Theta 함수를 이용한 시간 진행 연산자의 일반적 형태 증명

강정우*, 강동식**

Proof of the General Form of the Time Evolution Operator in terms of the Theta Function

Khang Jeong-woo, Kang Dong-shik***

Abstract

In quantum Mechanics, time evolution operator $U_I(t,t_0)$ plays an important role. In this paper, We obtained general form of the time evolution operator in terms of the general theta-function.

서 론

양자역학의 주된 관심은 주어진 계의 파동함수를 구하고 이 파동함수로 부터 여러가지 물리량 : 에너지, 운동량, 각운동량들을 구하고 또한 계(system)의 미래를 확률로서 예측하고자 하는데 있다. Schrodinger 파동 방정식은 이러한 목적에 이용될 수 있는 방정식의 하나로서 비상대론적 2체계(two-body system)인 경우 좋은 결과를 주고 있다. 하지만 하나의 계가 다른 계와 상호작용할 경우 Schrodinger 파동방정식의 정확한 해를 구할 수 없고 섭동(perturbation)을 이용한 근사 방법을 쓰게 된다. 물론 모든 경우에 섭동론을 적용시켜서 근사해를 구할 수 있는 것은 아니고 상호작용의 정도가 이 섭동론 적용여부를 판가름하게 된다. 말하자면 상호작용계수(coupling constant)가 작을 경우에 한하여 섭동론을 사용할 수 있는 가능성이 있는 것이다(Dyson, 1949).

양자계를 기술하는 방식에는 Schrodinger 방식(picture), Heisenberg 방식, 상호작용방식(interaction picture)이 있는데, 상호작용하는 계의 파동함수를 구하는데 있어서는 상호작용 방식

* 사범대학 과학교육과

** 사범대학 과학교육과 (강사)

을 쓰는 것이 좋다. 왜냐하면 계의 상호작용을 기술하기 위해서는 상호작용에 해당하는 Hamiltionin $(=H_I)$의 주된 역할을 해야 하고 상호작용 방식에서 시간진행연산자(time evolution operator)는 H_I만을 포함하기 때문에 이와 같은 경우에 이 방식이 적절한 것이다. 여기에서 시간진행연산자는 계의 상태가 어떤 시점에서 알려졌을 때 임의의 시간이 경과한다음 계의 상태를 알려주는 정보를 포함하고 있으며 따라서 계의 상태를 나타내는 파동함수를 알기 위해서는 이 시간 진행 연산자를 알아야 하며 이 논문의 목적은 이 시간 진행 연산자를 구하는 과정에서 나타나는 Time ordering 표현을 얻는데 있다. 시간 진행 연산자를 구하는 방법은 Schrodinger 파동방정식을 이용해서 적분방정식을 만들고 이 적분방정식을 반복법 이용 시간 연산자를 급수(Series) 형태로 만드는 것이다.

이 과정에서 대부분의 논문 또는 양자장론 교재들은 2차항까지만 정리를 하고 넘어가고 있다. 일반적인 경우의 증명이 이 논문의 목적이며 여기에서 증명 방정식은 non-Abelian 경우의 path-ordering에도 그대로 적용이 된다.(C.Itzykson, J. B.Zuber)

본 론

상호작용 방식(Interation picture)에서 시간 진행 연산자는 다음과 같이 정의된다. 초기 순간의 계의 상태가 $|\alpha,t_0:t_0\rangle_I$로 주어졌을 때 임의의 순간 t에서의 계의 상태는

$$|\alpha,t_o:t\rangle_I=U_I(t,t_o)\,|\alpha,t_o:t_o\rangle_I \text{로 주어진다.} \quad \cdots\cdots\cdots (1)$$

여기서 $U_I(t,t_o)$가 시간 진행 연산자이고 첨자 I는 상호 작용 방식을 나타낸다. Schrodinger 파동방정식은 상호 작용 방식에서

$$ih\frac{\partial}{\partial t}\,|\alpha,t_I:t\rangle_I=H_I|\alpha,\ to:t\rangle_I \cdots\cdots\cdots (2)$$

이고 H_I는 계의 상호작용을 나타내는 상호 작용 Hamiltonion으로 일반적으로 시간의존 연산자이다. 방정식 (1)을 방정식 (2)에 대입하면

$$ih\frac{\partial}{\partial t}\ U_I(t,t_o)=H_IU_I(t,t_o) \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (3)$$

가 되고 초기 조건으로서 $t=t_o$일때

$$U_I(t_o,t_o)=1 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (4)$$

이 된다. 방정식 (3)을 시간에 대해서 적분하면

$$U_I(t,t_o)=1-i/h\int_{to}^{t}H_I(t')\ U_I(t',t_o)\,dt' \quad \cdots\cdots\cdots (5)$$

이 식의 우변에 우리가 구하고자 하는 U_I가 적분기호 안에 있기 때문에 이것은 적분 방정식이 되고 반복적으로 $U_I(t,t_o)$를 대입해서 급수해를 구할 수 있다.

$$\begin{aligned}U_I(t,t_o)&=1-i/h\int_{to}^{t}H_I(t')\,dt'+(-i/h)^2\int_{to}^{t}\int_{to}^{t'}H_I(t')H_I(t'')\,dt'dt''\\&\quad+\cdots+(-i/h)^n\int_{t_o}^{t}\int_{t_o}^{t_1}\cdots\int_{t_o}^{t_{n-1}}dt_1dt_2\cdots dt_nH_I(t_1)H_I(t_2)\cdots H_I(t_n)\\&\quad+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (6)\end{aligned}$$

이러한 급수해를 dyson 급수해라 한다. (F.J. Dyson, 1949)

방정식 (6)에서 일반항의 적분 기호 안에 있는 작용 Hamiltonion의 곱해진 순서를 보면 $t_1\geq t_2\geq t_3\geq\cdots\geq t_n$으로 되어 있으며 급수해를 얻는 과정에서 이것은 상호작용 Hamiltonion이 비교환적(i.e. $[H_I(t),H_I(t')]\neq0,t\neq t'$)이면 반드시 지켜져야 한다. 따라서 이러한 순서를 유지시켜주는 time-ordering 연산자를 도입해서 방정식 (6)을 다시쓰면

$$U_I(t,t_o)=\sum_{n=0}^{\infty}(-i/h)^n\int_{to}^{t_1}\int_{to}^{t_n}\cdots\int_{to}^{t}dt_1\cdots dt_n T[H_I(t_1)H_I(t_2)\cdots H_I(t_n)] \quad \cdots\cdots (7)$$

이 되며 이때 time-ordering operator T는 다음과 같은 성질을 갖는다.

$$T(H_I(t)H_I(t'))=H_I(t)H_I(t') \text{ if } t\geq t'$$
$$H_I(t')H_I(t) \text{ if } t'\geq t$$

또는

$$T(H_I(t)H(t'))=\theta(t-t')H_I(t)H_I(t')+\theta(t'-t)H_I(t')H_I(t) \quad \cdots\cdots (8)$$

여기에서 θ (t)는 theta 함수로서 다음을 만족한다.

$$\theta(t)= \begin{cases} 1 & t>0 \\ 0 & t<0 \end{cases} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (9)$$

방정식(8)에서 만약 $H_I(t)H_I(t')+H_I(t')H_I(t)=0$ 이라면 우변의 2번째 항의 부호는(-)가 된다.

다음과 같이 일반적인 theta−함수를 도입하자.

$$\theta(t_1,t_2,\cdots,t_n)= \begin{cases} 1 & \text{if } t_1\geq t_2\geq\cdots\geq t_n \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad \cdots\cdots\cdots (10)$$

그러면 상호작용 Hamiltonian의 time-ordering 곱은

$$T[H_I(t_1)H_I(t_2)\cdots H_I(t_n)]$$
$$=\sum_{\sigma}\theta(t_{\sigma1},\cdots t_{\sigma p})\in_\sigma H_I(t_\sigma)_1\cdots H_I(t_\sigma)_n \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (11)$$

이 되고 여기에서 σ는 $t_1,t_2,\cdots,t_n$의 순서를 교환해서 재배치하는 것을 나타내고 $\in_\sigma$는 연산자가 교환될 때 부호가 바뀌는 경우는 $(-1)^\sigma$가 된다. 우리의 경우에 상호작용 Hamiltonian이 교환될때 부호가 바뀌지 않는다 가정하고 $(-1)^\sigma$를 생략하기로 한다. time-ordering 연산자 T가 갖는 또다른 성질은

$$T[H_I(t_1)\cdots H_I(t_n)]=T[H_I(t_{\sigma1})\cdots H_I(t_{\sigma n})] \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (12)$$

으로 정의식 (11)로부터 쉽게 알 수 있다. 방정식 (7)에서 적분변수를 $t_1,t_2,\cdots,t_n$에서 $t_{\sigma1},t_{\sigma2},\cdots,t_{\sigma n}$으로 바뀌고 방정식 (12)를 이용하면

$$\int_{to}^{t}dt_1\int_{to}^{t_1}dt_2\cdots\int_{to}^{t_{n-1}}dt_n T[H_I(t_1)\cdots H_I(t_n)]$$
$$=\int_{to}^{t}dt_{\sigma1}\int_{to}^{t_{\sigma1}}dt_{\sigma2}\cdots\int_{to}^{t_{\sigma n-1}}dt_{\sigma n}T[H_I(t_{\sigma1})\cdots H_I(t_{\sigma 1})]$$
$$=\int_{to}^{t}dt_{\sigma1}\int_{to}^{t_{\sigma1}}dt_{\sigma2}\cdots\int_{to}^{t_{\sigma n-1}}dt_{\sigma n}T[H_I(t_1)\cdots H_I(t_n)] \quad \cdots\cdots (13)$$

방정식 (13)에서 $t_{\sigma i}$는 $t_1,\cdots,t_n$ 중의 하나에 해당이 되고 따라서 이 식은 $t_1,\cdots,t_n$을 재배열해 놓은 것에 지나지 않는다. 재배열 가지수는 n! 이므로 (3)식은 다시 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\int_{to}^{t}dt_1\int_{to}^{t_1}dt_2\cdots\int_{to}^{t_{n-1}}dt_n T[H_I(t_1)\cdots H_I(t_n)]$$
$$=1/n!\sum\int_{to}^{t}dt_{\sigma1}\int_{to}^{t_{\sigma1}}\cdots\int_{to}^{t_{\sigma n-1}}dt_{\sigma n}\sum_{p}\theta(t_{p1}\cdots t_{pn})H_I(t_{p1})\cdots H_I(t_{pn}) \quad \cdots\cdots (15)$$

가 된다. 여기에서 적분 상한치들은 $t\geq t_{\sigma1}\geq t_{\sigma2},\cdots\cdots\geq,t_{\sigma n}$을 만족해야 되고 theta-함수의 정의식 (10)으로부터 $t_{p1}\geq,t_{p2}\geq,\cdots\cdots\geq t_{pn}$이 되어야 한다.

또한 t_{pi}는 $t_{\sigma1},t_{\sigma2},\cdots\cdots,t_{\sigma n}$ 중의 하나이어야 하므로 (15)식은 $t_{\sigma1}=t_{p1},t_{\sigma2}=t_{p2},\cdots\cdots,t_{\sigma n}=t_{pn}$을 만족하지 않으면 영(zero)이 되어버린다. 그러므로 (15)식은 다음과 같이 된다.

$$1/n!\sum_{\sigma}\int_{to}^{t}dt_{\sigma1}\int_{to}^{t_{\sigma1}}dt_{\sigma2}\cdots\int_{to}^{t_{\sigma n-1}}dt_{\sigma n}\theta(t_{\sigma1},t_{\sigma2}\cdots t_{\sigma n})H(t_{\sigma1})\cdots H(t_{\sigma n}) \quad \cdots (16)$$

적분의 상한치와 하한치는 적분변수의 범위를

나타내는 값으로 theta-함수의 변수조건 (식(10))들과 결합하여 다음의 결과를 준다.

$$[\cdots\int_{to}^{t\sigma i-1} dt_{\sigma i}\int_{to}^{t\sigma i} dt_{\sigma i+1}\cdots]\ \theta\ (\cdots t_{\sigma i}t_{\sigma i+1}\cdots)$$

$$=[\ (\cdots\int_{to}^{t\sigma i-1} dt_{\sigma i}\int_{to}^{t\sigma i-1} dt_{\sigma i+1}\cdots)-(\cdots\int_{to}^{t\sigma i-1} dt_{\sigma i}\int_{tbi}^{\sigma i-1} dt_{\sigma i+1}\cdots)]\ \theta\ (\cdots t_{\sigma i-1}t_{\sigma i}t_{\sigma i+1}\cdots)\cdots$$

$$=[\ \cdots\int_{to}^{t\sigma i-1} dt_{\sigma i}\int_{to}^{t\sigma i-1} dt_{\sigma i+1}\cdots)\theta\ (\cdots t_{\sigma i-1}t_{\sigma i}t_{\sigma i+1}\cdots)\cdots\cdots (17)$$

$t_{\sigma o}\equiv t,\ i=1,\cdots,n-1$

i=1부터 시작해서 (17)식을 적용시켜 나가면 적분 상한치는 i=1일때 $t_{\sigma o}=t$가 되고, i=2일때 $t_{\sigma 1}$ 대신 $t_{\sigma o}=t$를 쓰게 되고 따라서 모든 적분 상한치를 t로 바꾸어서 쓸 수 있게 된다. 따라서 식

(16)은

$$1/n\ !\sum_{\sigma}\int_{to}^{t} dt_{\sigma 1}\int_{to}^{t} dt_{\sigma 2}\cdots\int_{to}^{t} dt_{\sigma n}\theta\ (t_{\sigma 1}\cdots t_{\sigma n})\ H_I(t_{\sigma 1})\cdots H_I(t_{\sigma n})\ \cdots\cdots (18)$$

이 되고 $t_{\sigma 1},\cdots,t_{\sigma n}$는 $t_1,\cdots,t_n$를 재배열해 놓은 것이므로 적분 순서를 재배열시킬 수가 있다. (적분 상한치가 적분변수에 상관 없음)

$$1/n\ !\int_{to}^{t} dt_1\int_{to}^{t} dt_2\cdots\int_{to}^{t} dt_n\sum_{\sigma}\theta\ (t_{\sigma 1},\cdots t_{\sigma n})H_I(t_{\sigma 1})\cdots H_I(t_{\sigma n})$$

$$1/n\ !\int_{to}^{t} dt_1\int_{to}^{t} dt_2\cdots\int_{to}^{t} dt_n\int_{to}^{t} dt_n T[\ _I(t_1)\cdots H_I(t_n)]\ \cdots\cdots (19)$$

결론적으로 시간 진행 연산자(time evolutionopertor) $U_I(t,t_o)$는

$$U_I(t,t_o)=\sum_{n=0}^{\infty} 1/n\ !\ (-i/h)^n\int_{to}^{t} dt_1H_I(t_1)\int_{to}^{t} dt_2\ H_I(t_2)\cdots\int_{to}^{t} dt_nH_I(t_n)\ \cdots\cdots (20)$$

$$=T\ \exp\ \{-i/h\int^{t} dt'H_I(t')\}\ \cdots\cdots\cdots (21)$$

가 된다. (21)식은 (20)식을 간략히 나타낸 것으로 실지 계산에서는 (20)식을 사용하게 된다. 양자장론(quantum field theory)에서는 Hamiltonion 대신에 Hamiltonion 밀도(density)를 사용하며 (21)식은

$$T\ \exp\ \{-i/h\int d^4 x H_I(x)\}\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (22)$$

으로 여기서 $H_I(t)=\int d^3x\ H_I(x,t)$, 그리고 $X\mu(x,t)$이다.

참 고 문 헌

Dyson, F. J. 1949. The Radiation Theories of Tomonaga, Schwinger, and Feyman. Phys. Rev. 75, 486.

C. Itzykson, C., J. B. Zuber. 1982. Quantum Field Theory. MacGraw-Hill int. Ed. p.178. (1982)