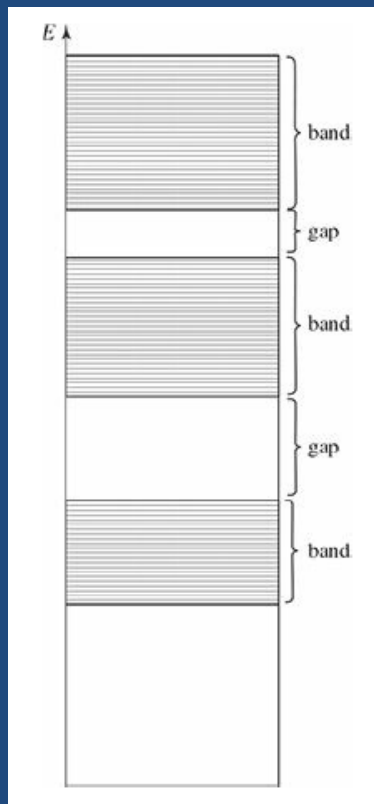
$$\left(z \equiv k\alpha \quad \beta \equiv \frac{m\alpha a}{\hbar^2} \right)$$

$$\cos qa = \cos ka + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \sin ka$$

$$\equiv f(z)$$



그러면 허용되는 에너지의 영역이
띠와 간격의 구조를 형성한다는 것을 알 수 있습니다.



도체

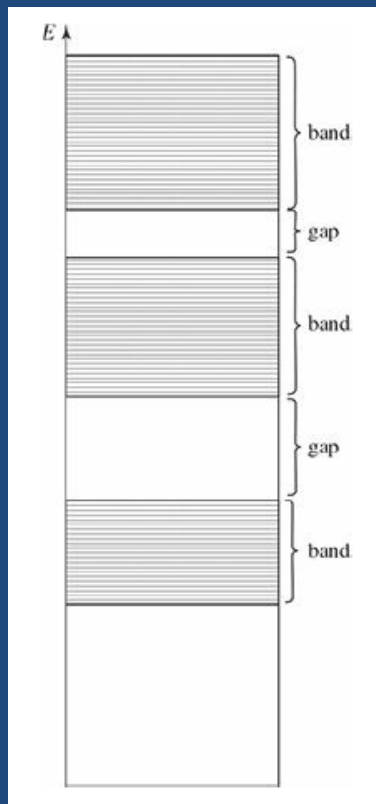


반도체



부도체

가장 낮은 에너지부터 입자를 쌓으면
파울리의 배타 원리에 의해 점점 높은 에너지 영역을 채우게 됩니다.
이 때 에너지가 허용되는 **띠band** 사이에
간격gap이 생기게 됩니다.



도체



반도체



부도체

이러한 띠-간격의 구조는 주기성을 가지는 퍼텐셜에서
일반적으로 나타나는 현상입니다.

이것으로부터 도체conductor, 부도체dielectric, 반도체semi-conductor 등을
이해할 수 있는 기반이 주어집니다.

2. 반전성

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$$

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{H}] = 0$$

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$$

$$\hat{\mathcal{P}}^{-1} = \hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}^\dagger$$

$$\begin{aligned}\hat{Q}'(\hat{x}, \hat{p}) &= \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{Q} \hat{\mathcal{P}} \\ &= \hat{Q}(-\hat{x}, -\hat{p})\end{aligned}$$

임의의 연산자에 대해 반전성은 다음과 같이 작용합니다.

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = \psi'(x) = \psi(-x)$$

$$\hat{\mathcal{P}}^{-1} = \hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}^\dagger$$

$$\hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{H} \hat{\mathcal{P}} = \hat{H}$$

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{H}] = 0$$

해밀토니안이 반전성에 대해 불변인 경우
반전 대칭성을 가지게 됩니다.

$$V(x) = V(-x)$$

1차원의 경우, 퍼텐셜은 위와 같은 특징을 가져야 합니다.

$$V(x) = V(-x)$$

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = \pm\psi(x)$$

한 편, 해밀토니안과 반전 연산자가 교환하므로,
두 연산자에 대해 동시에 고유 상태가 되도록
상태를 잡을 수 있습니다.
이 때, 반전성 연산자의 **고윳값**은 ± 1 이 됩니다.

$$V(x) = V(-x)$$

$$\hat{P}\psi(x) = \pm\psi(x)$$

따라서 고유 상태가 기함수 또는 우함수가 되도록
선택할 수 있습니다.
이것은 시간에 따라 변하지 않습니다.

$$V(x) = V(-x)$$

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = \pm\psi(x)$$

$$V(\vec{r}) = V(-\vec{r})$$

3차원의 경우에는 위와 같은 조건이 적용됩니다.
따라서 여기에는 기함수 또는 우함수의 개념은 적용할 수 없습니다.

$$V(x) = V(-x)$$

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = \pm\psi(x)$$

$$V(\vec{r}) = V(-\vec{r})$$

$$\hat{\mathcal{P}}\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = (-1)^\ell \psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$$

따라서 다음과 같은 고유 상태를 가지게 됩니다.

$$\vec{p}_e = q\vec{r}$$

전기쌍극자모멘트

이 관계를 사용해서 전기쌍극자모멘트에 대한
흥미로운 선택 규칙을 찾아 봅시다.

$$\vec{p}_e = q\vec{r}$$

전기쌍극자모멘트

$$\vec{p}'_e = -\vec{p}_e$$

전기쌍극자모멘트는 위와 같이 변환됩니다.

$$\vec{p}_e = q\vec{r} \quad \text{전기쌍극자모멘트}$$

$$\vec{p}'_e = -\vec{p}_e$$

$$\langle n', \ell', m' | \hat{p}_e | n, \ell, m \rangle = -\langle n', \ell', m' | \hat{p}'_e | n, \ell, m \rangle$$

따라서 임의의 상태에 대한 행렬 요소는
위와 같이 계산됩니다.

$$\vec{p}_e = q\vec{r}$$

전기쌍극자모멘트

$$\vec{p}'_e = -\vec{p}_e$$

$$\begin{aligned}\langle n', \ell', m' | \hat{p}_e | n, \ell, m \rangle &= -\langle n', \ell', m' | \hat{p}'_e | n, \ell, m \rangle \\ &= -\langle n', \ell', m' | \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{p}_e \hat{\mathcal{P}} | n, \ell, m \rangle\end{aligned}$$

$$\vec{p}_e = q\vec{r} \quad \text{전기쌍극자모멘트}$$

$$\vec{p}'_e = -\vec{p}_e$$

$$\begin{aligned} \langle n', \ell', m' | \hat{p}_e | n, \ell, m \rangle &= -\langle n', \ell', m' | \hat{p}'_e | n, \ell, m \rangle \\ &= -\langle n', \ell', m' | \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{p}_e \hat{\mathcal{P}} | n, \ell, m \rangle \\ &= -\langle n', \ell', m' | (-1)^{\ell'} \hat{p}_e (-1)^\ell | n, \ell, m \rangle \end{aligned}$$

$$\vec{p}_e = q\vec{r} \quad \text{전기쌍극자모멘트}$$

$$\vec{p}'_e = -\vec{p}_e$$

$$\begin{aligned} \langle n', \ell', m' | \hat{p}_e | n, \ell, m \rangle &= -\langle n', \ell', m' | \hat{p}'_e | n, \ell, m \rangle \\ &= -\langle n', \ell', m' | \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{p}_e \hat{\mathcal{P}} | n, \ell, m \rangle \\ &= -\langle n', \ell', m' | (-1)^{\ell'} \hat{p}_e (-1)^\ell | n, \ell, m \rangle \\ &= (-1)^{\ell' + \ell + 1} \langle n', \ell', m' | \hat{p}_e | n, \ell, m \rangle \end{aligned}$$

$$\vec{p}_e = q\vec{r} \quad \text{전기쌍극자모멘트}$$

$$\vec{p}'_e = -\vec{p}_e$$

$$\begin{aligned} \langle n', \ell', m' | \hat{p}_e | n, \ell, m \rangle &= -\langle n', \ell', m' | \hat{p}'_e | n, \ell, m \rangle \\ &= -\langle n', \ell', m' | \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{p}_e \hat{\mathcal{P}} | n, \ell, m \rangle \\ &= -\langle n', \ell', m' | (-1)^{\ell'} \hat{p}_e (-1)^\ell | n, \ell, m \rangle \\ &= (-1)^{\ell' + \ell + 1} \langle n', \ell', m' | \hat{p}_e | n, \ell, m \rangle \end{aligned}$$

따라서 $\ell + \ell'$ 이 짝수라면 행렬 요소는 0이 됩니다.
이것을 라포르테(Laporte)의 규칙이라고 합니다.

3. 회전 대칭성

$$\hat{R}_z(\varphi)\psi(r,\theta,\phi) = \psi'(r,\theta,\phi) = \psi(r,\theta,\phi + \varphi)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0$$

$$[\hat{L}_i, \hat{f}] = 0$$

$$[\hat{L}_i, \hat{V}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{V}_k$$

먼저 회전 연산자에 대해 어떻게 변환하는지를 살펴봅시다.
회전 연산에 대해 불변이면 스칼라,
마치 각운동량과 같이 변하면 벡터라고 부릅니다.

	parity	rotations	examples
true vector $\hat{\mathbf{V}}$	$\{\hat{\Pi}, \hat{V}_i\} = 0$	$[\hat{L}_i, \hat{V}_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} \hat{V}_k$	$\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$
pseudovector $\hat{\mathbf{V}}$	$[\hat{\Pi}, \hat{V}_i] = 0$	$[\hat{L}_i, \hat{V}_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} \hat{V}_k$	$\hat{\mathbf{L}}$
true scalar $\hat{f}$	$[\hat{\Pi}, \hat{f}] = 0$	$[\hat{L}_i, \hat{f}] = 0$	$\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{r}}$
pseudoscalar $\hat{f}$	$\{\hat{\Pi}, \hat{f}\} = 0$	$[\hat{L}_i, \hat{f}] = 0$	

참고로 회전 연산자와 반전 연산자에 대해 어떻게 변하는지에 따라
 진짜_{true} 또는 가짜_{pseudo} 스칼라 또는 벡터 연산자가
 정의됩니다.

$$[\hat{L}_i, \hat{f}] = 0$$

$$[\hat{L}_i, \hat{V}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{V}_k$$

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$$

한 편, 해밀토니안이 회전 대칭을 가진다면,
동시에 위와 같은 관계를 가지게 됩니다.

$$[\hat{L}_i, \hat{f}] = 0$$

$$[\hat{L}_i, \hat{V}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{V}_k$$

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$$

$$\hat{H}\psi_{n\ell m} = E_n\psi_{n\ell m}$$

$$\hat{L}_z\psi_{n\ell m} = m\hbar\psi_{n\ell m}$$

$$\hat{L}^2\psi_{n\ell m} = \ell(\ell + 1)\hbar^2\psi_{n\ell m}$$

따라서 각운동량 연산자에 대해 위와 같은 고유 상태를 선택할 수 있습니다.

이러한 단서들을 사용해서
(각운동량에 대한) 스칼라 연산자와 벡터 연산자에 대한
선택 규칙을 찾아봅시다.
이것들을 정리한 것을
비그너-에카르트 Wigner-Eckart 정리라고 합니다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0$$

$$[\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] = 0$$

먼저 스칼라 연산자에 대해 살펴봅시다.
먼저 우리는 위의 세 가지 관계식을 알고 있습니다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}_z, \hat{f}] | n \ell m \rangle$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0$$

$$[\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] = 0$$

첫 번째 관계식으로부터 선택 규칙을 유도해 봅시다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}_z, \hat{f}] | n \ell m \rangle$$

$$= \langle n' \ell' m' | \hat{L}_z \hat{f} - \hat{f} \hat{L}_z | n \ell m \rangle$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0$$

$$[\hat{L}_\pm, \hat{f}] = 0$$

첫 번째 관계식으로부터 선택 규칙을 유도해 봅시다.

$$\begin{aligned}
 [\hat{L}_z, \hat{f}] &= 0 & \rightarrow 0 &= \langle n' \ell' m' | [\hat{L}_z, \hat{f}] | n \ell m \rangle \\
 & & &= \langle n' \ell' m' | \hat{L}_z \hat{f} - \hat{f} \hat{L}_z | n \ell m \rangle \\
 [\hat{L}^2, \hat{f}] &= 0 & &= (m' - m) \langle n' \ell' m' | \hat{f} | n \ell m \rangle
 \end{aligned}$$

$$[\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] = 0$$

첫 번째 관계식으로부터 선택 규칙을 유도해 봅시다.

$$\begin{aligned}
 [\hat{L}_z, \hat{f}] &= 0 & \rightarrow 0 &= \langle n' \ell' m' | [\hat{L}_z, \hat{f}] | n \ell m \rangle \\
 & & &= \langle n' \ell' m' | \hat{L}_z \hat{f} - \hat{f} \hat{L}_z | n \ell m \rangle \\
 [\hat{L}^2, \hat{f}] &= 0 & &= (m' - m) \langle n' \ell' m' | \hat{f} | n \ell m \rangle
 \end{aligned}$$

$$[\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] = 0$$

따라서 $\Delta m \equiv m' - m$ 이 0이 아니라면
행렬 요소는 0이 되어야 합니다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0$$

$$[\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] = 0$$

그 다음 두 번째 관계식에 대해서 적용해 봅시다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}^2, \hat{f}] | n \ell m \rangle$$

$$[\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] = 0$$

그 다음 두 번째 관계식에 대해서 적용해 봅시다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$\begin{aligned}
 [\hat{L}^2, \hat{f}] = 0 & \quad \rightarrow 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}^2, \hat{f}] | n \ell m \rangle \\
 & = \langle n' \ell' m' | \hat{L}^2 \hat{f} - \hat{f} \hat{L}^2 | n \ell m \rangle \\
 [\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] = 0
 \end{aligned}$$

그 다음 두 번째 관계식에 대해서 적용해 봅시다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}^2, \hat{f}] | n \ell m \rangle$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_\pm, \hat{f}] &= 0 \\ &= \langle n' \ell' m' | \hat{L}^2 \hat{f} - \hat{f} \hat{L}^2 | n \ell m \rangle \\ &= [\ell'(\ell' + 1) - \ell(\ell + 1)] \\ &\quad \times \langle n' \ell' m' | \hat{f} | n \ell m \rangle \end{aligned}$$

그 다음 두 번째 관계식에 대해서 적용해 봅시다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}^2, \hat{f}] | n \ell m \rangle$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_\pm, \hat{f}] &= 0 \\ &= \langle n' \ell' m' | \hat{L}^2 \hat{f} - \hat{f} \hat{L}^2 | n \ell m \rangle \\ &= [\ell'(\ell' + 1) - \ell(\ell + 1)] \\ &\quad \times \langle n' \ell' m' | \hat{f} | n \ell m \rangle \end{aligned}$$

따라서 $\Delta \ell \equiv \ell' - \ell$ 이 0이 아니라면
행렬 요소는 0이 되어야 합니다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta \ell = 0$$

$$[\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] = 0$$

마지막으로 세 번째 관계식에 대해서 적용해 봅시다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta \ell = 0$$

$$[\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}_+, \hat{f}] | n \ell m \rangle$$

마지막으로 세 번째 관계식에 대해서 적용해 봅시다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta \ell = 0$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] = 0 \quad &\rightarrow 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}_+, \hat{f}] | n \ell m \rangle \\ &= \langle n' \ell' m' | \hat{L}_+ \hat{f} - \hat{f} \hat{L}_+ | n \ell m \rangle \end{aligned}$$

마지막으로 세 번째 관계식에 대해서 적용해 봅시다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta \ell = 0$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_\pm, \hat{f}] = 0 &\quad \rightarrow 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}_+, \hat{f}] | n \ell m \rangle \\ &= \langle n' \ell' m' | \hat{L}_+ \hat{f} - \hat{f} \hat{L}_+ | n \ell m \rangle \\ &= B_{\ell'}^{m'} \langle n' \ell' (m' - 1) | \hat{f} | n \ell m \rangle \\ &\quad - A_{\ell}^m \langle n' \ell' m' | \hat{f} | n \ell (m + 1) \rangle \end{aligned}$$

마지막으로 세 번째 관계식에 대해서 적용해 봅시다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta \ell = 0$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] = 0 & \rightarrow 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}_{\pm}, \hat{f}] | n \ell m \rangle \\ & = \langle n' \ell' m' | \hat{L}_{\pm} \hat{f} - \hat{f} \hat{L}_{\pm} | n \ell m \rangle \\ & = B_{\ell'}^{m'} \langle n' \ell' (m' - 1) | \hat{f} | n \ell m \rangle \\ & \quad - A_{\ell}^m \langle n' \ell' m' | \hat{f} | n \ell (m + 1) \rangle \end{aligned}$$

$m' = m + 1$ 및 $\ell' - \ell = 0$ 이 아닌 경우는
행렬 요소가 0이 되어야 합니다.

여기에 한 편, $B_{\ell}^{m+1} = A_{\ell}^m$ 이라는 관계를 적용해봅시다.

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta \ell = 0$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_\pm, \hat{f}] = 0 & \quad \rightarrow 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}_+, \hat{f}] | n \ell m \rangle \\ & = \langle n' \ell' m' | \hat{L}_+ \hat{f} - \hat{f} \hat{L}_+ | n \ell m \rangle \\ & = B_{\ell'}^{m'} \langle n' \ell' (m' - 1) | \hat{f} | n \ell m \rangle \\ & \quad - A_\ell^m \langle n' \ell' m' | \hat{f} | n \ell (m + 1) \rangle \end{aligned}$$

이 두 조건이 만족되는 경우 우리는 다음을 얻습니다.

$$\langle n' \ell m | \hat{f} | n \ell m \rangle = \langle n' \ell (m + 1) | \hat{f} | n \ell (m + 1) \rangle$$

$$[\hat{L}_z, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta m = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{f}] = 0 \quad \rightarrow \quad \Delta \ell = 0$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_\pm, \hat{f}] = 0 & \quad \rightarrow 0 = \langle n' \ell' m' | [\hat{L}_+, \hat{f}] | n \ell m \rangle \\ & = \langle n' \ell' m' | \hat{L}_+ \hat{f} - \hat{f} \hat{L}_+ | n \ell m \rangle \\ & = B_{\ell'}^{m'} \langle n' \ell' (m' - 1) | \hat{f} | n \ell m \rangle \\ & \quad - A_{\ell}^m \langle n' \ell' m' | \hat{f} | n \ell (m + 1) \rangle \end{aligned}$$

이 두 조건이 만족되는 경우 우리는 다음을 얻습니다.

$$\langle n' \ell m | \hat{f} | n \ell m \rangle = \langle n' \ell (m + 1) | \hat{f} | n \ell (m + 1) \rangle$$

따라서 행렬 요소는 m 에 무관합니다.

이 모든 내용을 종합하면
스칼라 연산자에 대해서 다음 관계식을 얻습니다.

$$\langle n' \ell' m' | \hat{f} | n \ell m \rangle = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'} \langle n' \ell || \hat{f} || n \ell \rangle$$

n, n', ℓ 에만 의존하고
 m 에는 무관한 상수

마찬가지로 벡터 연산자에 대해서
다음과 같은 관계식을 얻을 수 있습니다.

$$\langle n' \ell' m' | \hat{V}_+ | n \ell m \rangle = -\sqrt{2} C_{m1m'}^{\ell 1 \ell'} \langle n' \ell' || \hat{V} || n \ell \rangle$$

$$\langle n' \ell' m' | \hat{V}_- | n \ell m \rangle = \sqrt{2} C_{m-1m'}^{\ell 1 \ell'} \langle n' \ell' || \hat{V} || n \ell \rangle$$

$$\langle n' \ell' m' | \hat{V}_z | n \ell m \rangle = \sqrt{2} C_{m0m'}^{\ell 1 \ell'} \langle n' \ell' || \hat{V} || n \ell \rangle$$

클렙쉬-고던 Clebsch-Gordan 계수

4. 시간 이동

$$\hat{U}(t)\psi(x,0) = \psi'(x,0) = \psi(x,t)$$

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$$

$$\hat{U}(t)\psi(x, 0) = \psi(x, t)$$

$$\hat{Q}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{Q} \hat{U}(t)$$

하이젠베르크 관점에서의 연산자

슈뢰딩거 관점에서의 연산자

시간 이동 연산자를 사용하면
 상태의 시간을 변하게 하거나 (슈뢰딩거 관점 Schrodinger picture)
 또는 연산자의 시간을 변하게 하도록 (하이젠베르크 관점 Heisenberg picture)
 선택할 수 있습니다.

$$\langle \hat{Q} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{Q} | \psi(t) \rangle = {}_H \langle \psi | \hat{Q}_H(t) | \psi \rangle_H$$

디랙은 이 두 관점은 물리적으로 동등한 것을
기술한다는 것을 밝혀냈습니다.

당시까지 슈뢰딩거의 파동역학과 하이젠베르크의 행렬역학이
경합하고 있었는데, 이 둘이 동등한 것임을 보인 것입니다.

$$i\hbar \frac{d\hat{Q}_H(t)}{dt} = [\hat{Q}_H(t), \hat{H}]$$

이제 하이젠베르크의 관점에서 임의의 관측량의
시간 의존성을 기술하는 운동 방정식을 적어 봅시다.
이것을 **하이젠베르크의 운동 방정식**이라고 부릅니다.
($\hat{Q}_H$ 및 $\hat{H}$ 가 시간에 명시적으로 의존하지 않는 경우)

$$i\hbar \frac{d\hat{Q}_H(t)}{dt} = [\hat{Q}_H(t), \hat{H}]$$

여기에서 우리는 고전 물리학의 푸아송 괄호 관계식과의
수학적인 대응 관계를 명확히 살펴볼 수 있습니다.

한 편, 상태가 시간에 따라 변하는 것을 기술하기 위해
전파 인자_{propagator}라는 것을 사용할 수 있습니다.

$$\psi(x, t) = \hat{U}(t)\psi(x, 0)$$

시간에 따른 상태의 변화는 위와 같이 기술됩니다.

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \hat{U}(t)\psi(x, 0) \\ &= e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} \sum_n c_n \psi_n(x)\end{aligned}$$

시간에 따른 상태의 변화는 위와 같이 기술됩니다.

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \hat{U}(t)\psi(x, 0) \\ &= e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} \sum_n c_n \psi_n(x) \\ &= \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x)\end{aligned}$$

시간에 따른 상태의 변화는 위와 같이 기술됩니다.

$$\begin{aligned}
 \psi(x, t) &= \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x) \\
 &= \sum_{n,m} c_m \underbrace{\int \psi_n^*(x') \psi_m(x') dx'}_{= \delta_{nm}} e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x)
 \end{aligned}$$

이 식을 위와 같이 다시 적어 봅시다.

$$\begin{aligned}
 \psi(x, t) &= \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x) \\
 &= \sum_{n,m} c_m \int \psi_n^*(x') \psi_m(x') dx' e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x) \\
 &= \int \sum_n \psi_n^*(x') e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x) \sum_m c_m \psi_m(x') dx'
 \end{aligned}$$

이 식을 위와 같이 다시 적어 봅시다.

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x)$$

$$= \sum_{n,m} c_m \int \psi_n^*(x') \psi_m(x') dx' e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x)$$

$$= \int \underbrace{\sum_n \psi_n^*(x') e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x)}_{\equiv K(x, x', t)} \underbrace{\sum_m c_m \psi_m(x')}_{\equiv \psi(x', 0)} dx'$$

$\equiv K(x, x', t)$ 전파 인자

$\equiv \psi(x', 0)$ 초기 조건

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x)$$

$$= \sum_{n,m} c_m \int \psi_n^*(x') \psi_m(x') dx' e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x)$$

$$= \int \sum_n \psi_n^*(x') e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x) \sum_m c_m \psi_m(x') dx'$$

$$= \int \langle x, t | x', 0 \rangle \langle x', 0 | \psi \rangle dx'$$

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x)$$

$$= \sum_{n,m} c_m \int \psi_n^*(x') \psi_m(x') dx' e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x)$$

$$= \int \sum_n \psi_n^*(x') e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x) \sum_m c_m \psi_m(x') dx'$$

$$= \int \langle x, t | x', 0 \rangle \langle x', 0 | \psi \rangle dx' \quad \equiv \langle x, t | \psi \rangle$$

$$\begin{aligned}
 K(x, x', t) &= \langle x, t | x', 0 \rangle = \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} | x' \rangle \\
 &= \langle x | \hat{U}(t) | x' \rangle
 \end{aligned}$$

따라서 전파 인자의 크기의 제공은
 어떤 시간 t 에서 x' 에서 x 로 이동할 확률을
 모든 n 에 대해 더한 것을 의미합니다.

$$\begin{aligned} K(x, x', t) &= \langle x, t | x', 0 \rangle = \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} | x' \rangle \\ &= \langle x | \hat{U}(t) | x' \rangle \end{aligned}$$

$$i\hbar \frac{\partial K}{\partial t} = \hat{H}K$$

전파 인자는 슈뢰딩거 방정식을 만족해야 합니다.

$$i\hbar \frac{\partial K}{\partial t} = \hat{H} K$$

$$K \equiv e^{i\frac{S}{\hbar}} \quad \left(H + \frac{\partial S}{\partial t} \right) e^{i\frac{S}{\hbar}} = 0$$

S : 작용 action

그리고 디랙에 의하면, 슈뢰딩거 방정식은
고전적인 극한에서
해밀턴-야코비 방정식 Hamilton-Jacobi equation 을
만족해야 합니다.

$$i\hbar \frac{\partial K}{\partial t} = \hat{H} K$$

$$K \equiv e^{i\frac{S}{\hbar}} \quad \left(H + \frac{\partial S}{\partial t} \right) e^{i\frac{S}{\hbar}} = 0$$

S : 작용 action

따라서 전파 인자의 시간 간격이 아주 짧은 경우,
우리는 작용 S 를 사용해서

$\langle x, t | x', 0 \rangle = e^{i\frac{S}{\hbar}}$ 와 같이 기술할 수 있습니다.

$$\begin{aligned}
 K(x, x', t) &= \langle x, t | x', 0 \rangle = \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} | x' \rangle \\
 &= \langle x | \hat{U}(t) | x' \rangle \\
 &= \int_{\text{all paths}} e^{i\frac{S}{\hbar}}
 \end{aligned}$$

따라서 짧은 시간 간격에 대한 전파 인자가 여러 번 누적되면
우리는 가능한 모든 경로에 대해

$e^{i\frac{S}{\hbar}}$ 인자를 더해주어야 합니다.

이것이 바로 파인만의 **경로 적분** path integral 입니다.

즉, 경로 적분은 전파 인자를 계산하는 방법이며,
양자 상태의 시간에 따른 변화를 기술하는
중요한 방법을 제공해 줍니다.
흥미롭게도 이 방법은 해밀토니안이 아닌
라그랑지안을 사용해서
파동 함수를 계산하게 한다는 특징을 가지고 있습니다.

감사합니다