Zápisky 02KVAN2

Antonín Hoskovec Jan Lochman

29. března 2024

Obsah

1 Algebraická teorie momentu hybnosti **5**
1.1 Skládání dvou nezávislých momentů hybnosti 8

2 Tenzorové operátory, Wigner–Eckartův teorém **14**

3 Další ekvivalentní způsoby zápisu kvantové mechaniky **25**
3.1 Jiný výběr báze Hilbertova prostoru 25
3.1.1 Hybnostní reprezentace 26
3.1.2 Energetická reprezentace 29
3.2 Jiný popis časového vývoje 31
3.2.1 Heisenbergova reprezentace 34
3.2.2 Diracova reprezentace 35

4 Matice hustoty a smíšené kvantové stavy **40**
4.1 Složené systémy a provázané stavy 50

5 Přibližné metody v kvantové mechanice **53**
5.1 WKB aproximace 53
5.2 Ritzova variační metoda 63
5.3 Nestacionární poruchová teorie 69
5.4 Náhlá změna hamiltoniánu 78

6 Propagátor **82**
6.1 Všechny možné historie 82
6.2 Rovnice pro propagátor 84
6.3 Volná částice 85
6.3.1 Rozplývání vlnového balíku 86

7 Dráhový integrál **88**
7.1 Opravdu všechny možné historie . . . 88
7.1.1 Výhody a nevýhody dráhového integrálu . . . 90
7.2 Volná částice . . . 91
7.3 Harmonický oscilátor . . . 92

8 Teorie rozptylu **95**
8.1 Propagátor poruchově . . . 95
8.1.1 Feynmanovy diagramy . . . 96
8.2 Použití dráhového integrálu pro popis rozptylu . . . 97
8.2.1 Od času k energii . . . 100
8.2.2 Coulombův rozptyl . . . 102

9 Partiční suma **106**
9.1 Použití k výpočtu středních hodnot pozorovatelných ve vakuovém stavu 106
9.1.1 Funkcionální derivace . . . 107

10 Reprezentace vícečásticových systémů **109**
10.1 Obsazovací čísla, Fockův prostor . . . 109
10.2 Bosonové kreační a anihilační operátory . . . 110
10.2.1 Operátory počtu částic . . . 112
10.2.2 Časový vývoj . . . 113
10.2.3 Spojité stupně volnosti . . . 114
10.3 Fermionové kreační a anihilační operátory . . . 115
10.3.1 Operátory počtu částic . . . 116
10.3.2 Hamiltonián . . . 117
10.3.3 Více druhů částic . . . 117

11 Kvantování klasických polí **118**
11.1 Připomenutí: klasická teorie pole . . . 118
11.2 Jak kvantovat klasická pole . . . 119
11.2.1 Volné reálné Klein-Gordonovo pole ($c = 1, \hbar = 1$) . . . 121
11.3 Kvantování elektromagnetického pole . . . 124
11.3.1 Interakce elektromagnetického pole s látkou . . . 127

Předmluva

Drazí přátelé kvantové fyziky, na konci zimního semestru 2013/14 jsem učinil neuvážené rozhodnutí do konce dalšího semestru dokončit poznámky, které v loňském roce začal Jan Lochman. Odvedl tak dobrou práci, že nešlo odolat. V časech kdy jsem potřeboval publikovat a skládat zkoušky doktorského studia jsem po nocích, časných ránech a víkendech dával dohromady text, který máte před sebou. Velká část je převzata z poznámek [1] laskavě poskytnutých Liborem Šnoblem. Je mým vroucím přáním, protože cvičím ze srdce rád, aby poznámky pomohly kde je potřeba a tam, kde já na cvičeních selhal – rukopisně, faktickými chybami – jsem přeci jen člověk.

Poznámky jsem se snažil projít, ale chyb je v nich určitě spousta a navíc nejsou zkontrolované přednášejícím, Liborem Šnoblem, proto mám dvě prosby. Zaprvé, pokud jste si jistí, že jste našli chybu, opravte ji bez ptaní (na wikiskripta máte přístup). Za druhé, u zkoušky nebo nedejbože státnic, se na poznámky neodvolávejte, pokud se zároveň neodvoláváte na přednášku, cvičení, nebo jednu z učebnic v referencích - nejsem garantem předmětu a mezi mými znalostmi a znalostmi přednášejícího je zející propast, větší než je vzdálenost z Břehovky na Trojanku v čase oběda.

Následuje nezměněná předmluva k původnímu textu od Jana Lochmana, k jeho ostatnímu textu jsem jen sem tam přidal příklad, opravil překlep, ale jinak jsem ho neměnil.

Všem kamarádům a kolegům,

Antonín Hoskovec
hoskoant@fjfi.cvut.cz

Drahý matematický fyziku,

Pokud tohle čteš, dostaly se ti do rukou zápisky ke KVAN02, které již brzy zkřiví tvůj obličej do nevídaných tvarů. Budou-li někdy tyto zápisky tvým večerním společníkem, doporučuji se zbavit veškerých předmětů, které by mohly odpoutat tvoji pozornost od tohoto skvostu (např. diáky z naftových plošin, Reggae Wilson a jeho hity z výtahu...). Teď ale trochu vážně.

Text je založen na přednáškách a cvičeních, které v LS 2012 vedl Ing. Libor Šnobl, Ph.D, a pokrývá je přibližně z poloviny. Nejedná se o pouhé přepsáním pořízených zápisků do digitální podoby. Snažil jsem se poznámky z přednášek a cvičeních rozšířit tak, aby pochopení problematiky bylo co možná nejjednodušší (někteří mě za to možná budete proklínat).

Nalezené chyby (ne-pravopysného původu) mi neváhejte hlásit na mail. Bude-li někdo mít odvahu navázat na mé počínání a zápisky dovést do zdárného konce, neváhejte se mi ozvat - rád poskytnu aktuální verzi zdrojáků.

S úctou,

Jan Lochman
Hansoae@gmail.com

1 Algebraická teorie momentu hybnosti

V minulém semestru jsme zavedli operátor momentu hybnosti způsobem

$$\hat{L}_j = \varepsilon_{jkl} \hat{X}_k \hat{P}_l.$$

a viděli, že řada jeho vlastností plyne čistě ze znalosti komutačních relací

$$\left[\hat{L}_j, \hat{L}_k\right] = i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{L}_l, \quad \left[\hat{L}_j, \hat{L}^2\right] = 0. \tag{1.1}$$

Tyto relace lze odvodit z komutátorů

$$\left[\hat{X}_k, \hat{X}_l\right] = 0, \quad \left[\hat{P}_k, \hat{P}_l\right] = 0, \quad \left[\hat{X}_k, \hat{P}_l\right] = i\hbar\delta_{kl}$$

a identit platných pro komutátory zahrnující součiny operátorů[1]

$$\begin{aligned} [A, BC] &= B\,[A, C] + [A, B]\,C, \\ [AB, C] &= A\,[B, C] + [A, C]\,B. \end{aligned} \tag{1.2}$$

Obvykle hledáme společné vlastní vektory komutujících operátorů $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$. V jazyce braketového formalizmu je můžeme označit kety $|\lambda, \mu\rangle$, kde vyžadujeme

$$\begin{aligned} \hat{L}^2|\lambda, \mu\rangle &= \lambda|\lambda, \mu\rangle, \\ \hat{L}_3|\lambda, \mu\rangle &= \mu|\lambda, \mu\rangle, \\ \langle\lambda, \mu|\lambda, \mu\rangle &= 1 \quad \text{(normalizace)}. \end{aligned} \tag{1.3}$$

Předpokládáme existenci vlastního vektoru $|\lambda, \mu\rangle$ pro jistou dvojici λ, μ. Úkolem algebraické teorie momentu hybnosti je zjistit maximum o λ, μ a dalších vlastních vektorech výhradně na základě komutačních relací operátoru momentu hybnosti (1.1). Získaná pravidla pak platí i pro libovolnou další trojici operátorů, která splňuje (1.1), i když není tvaru vektorového součinu polohy a hybnosti (tedy například operátory spinu).

V dalších výpočtech využijeme s výhodou posunovacích operátorů

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2,$$

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm\right] = 0, \quad \left[\hat{L}_3, \hat{L}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{L}_\pm, \quad \left[\hat{L}_+, \hat{L}_-\right] = 2\hbar\hat{L}_3 \tag{1.4}$$

Je výhodné vyjádřit operátor $\hat{L}^2$ pomocí posunovacích operátorů $\hat{L}_\pm$ a operátoru $\hat{L}_3$

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= \hat{L}_3^2 + \frac{1}{4}\left(\hat{L}_+ + \hat{L}_-\right)^2 + \frac{-1}{4}\left(\hat{L}_+ - \hat{L}_-\right)^2 = \hat{L}_3^2 + \frac{1}{2}\left(\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+\right) = \\ &= \hat{L}_3^2 + \hat{L}_+\hat{L}_- - \hbar\hat{L}_3 = \hat{L}_3^2 + \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hbar\hat{L}_3. \end{aligned} \tag{1.5}$$

[1] Všimněte si, že tvarem nápadně připomínají Leibnizovo pravidlo pro derivaci součinu, podle čehož si jdou snadno zapamatovat. Operace, které splňují $D(xy) = xD(y) + D(x)y$ (jako zde $D(\bullet) = [A, \bullet]$, resp. $D(\bullet) = [\bullet, C]$), se také zobecněně nazývají derivace.

Nyní se podíváme, jak se vůči operátorům $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$ chová vektor $\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle$. Užijeme komutačních relací posunovacích operátorů (1.4) a rovností (1.3),

$$\begin{aligned}\hat{L}^2\left(\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle\right) &= \hat{L}_\pm\left(\hat{L}^2|\lambda,\mu\rangle\right) = \lambda\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle \\ \hat{L}_3\left(\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle\right) &= \left(\hat{L}_\pm\hat{L}_3 + \left[\hat{L}_3,\hat{L}_\pm\right]\right)|\lambda,\mu\rangle = \left(\hat{L}_\pm\hat{L}_3 \pm \hbar\hat{L}_\pm\right)|\lambda,\mu\rangle = \\ &= (\mu\pm\hbar)\,\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle.\end{aligned} \tag{1.6}$$

Využijeme vyjádření $\hat{L}^2$ pomocí posunovacích operátorů (1.5) k určení normy vektoru $\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle$

$$\begin{aligned}\left\|\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle\right\|^2 &= \langle\lambda,\mu|\hat{L}_\pm^\dagger\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle = \langle\lambda,\mu|\hat{L}_\mp\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle = \\ &= \langle\lambda,\mu|(\hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 \mp \hbar\hat{L}_3)|\lambda,\mu\rangle = \\ &= \left(\lambda - \mu^2 \mp \hbar\mu\right)\underbrace{\langle\lambda,\mu|\lambda,\mu\rangle}_{=1} \geq 0,\end{aligned} \tag{1.7}$$

což nám dává podmínku

$$\lambda \geq \mu\,(\mu\pm\hbar)\,. \tag{1.8}$$

Rovněž jsme zjistili, že $\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle$ je vlastní vektor pro $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$, pokud $\lambda > \mu\,(\mu\pm\hbar)$. Působením $\hat{L}_+$ na $|\lambda,\mu\rangle$ takto (po normalizaci) získáváme postupně vektory $|\lambda,\mu+\hbar\rangle, |\lambda,\mu+2\hbar\rangle,\ldots$ Nerovnost (1.8) přechází při k-násobném aplikování $\hat{L}_+$ na podmínku $\lambda \geq (\mu+k\hbar)\,(\mu+(k+1)\hbar)$, kde $k\in\mathbb{N}_0, \lambda,\mu = \text{const}$. Jelikož pravá strana nerovnosti roste s rostoucím k do $+\infty$, musí ale existovat $K_0\in\mathbb{N}$ takové, že $(\mu+K_0\hbar)\,(\mu+(K_0+1)\hbar)$ překročí hodnotu λ. Pokud bychom byli schopni najít odpovídající vektor $|\lambda,\mu+K_0\hbar\rangle$, toto by podle (1.7) znamenalo, že kvadrát normy $L_+|\lambda,\mu+K_0\hbar\rangle$ je záporný, čemuž musíme předejít. Tento problém se vyřeší, pokud $\exists K\in\mathbb{N}_0 : |\lambda,\mu+K\hbar\rangle \neq \mathbb{O} \wedge \hat{L}_+|\lambda,\mu+K\hbar\rangle = \mathbb{O}$: v tom případě výsledek aplikace L_+ normalizovat nelze a naše generovaná posloupnost vlastních vektorů skončí.

Předefinujme $\mu\mapsto\tilde{\mu} = \mu + K\hbar$. Vlastní vektor $|\lambda,\tilde{\mu}\rangle$ splňuje

$$\hat{L}_3|\lambda,\tilde{\mu}\rangle = \tilde{\mu}|\lambda,\tilde{\mu}\rangle, \quad \hat{L}^2|\lambda,\tilde{\mu}\rangle = \lambda|\lambda,\tilde{\mu}\rangle, \quad \langle\lambda,\tilde{\mu}|\lambda,\tilde{\mu}\rangle = 1$$

a navíc (z (1.7))

$$\|\hat{L}_+|\lambda,\tilde{\mu}\rangle\|^2 = \lambda - \tilde{\mu}^2 - \tilde{\mu}\hbar = 0,$$

z čehož okamžitě plyne

$$\lambda = \tilde{\mu}\,(\tilde{\mu}+\hbar)\,. \tag{1.9}$$

Postup zopakujeme pro operátor $\hat{L}_-$ a vektor $|\lambda,\tilde{\mu}\rangle$. Působením $\hat{L}_-$ na $|\lambda,\tilde{\mu}\rangle$ získáváme posloupnost vektorů $|\lambda,\tilde{\mu}-\hbar\rangle, |\lambda,\tilde{\mu}-2\hbar\rangle,\ldots$ Po k-násobném aplikování $\hat{L}_-$ na $|\lambda,\tilde{\mu}\rangle$ získáváme vektor $|\lambda,\tilde{\mu}-k\hbar\rangle$. Nerovnost (1.8) pro vektor $|\lambda,\tilde{\mu}-k\hbar\rangle$ je tvaru $\lambda \geq (\tilde{\mu}-k\hbar)\,(\tilde{\mu}-(k+1)\hbar)$, kde $k\in\mathbb{N}_0, \lambda,\tilde{\mu} = \text{const}$. Znovu si můžeme povšimnout, že pravá strana této nerovnosti jde v limitě s k do $+\infty$. Musí proto existovat

$\tilde{K}_0 \in \mathbb{N} : \lambda < (\tilde{\mu} - \tilde{K}_0\hbar)(\tilde{\mu} - (\tilde{K}_0 + 1)\hbar)$. Pro $\tilde{K}_0$ by však kvadrát normy vektoru $L_-|\lambda, \tilde{\mu} - \tilde{K}_0\hbar\rangle$ opět byl záporný. Aby tento případ nenastal, budeme požadovat, aby $\exists\tilde{K} \in \mathbb{N}_0 : |\lambda, \tilde{\mu} - \tilde{K}\hbar\rangle \neq \mathbb{O} \wedge \hat{L}_-|\lambda, \tilde{\mu} - \tilde{K}\hbar\rangle = \mathbb{O}$. Poslední rovnost je možno s užitím (1.7) a (1.9) použít k vyjádření $\tilde{K}$:

$$\lambda = \tilde{\mu}\,(\tilde{\mu} + \hbar) = \left(\tilde{\mu} - \tilde{K}\hbar\right)\left(\tilde{\mu} - (\tilde{K} + 1)\hbar\right),$$

což je kvadratická rovnice pro $\tilde{K}$ mající dvě řešení, $\tilde{K} = 2\tilde{\mu}/\hbar$ nebo $\tilde{K} = -1$. Matematický smysl mají pouze $\tilde{K} \in \mathbb{N}_0$, dozvídáme se tedy, že $2\tilde{\mu}$ je nutně celočíselný nezáporný násobek $\hbar$.

Získali jsme tak posloupnost vlastních vektorů $|\lambda, \tilde{\mu}\rangle, |\lambda, \tilde{\mu} - \hbar\rangle, \ldots, |\lambda, -\tilde{\mu}\rangle$. Mimo to jsme rovněž ukázali, jak vypadá (bodové) spektrum operátorů $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$. Zaměníme-li značení $|\lambda, \mu\rangle \mapsto |l, m\rangle : (\lambda, \mu) = (\hbar^2 l(l+1), \hbar m)$, můžeme shrnout naše výsledky:

$$\begin{aligned}
\sigma_P(\hat{L}^2) &\subset \left\{\hbar^2 l\,(l+1)\middle|2l \in \mathbb{N}_0\right\}, \\
\sigma_P(L_3) &\subset \{\hbar m | m \in \mathbb{Z}\}, \\
\langle l, m|l, m\rangle &= 1 \quad \text{pro } m \in \{-l, -l+1, \ldots, l\}, \\
\hat{L}^2|l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle, \\
\hat{L}_3|l, m\rangle &= \hbar m|l, m\rangle.
\end{aligned}$$

U tohoto algoritmu jsme se zatím hlouběji nezabývali normalizací vznikajících vektorů. K ní máme připraven vztah (1.7), který přepíšeme pomocí kvantových čísel l, m:

$$\left\|\hat{L}_\pm|l, m\rangle\right\|^2 = \left(\hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m(m \pm 1)\right)\langle l, m|l, m\rangle,$$

z čehož plyne

$$|l, m \pm 1\rangle = \hbar\left(\alpha^{(\pm)}(l, m)\right)^{-1}\hat{L}_\pm|l, m\rangle, \quad |\alpha^{(\pm)}(l, m)| = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}.$$

Koeficient $\alpha^{(\pm)}(l, m)$ není určen jednoznačně. Je možno mu připsat jakoukoliv fázi $e^{i\varphi}$, $\varphi \in \mathbb{R}$, která jeho normu nijak nezmění. Budeme však používat standardní konvenci (Condon–Shortley), která koresponduje s volbou nezáporné reálné odmocniny[2]

$$\alpha^{(\pm)}(l, m) = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \tag{1.10}$$

[2]Condon a Shortley nedefinují pouze volbu znaménka $\alpha^{(\pm)}$. Jedná se o celkové přiřazení komplexních fází sférickým funkcím $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ a zmíněná relace je důsledkem. Pro úplnost uveďme, že existují i jiné přijímané znaménkové konvence.

1.1 Skládání dvou nezávislých momentů hybnosti

Mějme systém se dvěma na sobě nezávislými momenty hybnosti $\hat{\vec{L}}_{(1)}, \hat{\vec{L}}_{(2)}$. Příkladem může být soustava dvou částic nebo jedna částice a její orbitální moment a spin. Operátory momentů hybnosti nechť splňují komutační relace

$$\left[\hat{L}_{(1)j}, \hat{L}_{(1)k}\right] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{L}_{(1)l}, \quad \left[\hat{L}_{(2)j}, \hat{L}_{(2)k}\right] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{L}_{(2)l}, \quad \left[\hat{L}_{(1)j}, \hat{L}_{(2)k}\right] = 0. \tag{1.11}$$

Předpokládáme, že v námi uvažovaném Hilbertově prostoru tvoří $\hat{\vec{L}}^2_{(1)}$, $\hat{\vec{L}}^2_{(2)}$, $\hat{L}_{(1)3}$, $\hat{L}_{(2)3}$ ÚMP. Společné vlastní vektory této čtveřice operátorů $|\psi\rangle$ budeme charakterizovat dvojicí ketů

$$|\psi\rangle = |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle \overset{\text{ozn.}}{=} |l_1, m_1\rangle|l_2, m_2\rangle$$

splňujících

$$\begin{aligned} \hat{\vec{L}}^2_{(1)}|\psi\rangle &= \hbar^2 l_1(l_1+1)|\psi\rangle, & \hat{\vec{L}}^2_{(2)}|\psi\rangle &= \hbar^2 l_2(l_2+1)|\psi\rangle, \\ \hat{L}_{(1)3}|\psi\rangle &= \hbar m_1|\psi\rangle, & \hat{L}_{(2)3}|\psi\rangle &= \hbar m_2|\psi\rangle. \end{aligned}$$

Na tomtéž podprostoru lze vybrat i jinou fyzikálně významnou množinu komutujících pozorovatelných. Podíváme se na operátor celkového momentu hybnosti $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{L}}_{(1)} + \hat{\vec{L}}_{(2)}$ a především kvadrát jeho velikosti

$$\begin{aligned} \hat{\vec{L}}^2 &= (\hat{\vec{L}}_{(1)} + \hat{\vec{L}}_{(2)})^2 = \hat{\vec{L}}^2_{(1)} + \hat{\vec{L}}^2_{(2)} + \hat{\vec{L}}_{(1)} \cdot \hat{\vec{L}}_{(2)} + \hat{\vec{L}}_{(2)} \cdot \hat{\vec{L}}_{(1)} = \\ &= \hat{\vec{L}}^2_{(1)} + \hat{\vec{L}}^2_{(2)} + 2\hat{\vec{L}}_{(1)} \cdot \hat{\vec{L}}_{(2)}, \end{aligned}$$

v němž dále užitím posunovacích operátorů upravíme výraz $\hat{\vec{L}}_{(1)} \cdot \hat{\vec{L}}_{(2)}$

$$\begin{aligned} \hat{\vec{L}}_{(1)} \cdot \hat{\vec{L}}_{(2)} &= \hat{L}_{(1)3}\hat{L}_{(2)3} + \frac{1}{4}(\hat{L}_{(1)+} + \hat{L}_{(1)-})(\hat{L}_{(2)+} + \hat{L}_{(2)-}) - \\ &- \frac{1}{4}(\hat{L}_{(1)+} - \hat{L}_{(1)-})(\hat{L}_{(2)+} - \hat{L}_{(2)-}) = \hat{L}_{(1)3}\hat{L}_{(2)3} + \frac{1}{2}(\hat{L}_{(1)+}\hat{L}_{(2)-} + \hat{L}_{(1)-}\hat{L}_{(2)+}). \end{aligned}$$

Hledané vyjádření operátoru $\hat{\vec{L}}^2$ je tedy

$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{\vec{L}}^2_{(1)} + \hat{\vec{L}}^2_{(2)} + 2\hat{L}_{(1)3}\hat{L}_{(2)3} + \hat{L}_{(1)+}\hat{L}_{(2)-} + \hat{L}_{(1)-}\hat{L}_{(2)+}. \tag{1.12}$$

Snadno ověříme, že celkový moment hybnosti $\hat{\vec{L}}$ vyhovuje prvnímu z požadavků (1.1). Druhý se nejsnáze ověří u složky $\hat{L}_3 (= \hat{L}_{(1)3} + \hat{L}_{(2)3})$, která s $\hat{\vec{L}}^2$ komutuje na základě (1.12) a vztahů (1.11) a (1.4). Ostatní složky $\hat{\vec{L}}$ komutují s $\hat{\vec{L}}^2$ v důsledku svobody volby směru třetí souřadnice. Pro celkový moment hybnosti a jeho odpovídající posunovací operátory $\hat{L}_\pm = \hat{L}_{(1)\pm} + \hat{L}_{(2)\pm}$ tedy platí všechny výsledky předchozí kapitoly.

$\hat{\vec{L}}^2_{(1)}$ a $\hat{\vec{L}}^2_{(2)}$ komutují se všemi členy součtu (1.12) a také s $\hat{L}_3$, čtveřice operátorů $\hat{\vec{L}}^2_{(1)}$, $\hat{\vec{L}}^2_{(2)}$, $\hat{\vec{L}}^2$, $\hat{L}_3$ tedy tvoří druhý systém vzájemně komutujících operátorů. Označme $|l_1, l_2; l, m\rangle$ jejich společný vlastní vektor splňující relace

$$\begin{aligned}
&\hat{\vec{L}}^2_{(1)}|l_1, l_2; l, m\rangle = \hbar^2 l_1(l_1+1)|l_1, l_2; l, m\rangle, \quad \hat{\vec{L}}^2_{(2)}|l_1, l_2; l, m\rangle = \hbar^2 l_2(l_2+1)|l_1, l_2; l, m\rangle,\\
&\hat{\vec{L}}^2|l_1, l_2; l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l_1, l_2; l, m\rangle, \qquad \hat{L}_3|l_1, l_2; l, m\rangle = \hbar m|l_1, l_2; l, m\rangle. \qquad (1.13)
\end{aligned}$$

Pro dané $l_1, l_2 \in \mathbb{N}_0$ tvoří $\{|l_1, m_1\rangle|l_2, m_2\rangle\}$ bázi $(2l_1+1)(2l_2+1)$-dimenzionálního podprostoru $\mathscr{H}_{l_1 l_2} \Subset \mathscr{H}$. Ukážeme, jakých hodnot mohou pro dané l_1, l_2 nabývat l, m ($\{|l_1, l_2; l, m\rangle\}$ tvoří též bázi $\mathscr{H}_{l_1 l_2}$) a jak lze najít transformaci převádějící jednu bázi na druhou. Začneme s vektorem $|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2\rangle$ (kde $m_1 = l_1$, $m_2 = l_2$). Využijeme rozpisu $\hat{\vec{L}}^2$ pomocí (1.12)

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{L}}^2|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2\rangle &= \Big(\hat{\vec{L}}^2_{(1)} + \hat{\vec{L}}^2_{(2)} + 2\hat{L}_{(1)3}\hat{L}_{(2)3} + \overbrace{\hat{L}_{(1)+}\hat{L}_{(2)-} + \hat{L}_{(1)-}\hat{L}_{(2)+}}^{\text{působením dává nulu kvůli } L_+}\Big)|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2\rangle =\\
&= \hbar^2\Big(l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1) + 2l_1 l_2\Big)|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2\rangle =\\
&= \hbar^2(l_1+l_2)(l_1+l_2+1)|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2\rangle,\\
\hat{L}_3|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2\rangle &= \hbar(l_1+l_2)|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2\rangle. \qquad (1.14)
\end{aligned}$$

Položme tedy

$$|l_1, l_2; l_1+l_2, l_1+l_2\rangle := |l_1, l_1\rangle|l_2, l_2\rangle. \qquad (1.15)$$

Na tuto rovnost budeme aplikovat operátor $\hat{L}_- = \hat{L}_{(1)-} + \hat{L}_{(2)-}$. Ve výpočtu použijeme koeficient $\alpha^{(-)}(l, m)$ definovaný v (1.10). Ze dvou ekvivalentních vyjádření odvodíme

$$\begin{aligned}
&\hat{L}_-|l_1, l_2; l_1+l_2, l_1+l_2\rangle = \alpha^{(-)}(l_1+l_2, l_1+l_2)|l_1, l_2; l_1+l_2, l_1+l_2-1\rangle,\\
&\hat{L}_-|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2\rangle = \alpha^{(-)}(l_1, l_1)|l_1, l_1-1\rangle|l_2, l_2\rangle + \alpha^{(-)}(l_2, l_2)|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2-1\rangle,
\end{aligned}$$

odkud dosazením za $\alpha^{(-)}(l, m)$ a porovnáním pravých stran získáváme

$$|l_1, l_2; l_1+l_2, l_1+l_2-1\rangle = \sqrt{\frac{l_1}{l_1+l_2}}|l_1, l_1-1\rangle|l_2, l_2\rangle + \sqrt{\frac{l_2}{l_1+l_2}}|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2-1\rangle. \qquad (1.16)$$

Snadno můžeme vytvořit vektor ortogonální k vektoru (1.16) v rámci lineárního obalu $|l_1, l_1-1\rangle|l_2, l_2\rangle$ a $|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2-1\rangle$: až na volbu fáze se nabízí jediné řešení,

$$-\sqrt{\frac{l_2}{l_1+l_2}}|l_1, l_1-1\rangle|l_2, l_2\rangle + \sqrt{\frac{l_1}{l_1+l_2}}|l_1, l_1\rangle|l_2, l_2-1\rangle,$$

jemuž by měl odpovídat jiný vektor z druhé báze $\{|l_1,l_2;l,m\rangle\}$, pro který musí platit $m = l_1 + l_2 - 1$ a $m \in \{-l,\dots,l\}$. To však může splnit jediná hodnota $l = l_1 + l_2 - 1$, tedy

$$|l_1,l_2,l_1+l_2-1,l_1+l_2-1\rangle := -\sqrt{\frac{l_2}{l_1+l_2}}|l_1,l_1-1\rangle|l_2,l_2\rangle + \sqrt{\frac{l_1}{l_1+l_2}}|l_1,l_1\rangle|l_2,l_2-1\rangle. \tag{1.17}$$

Zvolená hodnota fáze (a tedy i znaménka) vychází opět z Condon–Shortleyho znaménkové konvence, v níž platí

$$\left(\langle l_1,l_1|\langle l_2,l_2-1|\right)|l_1,l_2,l_1+l_2-1,l_1+l_2-1\rangle > 0.$$

Opětovnou aplikací operátoru $\hat{L}_-$ na obě strany rovností (1.16) a (1.17) dostáváme na levé straně vektory $|l_1,l_2;l_1+l_2,l_1+l_2-2\rangle$, $|l_1,l_2;l_1+l_2-1,l_1+l_2-2\rangle$ a na pravých stranách lineární kombinace vektorů

$$|l_1,l_1-2\rangle|l_2,l_2\rangle, \quad |l_1,l_1-1\rangle|l_2,l_2-1\rangle, \quad |l_1,l_1\rangle|l_2,l_2-2\rangle,$$

k nimž je možno opět vytvořit vektor třetí způsobem, že vzniklá trojice vektorů je vzájemně ortogonální. Tyto vektory budou v bázi $\{|l_1,l_2;l,m\rangle\}$ reprezentovat vektory

$$|l_1,l_2;l_1+l_2,l_1+l_2-2\rangle, \quad |l_1,l_2;l_1+l_2-1,l_1+l_2-2\rangle, \quad |l_1,l_2;l_1+l_2-2,l_1+l_2-2\rangle,$$

čímž získáme vyjádření pro $|l_1,l_2;l_1+l_2-2,l_1+l_2-2\rangle$. Fázi volíme opět v rámci Condon–Shortleyho znaménkové konvence tak, aby platilo

$$\langle l_1,l_1|\langle l_2,l_2-n|l_1,l_2;l_1+l_2-n,l_1+l_2-n\rangle > 0.$$

Operátor $\hat{L}_-$ takto nadále aplikujeme na každý získaný vektor pro posouvání m až do odpovídající meze $-l$ a dosud jsme v každém kroku také získali nový vektor $|l_1,l_2;l_1+l_2-n,l_1+l_2-n\rangle$. Druhý fakt ale vycházel ze skutečnosti, že vektory $|l_1,l_1-n\rangle|l_2,l_2\rangle,\dots,|l_1,l_1\rangle|l_2,l_2-n\rangle$ definují $(n+1)$-rozměrný podprostor. To je pravda pouze, dokud $l_1 - n \geq -l_1$ a současně $l_2 - n \geq l_2$, tedy $n \leq N = 2\min\{l_1,l_2\}$. Jakmile použijeme tuto konstrukci N-krát, pokryjeme nově tvořenou bází celý prostor díky shodě dimenzí

$$\sum_{n=0}^{N}(2(l_1+l_2-n)+1) = \sum_{k=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2}(2k+1) = (2l_1+1)(2l_2+1).$$

Po N iteracích tedy pokryjeme celý prostor $\mathscr{H}_{l_1l_2}$ a žádné další ortogonální vektory nezbudou. Vektory $|l_1,l_2;l,m\rangle$ pro

$$l = l_1+l_2, l_1+l_2-1,\dots,|l_1-l_2|, \quad m \in \{-l,-l+1,\dots,l-1,l\}$$

tedy tvoří ortogonální bázi prostoru $\mathscr{H}_{l_1 l_2}$, která souvisí s bází tvořenou vektory $|l_1, m_1\rangle|l_2, m_2\rangle$ unitární transformací

$$|l_1, l_2; l, m\rangle = \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} \underbrace{(l_1, l_2, m_1, m_2|l, m)}_{\text{CG koeficienty}} |l_1, m_1\rangle|l_2, m_2\rangle \tag{1.18}$$

Koeficienty lineární kombinace se nazývají **Clebsch–Gordanovy (CG) koeficienty** a budeme pro ně užívat výše zavedené značení. Z (1.15), (1.16) a (1.17) můžeme hned psát hodnoty pěti CG koeficientů.

$$(l_1, l_2, l_1, l_2|l_1 + l_2, l_1 + l_2) = 1 \tag{1.19a}$$

$$(l_1, l_2, l_1 - 1, l_2|l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1) = \sqrt{\frac{l_1}{l_1 + l_2}} \tag{1.19b}$$

$$(l_1, l_2, l_1, l_2 - 1|l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1) = \sqrt{\frac{l_2}{l_1 + l_2}} \tag{1.19c}$$

$$(l_1, l_2, l_1 - 1, l_2|l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1) = -\sqrt{\frac{l_2}{l_1 + l_2}} \tag{1.19d}$$

$$(l_1, l_2, l_1, l_2 - 1|l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1) = +\sqrt{\frac{l_1}{l_1 + l_2}}. \tag{1.19e}$$

Díky unitaritě navíc jednoduše najdeme i inverzní transformaci (1.18) ve tvaru

$$|l_1, m_1\rangle|l_2, m_2\rangle = \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sum_{m=-l}^{l} (l_1, l_2, m_1, m_2|l, m)^* |l_1, l_2; l, m\rangle. \tag{1.20}$$

Je dobré si uvědomit obecné vlastnosti CG koeficientů plynoucí z konstrukce a z rovnic (1.18) a (1.20):

1. CG koeficienty lze vybrat reálné,

2. $(l_1, l_2, m_1, m_2|l, m) = 0 \quad \text{pokud} \quad (m \neq m_1 + m_2) \vee (l \notin \{|l_1 - l_2|, \ldots, l_1 + l_2\})$,

3. $\sum_{m_1, m_2} (l_1, l_2, m_1, m_2|l, m)(l_1, l_2, m_1, m_2|\tilde{l}, \tilde{m}) =$

$$= \begin{cases} \delta_{l\tilde{l}}\delta_{m\tilde{m}} & \text{pro } l, \tilde{l} \in \{|l_1 - l_2|, \ldots, l_1 + l_2\}, \\ 0 & \text{jinak,} \end{cases}$$

4. $\sum_{l,m} (l_1, l_2, m_1, m_2|l, m)(l_1, l_2, \tilde{m}_1, \tilde{m}_2|l, m) = \delta_{m_1\tilde{m}_1}\delta_{m_2\tilde{m}_2}$,

5. $\alpha^{(\mp)}(l,m)(l_1,l_2,m_1,m_2|l,m\mp 1) = \alpha^{(\pm)}(l_1,m_1\pm 1)(l_1,l_2,m_1\pm 1,m_2|l,m) + \\ + \alpha^{(\pm)}(l_2,m_2\pm 1)(l_1,l_2,m_1,m_2\pm 1|l,m).$

V literatuře je možno kromě CG koeficientů najít v ekvivalentní roli i **Wignerovy** $3j$**-symboly**, jejich výhodou je větší symetrie při rozkladech. Mezi CG koeficienty a Wignerovými $3j$-symboly existuje převodní vzorec

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{(2j_3+1)^{1/2}}(j_1,j_2,m_1,m_2|j_3,-m_3). \tag{1.21}$$

V dalším výkladu však budeme pracovat výhradně s CG koeficienty.

Příklad. Pro pevně dané $l_1 = l_2 = \frac{1}{2}$ napočítejte všechny nenulové CG koeficienty.

Hodnoty m_1, m_2, m, l musí splňovat podmínky

$$l \in \{|l_1-l_2|,\dots,l_1+l_2\} = \{0;1\}\,, \quad m \in \{-l,\dots,l\} = \{-1;0;1\}$$
$$m_1 \in \{-l_1,\dots,l_1\} = \left\{-\frac{1}{2};\frac{1}{2}\right\}, \quad m_2 \in \left\{-\frac{1}{2};\frac{1}{2}\right\}, \quad m = m_1+m_2.$$

Tyto podmínky určují, jaké CG koeficienty má smysl počítat. Následující CG koeficienty $(l_1,l_2,m_1,m_2|l,m)$ můžeme určit přímo užitím (1.19a)–(1.19c)

$$(\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|1,1) = 1 \tag{1.22a}$$

$$(\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|1,0) = \sqrt{\frac{\frac{1}{2}}{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{1.22b}$$

$$(\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|1,0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{1.22c}$$

Stejným způsobem užitím (1.19d),(1.19e)

$$(\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|0,0) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$
$$(\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|0,0) = +\frac{1}{\sqrt{2}}$$

Zbývá určit koeficient $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|1,-1)$. Z již určených CG koeficientů (1.22b), (1.22c) plyne rozklad

$$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2};1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle,$$

na jehož obě strany aplikujeme operátor $\hat{L}_-$

$$\hat{L}_-|\frac{1}{2},\frac{1}{2};1,0\rangle = \alpha^{(-)}(1,0)|\frac{1}{2},\frac{1}{2};1,-1\rangle$$
$$\hat{L}_-(\frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle) =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle\alpha^{(-)}(\frac{1}{2},\frac{1}{2})|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\alpha^{(-)}(\frac{1}{2},\frac{1}{2})|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$$

odkud dosazením $\alpha^{(-)}(1,0) = \sqrt{2}\hbar$; $\alpha^{(-)}(\frac{1}{2},\frac{1}{2}) = \hbar$ a porovnáním pravých stran dostáváme

$$|\frac{1}{2},\frac{1}{2};1,-1\rangle = |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle.$$

Z posledního řádku plyne (přímo z definice CG koeficientů (1.18)) hodnota posledního neurčeného CG

$$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|1,-1) = 1$$

Uvedený postup sloužil pouze pro ilustraci metodiky, jež je třeba nasadit na výpočet CG koeficientů pro vyšší hodnoty l_1, l_2 – to si na cvičení bohatě užijete. Tabulku a vlastnosti CG koeficientů lze najít ve Formánkovi [2], kam se doporučujeme podívat.

2 Tenzorové operátory, Wigner–Eckartův teorém

Definice 2.1. Mějme ÚMP tvořenou $\hat{A}, \hat{L}^2, \hat{L}_3$ a jí příslušné vlastní vektory $|a,l,m\rangle$ splňující relace

$$\begin{aligned}\hat{L}_\pm|a,l,m\rangle &= \alpha^{(\pm)}(l,m)|a,l,m\pm1\rangle,\\ \hat{L}_3|a,l,m\rangle &= \hbar m|a,l,m\rangle.\end{aligned} \tag{2.1}$$

Pak definujeme

$$\vec{L}^{(l)}_{m_1m_2} = \langle a,l,m_1|\vec{L}|a,l,m_2\rangle, \tag{2.2}$$

tedy

$$\vec{L}|a,l,m_2\rangle = \sum_{m_1}\vec{L}^{(l)}_{m_1m_2}|a,l,m_1\rangle.$$

Jedná se pouze o jiný, stručnější, zápis relací (2.1) v kartézských složkách $\vec{L}$ namísto tzv. sférických složek $\{L_+, L_-, L_3\}$; hodnoty $\vec{L}^{(l)}_{m_1m_2}$ souvisejí s $\alpha^{(\pm)}(l,m_2)$ triviálními vztahy plynoucími z převodních rovnic

$$\vec{L} = \left(\frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}, \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i}, \hat{L}_3\right).$$

Důležitější je si povšimnout, že $\vec{L}^{(l)}_{m_1m_2}$ nezávisí na a, a tedy ani na volbě radiální pozorovatelné $\hat{A}$, a že aplikace $\hat{\vec{L}}$ nemění hodnotu l.

Věta 2.2. Mějme 2 posloupnosti vektorů $(|a,l_1,m_1\rangle)_{m_1=-l_1}^{l_1}$ a $(|b,l_2,m_2\rangle)_{m_2=-l_2}^{l_2}$ takových, že

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}|a,l_1,m_1\rangle &= \sum_{m'=-l_1}^{l_1}\vec{L}^{(l_1)}_{m'm_1}|a,l_1,m'\rangle,\\ \hat{\vec{L}}|b,l_2,m_2\rangle &= \sum_{m'=-l_2}^{l_2}\vec{L}^{(l_2)}_{m'm_2}|b,l_2,m'\rangle.\end{aligned}$$

Potom platí:

$$\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle = \delta_{l_1l_2}\delta_{m_1m_2}F(l_1,a,b), \tag{2.3}$$

kde F je neznámá funkce proměnných l_1, a, b (měli bychom si povšimnout především nezávislosti pravé strany rovnosti (2.3) na konkrétních hodnotách m_1, m_2).

Důkaz. Předpoklady věty, přeformulované zpět v jazyce posunovacích operátorů a L_3, je možné zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned}\hat{L}_\pm|a,l_1,m_1\rangle &= \alpha^{(\pm)}(l_1,m_1)|a,l_1,m_1\pm1\rangle,\\ \hat{L}_\pm|b,l_2,m_2\rangle &= \alpha^{(\pm)}(l_2,m_2)|b,l_2,m_2\pm1\rangle,\\ \hat{L}_3|a,l_1,m_1\rangle &= \hbar m_1|a,l_1,m_1\rangle,\\ \hat{L}_3|b,l_2,m_2\rangle &= \hbar m_2|b,l_2,m_2\rangle.\end{aligned} \tag{2.4}$$

Pomocí rozkladu (1.5) lze též odvodit, i když se předpoklady o $\hat{\vec{L}}^2$ výslovně nezmiňují,

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}^2|a,l_1,m_1\rangle &= (\hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_3^2 + \hbar\hat{L}_3)|a,l_1,m_1\rangle = \\ &= \alpha^{(-)}(l_1,m+1)\alpha^{(+)}(l_1,m)|a,l_1,m_1\rangle + \hbar^2m^2|a,l_1,m_1\rangle + \hbar^2m|a,l_1,m_1\rangle = \\ &= \hbar^2 l_1(l_1+1)|a,l_1,m_1\rangle\end{aligned} \tag{2.5a}$$

a podobně

$$\hat{\vec{L}}^2|b,l_2,m_2\rangle = \hbar^2 l_2(l_2+1)|b,l_2,m_2\rangle. \tag{2.5b}$$

Zkoumejme výraz $\langle a,l_1,m_1|\hat{L}_3|b,l_2,m_2\rangle$. Operátor můžeme nechat působit na ket nebo na bra, na tom výsledek nemůže záviset. Pomocí (2.4) tak dostáváme rovnost

$$\hbar m_2\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle = \hbar m_1\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle,$$

z níž plyne, že skalární součin $\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle$ může být nenulový pouze tehdy, kdy $m_1 = m_2$.

Podobně pomocí výrazu $\langle a,l_1,m_1|\hat{\vec{L}}^2|b,l_2,m_2\rangle$ a připravených rovností (2.5) získáváme, že $\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle$ je nutně roven 0 v případech $l_1 \neq l_2$. Odsud již je skalární součin vymezen na tvar

$$\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle = \delta_{l_1l_2}\delta_{m_1m_2}X, \tag{2.6}$$

kde X může záviset již jen na a, b a společných hodnotách l, m.

Pro tvrzení věty zbývá dokázat, že závislost X na $m_{1,2}$ musí být konstantní. Za tímto účelem využijeme ještě potřetí vyjádření (1.5) a, tentokrát již za předpokladů $l_1 = l_2$ a $m_1 = m_2$, vypočítáme zvlášť člen

$$\begin{aligned}\langle a,l,m|\hat{L}_-\hat{L}_+|b,l,m\rangle &= \langle a,l,m|(\hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 - \hbar\hat{L}_3)|b,l,m\rangle = \\ &= \hbar^2(l(l+1) - m(m+1))\langle a,l,m|b,l,m\rangle.\end{aligned}$$

Zbývající dosud nevyzkoušená kombinace při výpočtu téhož členu je nechat působit $\hat{L}_+$ na ket a $\hat{L}_-$ na bra. Pro účinek na bra nezapomeneme, že $(\hat{L}_-)^\dagger = \hat{L}_+$, takže ve výsledku se dvakrát objeví $\alpha^{(+)}(l,m)$:

$$\begin{aligned}\langle a,l,m|\hat{L}_-\hat{L}_+|b,l,m\rangle &= \left(\hat{L}_+|a,l,m\rangle\right)^\dagger\left(\hat{L}_+|b,l,m\rangle\right) = \\ &= \left(\alpha^{(+)}(l,m)\right)^2\langle a,l,m+1|b,l,m+1\rangle = \\ &= \hbar^2(l(l+1) - m(m+1))\langle a,l,m+1|b,l,m+1\rangle.\end{aligned}$$

Porovnáním obou výsledků je zřejmé, že pro všechna m, $-l \leq m < l$

$$\langle a,l,m|b,l,m\rangle = \langle a,l,m+1|b,l,m+1\rangle$$

a tedy, že veličina X v (2.6) nezávisí na m a lze ji psát jako $F(l,a,b)$, jak tvrdí věta. □

Porozumění operátoru momentu hybnosti umožní klasifikovat tenzorové operátory. Z klasické fyziky totiž víme, že tenzorový (či skalární, vektorový) charakter veličin je dán jejich vlastnostmi při transformacích prostoru. V eukleidovských prostorech je postačující uvažovat rotace. Transformace při rotacích jsou v klasické teoretické fyzice svázány s Poissonovými závorkami se složkami momentu hybnosti, jakožto generátorů grupy rotací. Ve fyzice kvantové tedy budeme analogicky očekávat definici tenzorového operátoru založenou na komutátorech s operátory složek momentu hybnosti. Tak je motivována následující definice:

Definice 2.3. Ireducibilní tenzorový operátor k-tého řádu $\hat{\mathbb{T}}(k)$ je soubor $(2k+1)$ operátorů $(\hat{T}(k,q))_{q=-k}^{k}$ takových, že

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}_3, \hat{T}(k,q)\right] &= \hbar q \hat{T}(k,q),\\ \left[\hat{L}_\pm, \hat{T}(k,q)\right] &= \alpha^{(\pm)}(k,q)\hat{T}(k,q\pm 1).\end{aligned} \tag{2.7}$$

Poznámka. Podmínky (2.7) lze ekvivalentně zapsat užitím definice 2.1

$$\left[\hat{\vec{L}}, \hat{T}(k,q)\right] = \sum_{q'=-k}^{k} \vec{L}^{(k)}_{q'q}\hat{T}(k,q'). \tag{2.8}$$

Často budeme potřebovat počítat maticový element operátoru $\hat{T}(k,q)$ v bázích $|a,l_1,m_1\rangle$, $|b,l_2,m_2\rangle$ – $\langle a,l_1,m_1|\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle$ – pro různá m_1, m_2. V dalším využijeme vlastností $\hat{\vec{L}}$ ke zjednodušení výpočtů výrazů tohoto typu.

Mějme dvě ÚMP $(\hat{A},\hat{L}^2,\hat{L}_3)$, $(\hat{B},\hat{L}^2,\hat{L}_3)$ a vlastní vektory $|a,l_1,m_1\rangle$, $|b,l_2,m_2\rangle$ vyhovující podmínkám

$$\begin{aligned}\hat{A}|a,l_1,m_1\rangle &= a|a,l_1,m_1\rangle, & \hat{B}|b,l_2,m_2\rangle &= b|b,l_2,m_2\rangle,\\ \hat{L}^2|a,l_1,m_1\rangle &= \hbar^2 l_1(l_1+1)|a,l_1,m_1\rangle, & \hat{L}^2|b,l_2,m_2\rangle &= \hbar^2 l_2(l_2+1)|b,l_2,m_2\rangle,\\ \hat{L}_3|a,l_1,m_1\rangle &= \hbar m_1|a,l_1,m_1\rangle, & \hat{L}_3|b,l_2,m_2\rangle &= \hbar m_2|b,l_2,m_2\rangle.\end{aligned}$$

Uvažujme pevně zvolené a,b,l_1,l_2. Tím pádem $m_1 \in \{-l_1,\dots,l_1\}$, $m_2 \in \{-l_2,\dots,l_2\}$. Rovněž mějme definovánu složku ireducibilního tenzorového operátoru $\hat{T}(k,q)$. Upravme vektor $\hat{\vec{L}}\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle &= \left(\left[\hat{\vec{L}},\hat{T}(k,q)\right] + \hat{T}(k,q)\hat{\vec{L}}\right)|b,l_2,m_2\rangle =\\ &= \sum_{q'=-k}^{k}\vec{L}^{(k)}_{q'q}\left(\hat{T}(k,q')|b,l_2,m_2\rangle\right) + \sum_{m'=-l_2}^{l_2}\vec{L}^{(l)}_{m'm_2}\left(\hat{T}(k,q)|b,l_2,m'\rangle\right).\end{aligned} \tag{2.9}$$

Při úpravě bylo užito věty 2.2 a poznámky u definice 2.3 (rovnost (2.8)). Zavedeme-li označení[3]

$$|k,q,b,l_2,m_2\rangle = \hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle,$$

[3]Pozor, nejedná se nutně o normalizované ani o vzájemně ortogonální vektory.

potom stavy $|k,q,b,l_2,m_2\rangle$ se z hlediska komutačních relací s $\hat{\vec{L}}$ chovají stejně jako stavy $|k,q\rangle|l,m\rangle$ v úloze skládání dvou momentů hybnosti, neboť

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}|k,q\rangle|l,m\rangle &= \left(\hat{\vec{L}}_{(1)}|k,q\rangle\right)|l,m\rangle + |k,q\rangle\left(\hat{\vec{L}}_{(2)}|l,m\rangle\right) = \\ &= \sum_{q'=-k}^{k} \vec{L}^{(k)}_{q'q}|k,q'\rangle|l,m\rangle + \sum_{m'=-l}^{l} \vec{L}^{(l)}_{m'm}|k,q\rangle|l,m'\rangle,\end{aligned} \tag{2.10}$$

kde bylo rovněž použito rovnosti (2.8). Vidíme, že výrazy (2.9) a (2.10) jsou formálně stejné.

Díky této shodě můžeme zadefinovat vlastní vektory „složeného“ momentu hybnosti

$$|z(b,k,l_2);l,m\rangle := \sum_{m_2=-l_2}^{l_2}\sum_{q=-k}^{k}(k,l_2,q,m_2|l,m)\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle, \tag{2.11}$$

uvozovky proto, že na místě složeného momentu vystupuje opět $\hat{\vec{L}}$:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2|z(b,k,l_2);l,m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|z(b,k,l_2);l,m\rangle,\\ \hat{L}_3|z(b,k,l_2);l,m\rangle &= \hbar m|z(b,k,l_2);l,m\rangle.\end{aligned}$$

Veličina z je blíže neurčená, je důležité se v ní nesnažit identifikovat vlastní číslo operátorů $\hat{A}$ ani $\hat{B}$. Je však jednoznačně určena původními hodnotami b,k,l_2.

Inverzní transformace k (2.11) zní

$$\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle = \sum_{l=|k-l_2|}^{k+l_2}\sum_{m=-l}^{l}(k,l_2,q,m_2|l,m)\,|z(b,k,l_2);l,m\rangle.$$

Vraťme se zpět k maticovému elementu a dosaďme do něj z předchozí rovnosti

$$\langle a,l_1,m_1|\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle = \langle a,l_1,m_1|\left(\sum_{l=|k-l_2|}^{k+l_2}\sum_{m=-l}^{l}(k,l_2,q,m_2|l,m)\,|z(b,k,l_2);l,m\rangle\right),$$

přičemž na základě ortogonality vlastních vektorů $\hat{L}^2$, $\hat{L}_3$ je zřejmé, že jediný nenulový člen v celém výrazu je člen pro $l=l_1$, $m=m_1$, tedy

$$\langle a,l_1,m_1|\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle = (k,l_2,q,m_2|l_1,m_1)\,\langle a,l_1,m_1|z(b,k,l_2);l_1,m_1\rangle,$$

navíc na základě věty 2.2 víme, že braket na pravé straně nezávisí na hodnotě m_1 – je pouze funkcí a, l_1 a z, kde z v sobě zahrnuje b, k a l_2. Celkově tedy

$$\langle a,l_1,m_1|\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle = (k,l_2,q,m_2|l_1,m_1)\,F(a,b,k,l_1,l_2). \tag{2.12}$$

Rovnost (2.12) je matematickým vyjádřením **Wigner–Eckartova teorému**, který nám usnadňuje určování maticových elementů. Známe-li totiž $\langle a,l_1,m_1|\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle$ pro

jednu hodnotu q, m_1, m_2, při které je CG koeficient nenulový, známe ho díky Wigner–Eckartovu teorému (2.12) i pro libovolné jiné hodnoty stejných veličin, tj. místo $(2l_1+1)(2l_2+1)(2k+1)$ výpočtů stačí provést jediný! Za povšimnutí obzvláště stojí, že současně získáme „zadarmo" maticové elementy *různých* pozorovatelných $T(k,-k),\ldots,T(k,+k)$.

Povšimněme si CG koeficientu vystupujícího na pravé straně (2.12). Odpovídá skládání momentů hybnosti (l_2, m_2) (ket levé strany) s (k, q) (operátor) za získání (l_1, m_1) (bra levé strany). Tenzorový operátor se tedy při aplikaci na vlastní stav hybnosti chová, jako kdyby k němu přičetl další moment hybnosti, kde k hraje roli vedlejšího a q magnetického kvantového čísla. Například pro nenulovost maticového elementu musí čísla l_1, l_2, k splňovat trojúhelníkovou nerovnost. Další okamžitý výsledek je, že pro $q \neq 0$ je $\langle a, l, m|\hat{T}(k,q)|b, l, m\rangle$ nutně rovno 0.

Obvyklý způsob zápisu Wigner–Eckartova teorému využívá Wignerovy $3j$-symboly, jejichž vztah k CG koeficientům popisuje rovnost (1.21). Platí

$$\begin{aligned}\langle a, l_1, m_1|\hat{T}(k,q)|b, l_2, m_2\rangle &= (-1)^{l_1-m_1}\begin{pmatrix} l_1 & k & l_2 \\ -m_1 & q & m_2\end{pmatrix}(a, l_1 \left\|\hat{\mathbb{T}}(k)\right\| b, l_2) = \\ &= (-1)^{l_1+k-l_2}\frac{(k, l_2, q, m_2|l_1, m_1)}{(2l_1+1)^{1/2}}(a, l_1 \left\|\hat{\mathbb{T}}(k)\right\| b, l_2), \qquad (2.13)\end{aligned}$$

kde $(a, l_1 \left\|\hat{\mathbb{T}}(k)\right\| b, l_2)$ se nazývá **redukovaný maticový element** a je určen levou stranou pro jednu hodnotu q, m_1, m_2 takovou, že $\begin{pmatrix} l_1 & k & l_2 \\ -m_1 & q & m_2\end{pmatrix} \neq 0$. Redukovaný maticový element nemá přímý fyzikální význam.

Podívejme se nyní na nejjednodušší příklady tenzorových operátorů.

(I) **Skalární operátor**, tj. ireducibilní tenzorový operátor nultého řádu. Podle (2.7) musí skalární operátor $\hat{\mathbb{T}}(0) \equiv (\hat{T}(0,0))$ splňovat

$$\left[\hat{L}_3, \hat{T}(0,0)\right] = 0, \quad \left[\hat{L}_\pm, \hat{T}(0,0)\right] = 0,$$

tedy i $\left[\hat{L}_{1,2}, \hat{T}(0,0)\right] = 0$. Tyto podmínky jinými slovy říkají, že $T(0,0)$ je invariantní vůči rotaci. Skalární operátor má jeden nenulový maticový element pro $l_2, m_2 = \text{const}$, neboť dle (2.12) je

$$\langle a, l_1, m_1|\hat{T}(0,0)|b, l_2, m_2\rangle = (0, l_2, 0, m_2|l_1, m_1)F(a, b, l_1, l_2)$$

a CG koeficient na pravé straně je nenulový jedině v případě $l_1 = l_2, m_1 = m_2$. Maticový element $\langle a, l, m|\hat{T}(0,0)|b, l, m\rangle$ bude pouze funkcí a, b, l. V tomto ohledu je i tvrzení věty 2.2 zvláštním případem W–E teorému pro jednotkový operátor $\mathbb{1}$, který splňuje požadavky kladené na $\hat{T}(0,0)$.

(II) **Vektorový operátor**. Kartézské souřadnice vektorového operátoru $\hat{\vec{V}} = (\hat{V}_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3)$ vyhovují komutačním relacím

$$\left[\hat{L}_j, \hat{V}_k\right] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{V}_l \qquad (2.14)$$

a vzájemně si jednoznačně odpovídají s ireducibilním tenzorovým operátorem prvního řádu $\hat{\mathbb{T}}(1) = (\hat{T}(1,1), \hat{T}(1,0), \hat{T}(1,-1))$ transformací

$$\hat{T}(1,1) = -\frac{\hat{V}_1 + i\hat{V}_2}{\sqrt{2}}, \quad \hat{T}(1,0) = \hat{V}_3, \quad \hat{T}(1,-1) = \frac{\hat{V}_1 - i\hat{V}_2}{\sqrt{2}}. \tag{2.15}$$

Příkladem vektorového operátoru jsou nám již známé operátory $\hat{\vec{X}}, \hat{\vec{P}}, \hat{\vec{L}}$. Například $\hat{\vec{L}}$ vzájemně odpovídá ireducibilnímu tenzorovému operátoru

$$\hat{\mathbb{T}}(1) = \Big(\hat{T}(1,1), \hat{T}(1,0), \hat{T}(1,-1)\Big) = \left(\frac{-1}{\sqrt{2}}\hat{L}_+, \hat{L}_3, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{L}_-\right),$$

neboť jsou splněny podmínky (2.7)

$$\big[\hat{L}_3, \hat{T}(1,m)\big] = m\hat{T}(1,m), \quad \big[\hat{L}_\pm, \hat{T}(1,m)\big] = \alpha^{(\pm)}(1,m)\hat{T}(1,m\pm 1),$$

pro všechna $m \in \{-1,0,1\}$.

Příklad. Mějme definován vektorový operátor $\hat{\vec{V}}$ a ireducibilní tenzorový operátor prvního řádu $\hat{\mathbb{T}}(1)$ definován dle (2.15). Pokusíme se najít střední hodnotu první a druhé složky operátoru $\hat{\vec{V}}$ ve stavu popsaném vektorem $|\beta, l, m\rangle$ (hledáme tedy hodnoty součinů $\langle\beta, l, m|\hat{V}_{1,2}|\beta, l, m\rangle$). Platí

$$\hat{V}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\hat{T}(1,-1) - \hat{T}(1,1)\Big), \quad \hat{V}_2 = \frac{i}{\sqrt{2}}\Big(\hat{T}(1,-1) + \hat{T}(1,1)\Big).$$

Potřebujeme zjistit, jak vypadají hodnoty maticových elementů

$$\langle\beta, l, m|\hat{T}(1,\pm 1)|\beta, l, m\rangle,$$

neboť střední hodnoty $\hat{V}_1, \hat{V}_2$ jsou jejich lineární kombinací. Podle Wigner–Eckartova teorému (2.12) platí

$$\langle\beta, l, m|\hat{T}(1,\pm 1)|\beta, l, m\rangle = (1, l, \pm 1, m|l, m)\langle\beta, l, m|z(\beta, l), l, m\rangle.$$

Jelikož CG koeficienty na pravé straně jsou rovny nule (je porušeno pravidlo součtu m), jsou nulové rovněž hledané střední hodnoty operátorů $\hat{V}_1, \hat{V}_2$.

Pro další příklady bude užitečné následující tvrzení.

Věta 2.4. Mějme dánu ÚMP $(\hat{A}, \hat{L}^2, \hat{L}_3)$ a k ní příslušející bázi vlastních vektorů $(|a, l, m\rangle)$. Dále mějme dán vektorový operátor $\hat{\vec{V}}$. Potom pro $l \neq 0$ platí

$$\langle a, l, m'|\hat{\vec{V}}|a, l, m\rangle = \langle a, l, m'|\frac{\hat{\vec{L}} \cdot (\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{V}})}{\hat{L}^2}|a, l, m\rangle. \tag{2.16}$$

Důkaz. Poznamenejme, že inverze operátoru $\hat{L}^2$ se nejsnáze definuje pomocí spektrálního rozkladu: na vektor $|a,l,m\rangle$ působí dle vztahu

$$\frac{1}{\hat{L}^2}|a,l,m\rangle = \frac{1}{\hbar^2 l(l+1)}|a,l,m\rangle.$$

Podívejme se, zdali spolu nekomutují operátory $\hat{\vec{L}}$ a $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}}$

$$\left[\hat{L}_j, \hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}}\right] = \hat{L}_i\left[\hat{L}_j,\hat{V}_i\right] + \left[\hat{L}_j,\hat{L}_i\right]\hat{V}_i.$$

Výraz upravíme dále užitím komutačních relací vektorových operátorů (2.14)

$$\hat{L}_i\left[\hat{L}_j,\hat{V}_i\right] + \left[\hat{L}_j,\hat{L}_i\right]\hat{V}_i = \hat{L}_i i\hbar\epsilon_{jik}\hat{V}_k + i\hbar\epsilon_{jik}\hat{L}_k\hat{V}_i = i\hbar\epsilon_{jik}(\hat{L}_i\hat{V}_k + \hat{L}_k\hat{V}_i) = 0.$$

Odsud plyne, že $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}}$ je skalární operátor, totéž platí i pro $\hat{L}^2$ a potažmo jeho inverzi. Z vlastností komutátorů na součinu (1.2) pak rychle plyne, že $\frac{\hat{\vec{L}}\cdot(\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}})}{\hat{L}^2}$ je vektorový operátor. Na základě Wigner–Eckartova teorému (2.12) stačí rovnost (2.16) dokázat pro konkrétní složku $\hat{\vec{V}}$ a pro konkrétní hodnoty m', m, pro něž CG koeficient $(1,l,q,m|l,m') \neq 0$. Zvolíme $q=0$, $m=m'=l$. Díky volbě $q=0$ víme, že na místě $\hat{\vec{V}}$ na levé straně rovnosti (2.16) můžeme očekávat $\hat{V}_3$. Začneme s úpravou pravé strany. Nejprve využijeme dokázané komutační relace

$$\langle a,l,l|\frac{\hat{L}_3\cdot(\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}})}{\hat{L}^2}|a,l,l\rangle = \frac{\hbar l}{\hbar^2 l(l+1)}\langle a,l,l|(\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}})|a,l,l\rangle,$$

kde dále skalární součin operátorů $(\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}})$ roznásobíme a komponenty impulsmomentu vyjádříme pomocí posunovacích operátorů $\hat{L}_\pm$

$$\frac{1}{\hbar(l+1)}\langle a,l,l|\left(\hat{L}_3\hat{V}_3 + \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)\hat{V}_1 + \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-)\hat{V}_2\right)|a,l,l\rangle.$$

Operátor $\hat{L}_-$ necháme působit na bra $\langle a,l,l|$ (což dá nulu). Využijeme komutace operátorů $\left[\hat{L}_3,\hat{V}_3\right]$, operátor $\hat{L}_3$ necháme působit a celý výraz roztrhneme na dvě části

$$\frac{l}{l+1}\langle a,l,l|\hat{V}_3|a,l,l\rangle + \frac{1}{2\hbar(l+1)}\langle a,l,l|\hat{L}_+(\hat{V}_1 - i\hat{V}_2)|a,l,l\rangle$$

a výraz $\hat{V}_1 - i\hat{V}_2$ převedeme na složky tenzorového operátoru užitím (2.15): $\hat{V}_1 - i\hat{V}_2 = \sqrt{2}\hat{V}(1,-1)$. Zpětným dosazením potom dostáváme

$$\frac{l}{l+1}\langle a,l,l|\hat{V}_3|a,l,l\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}\hbar(l+1)}\langle a,l,l|\hat{L}_+\hat{V}(1,-1)|a,l,l\rangle =$$

$$= \frac{l}{l+1}\langle a,l,l|\hat{V}_3|a,l,l\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}\hbar(l+1)}\langle a,l,l|\left[\hat{L}_+,\hat{V}(1,-1)\right] + \hat{V}(1,-1)\hat{L}_+|a,l,l\rangle.$$

Působení $\hat{L}_+$ na pravou stranu braketu dává nulu, zatímco komutátor $\left[\hat{L}_+,\hat{V}(1,-1)\right]$ je dle (2.7) roven

$$\left[\hat{L}_+,\hat{V}(1,-1)\right] = \alpha^{(+)}(1,-1)\hat{V}(1,0) = \sqrt{2}\hbar\hat{V}_3.$$

Dosazením pak dostáváme

$$\left(\frac{l}{l+1}+\frac{1}{l+1}\right)\langle a,l,l|\hat{V}_3|a,l,l\rangle = \langle a,l,l|\hat{V}_3|a,l,l\rangle,$$

což bylo dokázati. Pomocí Wigner–Eckartova teorému můžeme odůvodnit platnost rovnosti pro všechny složky. □

Příklad. Uvažujme systém složený ze dvou podsystémů. Máme určit střední hodnotu výsledku měření třetí komponenty impulsmomentu prvního podsystému provedených ve společném vlastním stavu kvadrátů impulsmomentů obou podsystémů, třetí komponenty impulsmomentu celého systému a kvadrátu impulsmomentu celého systému.

Střední hodnota 3. složky impulsmomentu 1. částice je dána maticovým elementem

$$\langle l_1,l_2;l,m|\hat{L}_{(1)3}|l_1,l_2;l,m\rangle,$$

který užitím věty 2.4 přechází na

$$\langle l_1,l_2;l,m|\frac{\hat{L}_3\cdot(\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}}_{(1)})}{\hat{L}^2}|l_1,l_2;l,m\rangle = \frac{m}{\hbar l(l+1)}\langle l_1,l_2;l,m|\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}}_{(1)}|l_1,l_2;l,m\rangle,$$

kde vyjádřením součinu operátorů $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}}_{(1)}$ ve tvaru[4]

$$\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}}_{(1)} = \frac{1}{2}\left(\hat{L}^2_{(1)}+\hat{L}^2-(\hat{\vec{L}}-\hat{\vec{L}}_{(1)})^2\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{L}^2_{(1)}+\hat{L}^2-\hat{L}^2_{(2)}\right)$$

dostáváme hledaný výsledek

$$\langle l_1,l_2;l,m|\hat{L}_{(1)3}|l_1,l_2;l,m\rangle = \frac{\hbar m}{2l(l+1)}\left(l_1(l_1+1)+l(l+1)-l_2(l_2+1)\right).$$

Věta 2.4 nám nedá odpověď pro $l=0$ (získaný výsledek na $l=0$ nelze ani rozšířit), ale tím zbývá jediná neznámá

$$\langle l_1,l_2;0,0|\hat{L}_{(1)3}|l_1,l_2;0,0\rangle,$$

a to ještě jedině v případě $l_1=l_2$, protože jinak by hodnota $l=0$ nebyla dosažitelná kvůli trojúhelníkové nerovnosti. V tomto případě získáme výsledek 0 snadno na základě symetrie mezi $\hat{L}_{(1)}$ a $\hat{L}_{(2)}$ a známé střední hodnoty $\langle\hat{L}_3\rangle = \langle\hat{L}_{(1)3}+\hat{L}_{(2)3}\rangle = 0$.

[4]Operátory různých složek $\hat{\vec{L}}$ a $\hat{\vec{L}}_{(1)}$ nekomutují, ale stejných složek ano; díky tomu $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}}_{(1)} = \hat{\vec{L}}_{(1)}\cdot\hat{\vec{L}}$. Bez tohoto pozorování by použitý rozklad nefungoval.

Příklad. Užijte Wigner–Eckartova teorému k výpočtu Starkova jevu v poruchové teorii do 1. řádu pro základní a první excitovaný stav elektronu v atomu vodíku.

Starkovým jevem nazýváme rozštěpení spektrálních čar atomu vlivem homogenního vnějšího elektrostatického pole. Elektron atomu vodíku v homogenním elektrostatickém poli $\vec{E} = (0, 0, E)$ můžeme popsat hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\hat{\vec{X}}|} + eE\hat{X}_3.$$

Poslední člen budeme považovat za malou opravu $\hat{H}_0$ popisující atom vodíku bez vnějšího elektrického pole. Vlastní funkce $\hat{H}_0$, které označíme $|n, l, m\rangle$, splňují

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0|n,l,m\rangle &= \frac{-R}{n^2}|n,l,m\rangle, \\
\hat{L}^2|n,l,m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|n,l,m\rangle, \quad l \in \{0,1,\dots,n-1\}, \\
\hat{L}_3|n,l,m\rangle &= \hbar m|n,l,m\rangle, \qquad\quad m \in \{-l,\dots,l\},
\end{aligned}$$

kde R značí Rydbergovu energii, která pro atom vodíku nabývá hodnoty $R \approx 13,6eV$. n nazýváme hlavní kvantové číslo ($n = 1, 2, \dots$). Při $n = 1$ mluvíme o základním stavu, $n = 2$ o 1. excitovaném atd. Je zřejmé, že mimo základní stav jsou všechny hladiny energie degenerované. Poslední člen hamiltoniánu chápeme jako poruchový člen. Z výše uvedeného plyne nutnost použít poruchové teorie pro degenerované spektrum (viz [5]). Dle této teorie je naším úkolem najít matici $\mathbb{B}$ s elementy tvaru

$$\mathbb{B}_{ij} = \mathbb{B}_{(L,M),(l,m)} = \langle n, L, M|eE\hat{X}_3|n, l, m\rangle, \tag{2.17}$$

jejíž vlastní hodnoty představují 1. opravy energie. V dalším budeme uvažovat maticový element bez eE.

Víme, že k vektorovému operátoru $\hat{\vec{X}}$ existuje ireducibilní tenzorový operátor 1. řádu $\hat{\mathbb{T}}(1)$ tak, že $\hat{X}_3 = \hat{T}(1, 0)$ (viz (2.15)). Tím máme vše připraveno k nasazení Wigner–Eckartova teorému, jež použijeme zapsaný ve tvaru (2.13). Věnujme se nejprve základnímu stavu. Zde máme jediný možný maticový element

$$\langle 1,0,0|\hat{T}(1,0)|1,0,0\rangle = (1,0,0,0|0,0)(-1)(1,0\,\|\hat{\mathbb{T}}(1)\|\,1,0).$$

Díky nulovosti CG koeficientu na pravé straně (porušena trojúhelníková nerovnost mezi hodnotami $1, 0, 0$) můžeme prohlásit, že ke Starkově jevu na základním stavu při poruchové teorie do prvního řádu nedochází.[5]

Přistupme k 1. excitovanému stavu. Zde musíme obdržet matici 4×4, neboť ve vlastním vektoru $|2, l, m\rangle$ musí uspořádaná dvojice (l, m) procházet množinu $\{(0, 0), (1, -1), (1, 0), (1, 1)\}$. Dále o hledané matici předem víme, že bude samosdružená, neboť

$$\langle n, L, M|\hat{X}_3|n, l, m\rangle = \langle n, l, m|\hat{X}_3|n, L, M\rangle^*.$$

[5] Poruchová teorie do druhého řádu by vedla k posunu energetické hladiny i pro základní stav.

Využijme opět Wigner–Eckartova teorému k určení maticových elementů

$$\langle 2, L, M|\hat{T}(1,0)|2, l, m\rangle = (1, l, 0, m|L, M)\frac{(-1)^{L+1-l}}{(2L+1)^{1/2}}(2, L \left\|\hat{\mathbb{T}}(1)\right\| 2, l). \tag{2.18}$$

Snadno nalezneme možné hodnoty (l, m, L, M), aby CG koeficient byl triviálně nenulový. Zůstane nám pět možných kandidátů na nenulový maticový element

$$\langle 2, 1, 0|\hat{X}_3|2, 0, 0\rangle, \tag{2.19a}$$
$$\langle 2, 0, 0|\hat{X}_3|2, 1, 0\rangle, \tag{2.19b}$$
$$\langle 2, 1, -1|\hat{X}_3|2, 1, -1\rangle, \tag{2.19c}$$
$$\langle 2, 1, 1|\hat{X}_3|2, 1, 1\rangle, \tag{2.19d}$$
$$\langle 2, 1, 0|\hat{X}_3|2, 1, 0\rangle, \tag{2.19e}$$

CG koeficient vystupující na pravé straně posledního maticového elementu je rovněž nulový (již netriviálně). Zbývají nám 4 kandidáti, které již musíme napočítat přímo z tvarů vlastních vektorů. Zde jsou jejich explicitní vyjádření:

$$|2,0,0\rangle = \frac{(1-\rho/2)e^{-\rho/2}}{\sqrt{8\pi a_0^3}}, \quad |2,1,0\rangle = \frac{\rho e^{-\rho/2}\cos(\vartheta)}{\sqrt{32\pi a_0^3}}, \quad |2,1,1\rangle = \frac{\rho e^{-\rho/2}\sin(\vartheta)e^{i\varphi}}{\sqrt{64\pi a_0^3}},$$

kde a_0 představuje Bohrův poloměr, $\rho = r/a_0$. Přešli jsme ke sférickým souřadnicím $(x, y, z) \mapsto (\rho, \vartheta, \varphi)$ s jakobiánem $|\mathscr{J}| = a_0^3\rho^2\sin(\vartheta)$. Transformace ovlivnila i vyjádření operátoru $\hat{X}_3 = a_0\rho\cos(\vartheta)$.

Určeme nyní maticový element (2.19d) přímo z definice skalárního součinu. Po pečlivém dosazení a úpravě integrandu dostáváme

$$\langle 2, 1, 1|\hat{X}_3|2, 1, 1\rangle = \frac{a_0}{64\pi}\int_{\mathbb{R}^+} d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \rho^5 e^{-\rho}\sin^3(\vartheta)\cos(\vartheta) = 0.$$

To ovšem znamená, že redukovaný maticový element na pravé straně (2.18) musí být pro $l = L = 1$ nulový. Tím pádem je nulový i maticový element (2.19c). Maticový element (2.19b) určíme stejným postupem

$$\langle 2, 0, 0|\hat{X}_3|2, 1, 0\rangle = \frac{a_0}{16\pi}\int_{\mathbb{R}^+} d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \rho^4(1-\rho/2)e^{-\rho}\sin(\vartheta)\cos^2(\vartheta) = -3a_0$$

a jelikož maticový element (2.19a) je jeho komplexním sdružením, musí být

$$\langle 2, 1, 0|\hat{X}_3|2, 0, 0\rangle = -3a_0.$$

Vraťme se nyní k původní úloze (2.17) a sepišme naše výsledky do matice[6]

$$\mathbb{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -3eEa_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -3eEa_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Spektrum obsahuje vlastní čísla $\sigma_{\mathbb{B}} = \{0, \pm 3eEa_0\}$. Dle poruchové teorie do 1. řádu tedy dojde k rozštěpení prvního excitovaného stavu na 3 energie: $E_0 = -R/4$ s degenerací 2 a $E_{1,2} = -R/4 \pm 3eEa_0$, každá s degenerací 1 (podle algebraické násobnosti vlastních čísel matice $\mathbb{B}$). Dospěli jsme k výsledku, který je ve shodě s výsledkem získaným odlišným postupem v [5].

Poznámka. Výhody Wigner–Eckartova bychom docenili až na vyšších excitovaných stavech, popř. při vyšších řádech poruchové teorie. Již při druhém excitovaném stavu by matice $\mathbb{B}$ měla rozměr 9×9.

[6] Indexaci řádkových a sloupcových prvků můžeme volit dle libosti. Musíme však zachovat stejnou indexaci v řádku a sloupci. V našem příkladě volíme výše uvedené pořadí $((0,0),(1,-1),(1,0),(1,1))$.

3 Další ekvivalentní způsoby zápisu kvantové mechaniky

3.1 Jiný výběr báze Hilbertova prostoru

Pro jednoduchost budeme v celé kapitole předpokládat bezespinovou částici v $\mathbb{R}^3$, příp. $\mathbb{R}$. Případná zobecnění na částici se spinem, popř. systémy více částic budou zřejmá.

Závislost vlnové funkce $\psi(\vec{x})$ na x lze psát

$$\psi(\vec{x}) = \int \delta^{(3)}(\vec{y} - \vec{x})\psi(\vec{y})d^3y = \langle \vec{x}|\psi\rangle \tag{3.1}$$

a chápat ji jako skalární součin abstraktního vektoru $|\psi\rangle$ a zobecněného vlastního vektoru polohy $|\vec{x}\rangle$: $\hat{\vec{X}}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|\vec{x}\rangle$, vyjádřeného zobecněnou vlnovou funkcí

$$\psi_{\vec{x}}(\vec{y}) = \delta^{(3)}(\vec{y} - \vec{x}). \tag{3.2}$$

Přestože symboly $|\vec{x}\rangle$ netvoří bázi Hilbertova prostoru (ani nejsou jeho prvky), v mnoha případech s nimi lze pracovat, jako by tvořily. Například můžeme formálně psát

$$\int |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|d^3x = \mathbb{1}, \tag{3.3}$$

což interpretujeme jako možnost vložit takový „rozklad jednotky“ na libovolné místo, kam by šel vložit jednotkový operátor, jako ku příkladu mezi vektory ve skalárním součinu:

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle &= \int \varphi(\vec{x})^*\psi(\vec{x})d^3x = \int \left(\langle\vec{x}|\varphi\rangle\right)^* \langle\vec{x}|\psi\rangle d^3x = \\ &= \int \langle\varphi|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle d^3x = \langle\varphi| \underbrace{\left(\int |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|d^3x\right)}_{\mathbb{1}} |\psi\rangle\end{aligned}$$

Aplikací rozkladu jednotky (3.3) na $|\psi\rangle$ získáváme

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \int |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle d^3x = \int \psi(\vec{x})|\vec{x}\rangle d^3x,$$

kde hodnoty $\psi(\vec{x})$ zastupují funkci Fourierových koeficientů, se kterými se tvarem pravé strany (3.1) shodují.

S rovnicí (3.2) se lze setkat ve tvaru

$$\langle\vec{y}|\vec{x}\rangle = \delta^{(3)}(\vec{y} - \vec{x}),$$

který vypadá jako definiční předpis ortonormální báze, ale s normalizací k δ-funkci místo k jedničce. Matematicky však nelze mluvit o skalárním součinu zobecněných vlastních vektorů odpovídajícím konkrétním hodnotám $\vec{x}$ a $\vec{y}$ z důvodu $|\vec{x}\rangle, |\vec{y}\rangle \notin \mathscr{H}$.

Až dosud jsme budovali kvantovou mechaniku zapsanou v této „spojité bázi“ tvořené zobecněnými vlastními vektory operátoru polohy $\hat{\vec{X}}$ (tzv. polohová neboli x- nebo q-reprezentace kvantové mechaniky). Pochopitelně je možno pracovat i v jiných bázích. Často se lze setkat s

(1) bází tvořenou vlastními vektory hybnosti $|\vec{p}\rangle$: $\hat{\vec{P}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$ (hybnostní neboli p-reprezentace),

(2) bází tvořenou ÚMP obsahující hamiltonián $\hat{H}$ (energetická reprezentace).

V těchto bázích můžeme vyjadřovat nejen stavové vektory, ale i operátory, a tak se zcela od x-reprezentace odpoutat. Uvědomme si nejprve, jak předpis operátorů odráží x-reprezentaci v nám známých případech. Vezměme libovolný operátor $\hat{A}$, dva stavy $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathscr{H}$ a zkoumejme výraz $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$. Pro zobecněné vektory polohy $|\vec{x}\rangle$, $|\vec{y}\rangle$ můžeme na základě (3.1), (3.3) psát

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle &= \langle\varphi|\left(\int d^3x\,|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\right)\hat{A}\left(\int d^3y\,|\vec{y}\rangle\langle\vec{y}|\right)|\psi\rangle = \\ &= \int d^3x \int d^3y\,\langle\varphi|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\hat{A}|\vec{y}\rangle\langle\vec{y}|\psi\rangle = \int d^3x \int d^3y\,\overline{\varphi(\vec{x})}\,\langle\vec{x}|\hat{A}|\vec{y}\rangle\,\psi(\vec{y}). \qquad (3.4)\end{aligned}$$

Zde výraz $\langle\vec{x}|\hat{A}|\vec{y}\rangle$ představuje maticový element operátoru $\hat{A}$ v bázi $(|\vec{x}\rangle)_{\vec{x}\in\mathbb{R}^3}$. Zkusme určit tento element pro operátory $\hat{X}_i$, $\hat{P}_i$, jež jsme zvyklí definovat přes jejich působení na vlnovou funkci $\psi(\vec{x})$. Užitím (3.2) je možno hledaný součin psát jako

$$\begin{aligned}\langle\vec{x}|\hat{X}_i|\vec{y}\rangle &= \int d^3z\,\delta^{(3)}(\vec{z}-\vec{x})z_i\delta^{(3)}(\vec{z}-\vec{y}) = x_i\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y}),\\ \langle\vec{x}|\hat{P}_i|\vec{y}\rangle &= \int d^3z\,\delta^{(3)}(\vec{z}-\vec{x})\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z_i}\right)\delta^{(3)}(\vec{z}-\vec{y}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y}).\end{aligned}$$

Tyto maticové elementy jakožto funkce $\vec{x}$ a $\vec{y}$ ekvivalentně vyjadřují vztahy běžně zapisované jako $\hat{X} = x\times$, $\hat{P} = -i\hbar\hat{\nabla}$, jak se můžeme přesvědčit. Vidíme, že se v nich objevují distribuce. Ty nabývají konkrétního fyzikálního významu až ve skalárním součinu (3.4). Například pro skalární součin s operátorem $\hat{X}_i$ platí na základě předposlední rovnosti

$$\langle\varphi|\hat{X}_i|\psi\rangle = \int d^3x \int d^3y\,\overline{\varphi(\vec{x})}x_i\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y})\psi(\vec{y}) = \int d^3x\,\overline{\varphi(\vec{x})}x_i\psi(\vec{x}),$$

což je nám důvěrně známý skalární součin.

3.1.1 Hybnostní reprezentace

Vlastní funkcí operátoru hybnosti $\hat{\vec{P}}$ v x-reprezentaci je funkce $|\vec{p}\rangle$ splňující

$$\hat{\vec{P}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle.$$

Této rovnici vyhovují (v x-reprezentaci) funkce $|\vec{p}\rangle \overset{\triangle}{=} \psi_{\vec{p}}(\vec{x})$, jež jsou číselným násobkem funkce $e^{\frac{i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}$, přičemž z důvodu normalizace k δ-funkci se volí

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left\{\frac{i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right\} =: \langle\vec{x}|\vec{p}\rangle. \qquad (3.5)$$

Vlastní vektory $|\vec{p}\rangle$, $|\vec{q}\rangle$ operátoru hybnosti $\hat{\vec{P}}$ pak splňují

$$\int d^3p |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = \mathbb{1}, \quad \langle\vec{p}|\vec{q}\rangle = \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q}). \tag{3.6}$$

Vlnovou funkci $\psi^P(\vec{p})$ v hybnostní reprezentaci budeme zapisovat způsobem (podle vzoru zavedeného v x-reprezentaci)

$$\psi^P(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle. \tag{3.7}$$

Nyní se budeme věnovat otázce, jaký je vztah mezi $\psi^P(\vec{p})$ a $\psi(\vec{x})$. Zřejmě na základě (3.3), (3.5) a (3.6) platí

$$\psi^P(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle = \int d^3x \, \langle\vec{p}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \exp\left\{\frac{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right\} \psi(\vec{x}) d^3x,$$
$$\psi(\vec{x}) = \langle\vec{x}|\psi\rangle = \int d^3p \, \langle\vec{x}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \exp\left\{\frac{i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right\} \psi^P(\vec{p}) d^3p,$$

převodním vztahem je tedy přímá a zpětná Fourierova transformace. Díky normalizační konstantě zvolené v (3.5) se jedná o unitární verzi Fourierovy transformace, která zachovává L^2 normu funkcí, tedy platí

$$\int |\psi(\vec{x})|^2 d^3x = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \int |\psi^P(\vec{p})|^2 d^3p = 1.$$

Do nové báze $(|\vec{p}\rangle)$ je však třeba převést i operátory. Buď $\hat{A}$ libovolný operátor na $\mathscr{H}$, $|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle$ dva stavy na $\mathscr{H}$ (v x-reprezentaci), $|\vec{p}\rangle$, $|\vec{q}\rangle$ zobecněné vlastní funkce operátoru $\hat{\vec{P}}$. Potom na základě (3.6), (3.7)

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\varphi| \left(\int d^3p \, |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\right) \hat{A} \left(\int d^3q \, |\vec{q}\rangle\langle\vec{q}|\right) |\psi\rangle =$$
$$= \int d^3p \int d^3q \, \overline{\varphi^P(\vec{p})} \, \langle\vec{p}|\hat{A}|\vec{q}\rangle \, \psi^P(\vec{q}). \tag{3.8}$$

Opět zvolíme za $\hat{A}$ operátor $\hat{X}_i$ resp. $\hat{P}_i$, jejichž působení v x-reprezentaci známe. Nejprve využijeme explicitního vyjádření $|\vec{p}\rangle$ z (3.5) k určení maticového elementu operátoru $\hat{X}_i$ v bázi $(|\vec{p}\rangle)_{\vec{p}\in\mathbb{R}^3}$

$$\langle\vec{p}|\hat{X}_i|\vec{q}\rangle = \int d^3x \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{\frac{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right\} x_i \exp\left\{\frac{i\vec{q}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right\}.$$

Jelikož se přes x_i integruje, vyjádříme ho prostřednictvím derivace.

$$\langle\vec{p}|\hat{X}_i|\vec{q}\rangle = \int d^3x \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{\frac{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right\} \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}\right) \exp\left\{\frac{i\vec{q}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right\} =$$
$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i} \int d^3x \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{\frac{-i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{q})\vec{x}\right\}.$$

Poslední integrál je na základě (3.5), (3.6) možno vyjádřit jako $\langle \vec{p}|\vec{q}\rangle = \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q})$, čímž převádíme hledaný maticový element do podoby

$$\langle \vec{p}|\hat{X}_i|\vec{q}\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q}) = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q}). \tag{3.9}$$

Stejným způsobem nalezneme maticový element operátoru $\hat{P}_i$ v bázi vlastních funkcí operátoru hybnosti.

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}|\hat{P}_i|\vec{q}\rangle &= \int d^3x \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\exp\left\{\frac{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right\}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\right)\exp\left\{\frac{i\vec{q}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right\} = \\ &= q_i\int d^3x\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\exp\left\{\frac{-i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{q})\vec{x}\right\} = q_i\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q}).\end{aligned} \tag{3.10}$$

Dosazením (3.9), (3.10) do (3.8) získáváme podobu operátorů $\hat{X}_i^P$, $\hat{P}_i^P$ v hybnostní reprezentaci.

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\hat{X}_i^P|\psi\rangle &= \int d^3p\int d^3q\,\overline{\varphi^P(\vec{p})}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q})\right]\psi^P(\vec{q}) = \\ &= \int d^3p\,\overline{\varphi^P(\vec{p})}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\right]\psi^P(\vec{p}), \\ \langle\varphi|\hat{P}_i^P|\psi\rangle &= \int d^3p\int d^3q\,\overline{\varphi^P(\vec{p})}\left[q_i\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q})\right]\psi^P(\vec{q}) = \\ &= \int d^3p\,\overline{\varphi^P(\vec{p})}\,[p_i]\,\psi^P(\vec{p})\end{aligned}$$

a tedy operátor polohy, resp. hybnosti, nabývá v hybnostní reprezentaci podoby

$$\hat{X}_i^P = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}, \quad \text{resp.} \quad \hat{P}_i^P = p_i\times .$$

Hybnostní reprezentace umožňuje díky triviálnímu tvaru operátoru $\hat{P}_i^P$ v jistých fyzikálních situacích přechod k jednoduššímu hamiltoniánu a tím k jednoduššímu řešení Schrödingerovy rovnice. Hamiltonián je v hybnostní reprezentaci možno zapsat

$$\hat{H}^P = \frac{\sum_i p_i^2\times}{2M} + V\left(i\hbar\hat{\nabla}_p\right).$$

V případě $V(\hat{\vec{x}}) \equiv 0$ je hamiltonián v p-reprezentaci triviální. Přechod k p-reprezentaci je výhodný i v případě závislosti V na $\vec{x}$ nejvýše lineárního řádu. V ostatních případech nepřináší okamžité zjednodušení (stačí si představit hamiltonián v případě $V(\hat{\vec{x}}) \sim \frac{1}{|\hat{\vec{x}}|}$).

Poznámka. S p-reprezentací jsme se mlčky setkali již v zimě při řešení Schrödingerovy rovnice volné částice.

3.1.2 Energetická reprezentace

Mějme dánu ÚMP obsahující $\hat{H}$. Předpokládejme čistě bodové spektrum $\hat{H}$. Nechť vlastní vektory ÚMP $(|n\rangle)_{n\in\mathscr{I}}$ tvoří ortonormální bázi v $\mathscr{H}$. Za předpokladu, že bázové vektory spadají do definičního oboru všech fyzikálně zajímavých operátorů, lze místo operátoru $\hat{A}$ počítat s příslušnou „nekonečněrozměrnou maticí“[7] operátoru $\hat{A}$ v bázi $(|n\rangle)_{n\in\mathscr{I}}$

$$\hat{A}_{nm} = \langle n|\hat{A}|m\rangle.$$

Operátor $\hat{A}$ je tedy možno zapsat

$$\hat{A} = \sum_{n,m} |n\rangle\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m| = \sum_{n,m} |n\rangle \hat{A}_{nm}\langle m|$$

a stejně pro operátor $\hat{A}\hat{B}$, pokud $\hat{A}\hat{B}$, $\hat{B}$ splňují stejné předpoklady jako operátor $\hat{A}$ výše

$$\begin{aligned}\hat{A}\hat{B} &= \sum_{n,m} |n\rangle\langle n|\hat{A}\hat{B}|m\rangle\langle m| = \sum_{n,m} |n\rangle \sum_k \left(\langle n|\hat{A}|k\rangle\langle k|\hat{B}|m\rangle\right)\langle m| = \\ &= \sum_{n,m} |n\rangle \sum_k \left(\hat{A}_{nk}\hat{B}_{km}\right)\langle m| = \sum_{n,m} |n\rangle(\hat{A}\cdot\hat{B})_{nm}\langle m|.\end{aligned}$$

Skládání operátorů je v energetické reprezentaci představováno násobením matic, zobecněným na spočetnou dimenzi.

Poznámka. Snadno nahlédneme, že $\hat{H}$ bude v energetické reprezentaci představován diagonální maticí.

Časový vývoj bazických vektorů je triviální, jak vidno ze Schrödingerovy rovnice, kde klademe $|\psi\rangle = |n\rangle$:

$$i\hbar\frac{\partial|n\rangle}{\partial t} = \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle.$$

a tedy

$$|n(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)\right)|n(t_0)\rangle.$$

Výhodou energetické reprezentace je snadný popis časového vývoje, neboť každý vektor $|\varphi\rangle \in \mathscr{H}$ je možno rozložit do báze vektorů $(|n\rangle)_{n\in\mathscr{I}}$, jejichž časový vývoj známe. Netriviální tvar operátorů $\hat{X}$, $\hat{P}$ bohužel vede ke složitější konstrukci fyzikálně interpretovatelných pozorovatelných.

Příklad. 1-rozměrný harmonický oscilátor v energetické reprezentaci.

Ze zimy víme, že $\hat{H}$ tvoří ÚMP jednorozměrného harmonického oscilátoru. Označme $|n\rangle$ příslušné vlastní funkce splňující

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle.$$

[7] V této formě kvantovou mechaniku zkoumali W. Heisenberg, M. Born a P. Jordan.

Víme, že $(|n\rangle)_{n\in\mathbb{N}_0}$ tvoří úplnou ortonormální bázi $\mathscr{H}$. Při popisu HO se s výhodou užije kreační $(\hat{a}^\dagger)$ a anihilační $(\hat{a})$ operátor

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}\left(\hat{X} - \frac{i}{M\omega}\hat{P}\right), \quad \hat{a} = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}\left(\hat{X} + \frac{i}{M\omega}\hat{P}\right). \tag{3.11}$$

Hamiltonián je potom možno zapsat

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right).$$

Ze zimy rovněž víme

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

odkud je možno odvodit

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle,$$

kde $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ se nazývá operátor počtu energetických kvant. Maticové elementy kreačního operátoru $\hat{a}^\dagger$

$$(\hat{a}^\dagger)_{nm} = \langle n|\,\hat{a}^\dagger\,|m\rangle = \sqrt{m+1}\langle n|m+1\rangle = \sqrt{m+1}\delta_{n,m+1},$$

jež je možno zapsat maticově[8]

$$\hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ \sqrt{1} & 0 & & \\ & \sqrt{2} & 0 & \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Podobně můžeme zapsat maticově operátor $\hat{a}$, operátor počtu energetických kvant $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ či hamiltonián $\hat{H}$ (poslední dvě budou v bázi energetických stavů diagonální). Jelikož operátory $\hat{x}$ a $\hat{p}$ je možno na základě (3.11) zapsat jako lineární kombinaci $\hat{a}^\dagger$, $\hat{a}$, můžeme snadno obdržet také jejich maticové elementy

$$\hat{P}_{nm} = -i\sqrt{\frac{M\omega\hbar}{2}}\left(\sqrt{m}\delta_{n,m-1} - \sqrt{m+1}\delta_{n,m+1}\right),$$
$$\hat{X}_{nm} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}\left(\sqrt{m}\delta_{n,m-1} + \sqrt{m+1}\delta_{n,m+1}\right).$$

[8] Řádky a sloupce indexujeme od nuly.

Ověřme v maticové reprezentaci platnost komutační relace $\left[\hat{P},\hat{X}\right] = -i\hbar\mathbb{1}$. $\left[\hat{P},\hat{X}\right]$ v maticové reprezentaci představuje matici. Najdeme její i,j-tý prvek

$$\begin{aligned}\left[\hat{P},\hat{X}\right]_{ij} &= \sum_{k=0}^{\infty}\left(\hat{P}_{ik}\hat{X}_{kj} - \hat{X}_{ik}\hat{P}_{kj}\right) = \\ &= -\frac{i\hbar}{2}\sum_{k=0}^{+\infty}\Big\{\left(\sqrt{k}\delta_{i,k-1} - \sqrt{k+1}\delta_{i,k+1}\right)\left(\sqrt{j}\delta_{k,j-1} + \sqrt{j+1}\delta_{k,j+1}\right) \\ &\qquad - \left(\sqrt{k}\delta_{i,k-1} + \sqrt{k+1}\delta_{i,k+1}\right)\left(\sqrt{j}\delta_{k,j-1} - \sqrt{j+1}\delta_{k,j+1}\right)\Big\} = \\ &= -i\hbar\sum_{k=0}^{\infty}\left(\sqrt{k}\sqrt{j+1}\delta_{i,k-1}\delta_{k,j+1} - \sqrt{k+1}\sqrt{j}\delta_{i,k+1}\delta_{k,j-1}\right).\end{aligned}$$

Výraz v poslední závorce je nenulový jedině pro $i = j$, a to pro hodnoty $k = j \pm 1$. Ponecháním jediného nenulového členu z nekonečné sumy (v případě $j = 0$ z druhé sumy nezůstane žádný) zůstane pro všechna $i,j \in \mathbb{N}_0$

$$\left[\hat{P},\hat{X}\right]_{ij} = -i\hbar\left((j+1)\delta_{ij} - j\delta_{ij}\right) = -i\hbar\delta_{ij}.$$

Tím je komutační relace dokázána. Vyzkoušejte si však také dospět k výsledku násobením matic v jejich tabulkovém zápisu.

3.2 Jiný popis časového vývoje

Předpovědi kvantové mechaniky jsou dány skalárními součiny, v nichž vystupují pozorovatelné veličiny (operátory na $\mathscr{H}$) a stavy (prvky $\mathscr{H}$). Například střední hodnota pozorovatelné $\hat{A}$ ve stavu $|\psi\rangle$ je určena

$$\langle\hat{A}\rangle_{|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Definujme nyní unitární operátor $\hat{U}$ ($\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$) a zkusme určit střední hodnotu operátoru $\hat{A}$ v novém stavu $|\tilde{\psi}\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$. Zřejmě platí

$$\langle\hat{A}\rangle_{|\tilde{\psi}\rangle} = \frac{\langle\hat{U}\psi|\hat{A}|\hat{U}\psi\rangle}{\langle\hat{U}\psi|\hat{U}\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}|\psi\rangle}{\langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Protože chceme zachovat rovnost s původní střední hodnotou, musíme rovněž přejít k novému operátoru $\hat{\tilde{A}}$, který bude splňovat rovnost

$$\hat{A} = \hat{U}^\dagger\hat{\tilde{A}}\hat{U}; \qquad \hat{\tilde{A}} = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger. \tag{3.12}$$

Potom

$$\langle\hat{\tilde{A}}\rangle_{|\tilde{\psi}\rangle} = \langle\hat{A}\rangle_{|\psi\rangle}$$

a předpovědi kvantové mechaniky zůstávají nezměněny.

Poznámka. Jedná se o podobnostní transformaci a o té víme, že nemění spektrum operátoru.

Získané poznatky brzy využijeme. Než však postoupíme dále, připomeňme si, jak kvantová mechanika přistupuje k popisu časového vývoje částice. Při popisu kvantového systému jsme vycházeli z hamiltoniánu klasické částice. Poté, užitím principu korespondence, jsme přešli k operátoru $\hat{H}$. Časový vývoj kvantové částice je určen Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle, \tag{3.13}$$

která společně s počáteční podmínkou $|\psi_0\rangle = |\psi(t_0)\rangle$ jednoznačně určuje stav částice v libovolném čase t. Princip superpozice implikuje, že transformaci $|\psi(t_0)\rangle$ na $|\psi(t)\rangle$ musí popisovat lineární operátor. Pro každé t_0, t tak definujeme **evoluční operátor** $\hat{U}(t,t_0)$ splňující

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle. \tag{3.14}$$

Podíváme se na vlastnosti tohoto operátoru. Zvolme libovolně $|\varphi(t)\rangle, |\psi(t)\rangle \in L^2(\mathbb{R}^3)$ a zkusme určit časovou derivaci jejich skalárního součinu

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi(t)|\psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}|\varphi(t)\rangle\right)^\dagger|\psi(t)\rangle + \langle\varphi(t)|\left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right).$$

Dosazením za časové derivace ze Schrödingerovy rovnice (3.13)

$$-\frac{1}{i\hbar}\left(\hat{H}|\varphi(t)\rangle\right)^\dagger|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\varphi(t)|\left(\hat{H}|\psi(t)\rangle\right) = \frac{1}{i\hbar}\langle\varphi(t)|\left(-\hat{H}^\dagger + \hat{H}\right)|\psi(t)\rangle$$

a díky samosdruženosti $\hat{H}$ dostáváme

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi(t)|\psi(t)\rangle = 0. \tag{3.15}$$

Stejně tak, užitím evolučního operátoru (3.14), můžeme psát

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\varphi(t)|\psi(t)\rangle &= \frac{d}{dt}\left(\hat{U}(t,t_0)|\varphi(t_0)\rangle\right)^\dagger\left(\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle\right) = \frac{d}{dt}\langle\varphi(t_0)|\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = \\ &= \langle\varphi(t_0)|\frac{d}{dt}\left[\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)\right]|\psi(t_0)\rangle. \end{aligned}\tag{3.16}$$

Tento braket však musí být na základě (3.15) roven nule pro všechna $|\varphi(t)\rangle, |\psi(t)\rangle \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Operátor $\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)$ tedy musí být konstantní v čase. Na základě definice evolučního operátoru (3.14) aplikované pro $t = t_0$ musí platit

$$\hat{U}(t_0,t_0) = \mathbb{1},$$

a tedy

$$\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) = \hat{U}^\dagger(t_0,t_0)\hat{U}(t_0,t_0) = \mathbb{1},$$

což je relace unitárnosti operátoru $\hat{U}(t, t_0)$.

Zvolme 3 libovolné časy t_1, t_2, t_3. Potom jistě pro stav $|\psi\rangle$ platí

$$|\psi(t_1)\rangle = \hat{U}(t_1, t_2)|\psi(t_2)\rangle \tag{3.17a}$$
$$|\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle \tag{3.17b}$$
$$|\psi(t_3)\rangle = \hat{U}(t_3, t_2)|\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_3, t_2)\hat{U}(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle = \hat{U}(t_3, t_1)|\psi(t_1)\rangle, \tag{3.17c}$$

kde vynásobením (3.17b) zleva operátorem $\hat{U}^{-1}(t_2, t_1)$ a porovnáním s (3.17a) snadno nahlédneme, že

$$\hat{U}(t_1, t_2) = \hat{U}^{-1}(t_2, t_1) = \hat{U}^\dagger(t_2, t_1) \tag{3.18a}$$

a triviálně z (3.17c)

$$\hat{U}(t_3, t_1) = \hat{U}(t_3, t_2)\hat{U}(t_2, t_1). \tag{3.18b}$$

Pokud navíc hamiltonián nezávisí na čase,

$$\hat{U}(t_1 + T, t_0 + T) = \hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t_1 - t_0, 0) =: \hat{U}(t_1 - t_0), \tag{3.19}$$

můžeme zbavit evoluční operátor jedné nezávislé proměnné.

Přepišme Schrödingerovu rovnici (3.13) užitím zavedeného unitárního evolučního operátoru $\hat{U}(t, t_0)$:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big(\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle\Big) = \hat{H}(t)\Big(\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle\Big).$$

Můžeme na obou stranách zkrátit obecný $|\psi(t_0)\rangle$ a získat tak operátorovou diferenciální rovnici

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0). \tag{3.20}$$

V případě $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$ má okamžité řešení

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t - t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}\right), \tag{3.21}$$

kde s operátorem v exponentu je možno se vypořádat buď užitím Taylorova rozvoje, nebo pomocí spektrálního rozkladu operátoru (viz Modrá smrt)

$$e^{i\hat{A}} = \int e^{i\lambda} d\hat{E}_\lambda.$$

Pokud navíc $\hat{H}$ má úplný systém vlastních vektorů $(|n\rangle)_{n\in\mathscr{I}}$: $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, potom

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)\right)|n\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(t - t_0)\right)|n\rangle,$$

a pro libovolný vektor $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)\right)|\psi\rangle = \sum_n \psi_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(t - t_0)\right)|n\rangle,$$

kde ψ_n představuje příslušný Fourierův koeficient $\psi_n = \langle n|\psi\rangle$.

Doposud jsme budovali kvantovou teorii v tzv. Schrödingerově reprezentaci, která se v literatuře nejčastěji užívá. V této reprezentaci jsou operátory obvykle neměnné v čase, zatímco vlnové funkce se v čase mění podle Schrödingerovy rovnice. Využijeme získaných poznatků k zavedení dalších, v literatuře užívaných, reprezentací kvantové mechaniky ekvivalentních k reprezentaci Schrödingerově: Heisenbergovy a Diracovy reprezentace.

3.2.1 Heisenbergova reprezentace

Mějme $\hat{U}(t,t_0)$ evoluční operátor definovaný v (3.14). Předpokládejme, že uvažovaná kvantová částice je popsána vlnovou funkcí ve Schrödingerově reprezentaci $|\psi^S(t)\rangle$. Definujme Heisenbergovu vlnovou funkci $|\psi^H(t)\rangle$ způsobem

$$|\psi^H(t)\rangle = \hat{U}^{-1}(t,t_0)|\psi^S(t)\rangle = \hat{U}^{-1}(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)|\psi^S(t_0)\rangle = |\psi^S(t_0)\rangle. \tag{3.22}$$

Musí se ovšem změnit i operátor, aby předpovědi kvantové mechaniky zůstaly zachovány. Buď $\hat{A}^S$ operátor ve Schrödingerově reprezentaci. Potom dle (3.12) musí odpovídající operátor v Heisenbergově reprezentaci $\hat{A}^H(t)$ mít tvar

$$\hat{A}^H(t) = \hat{U}^{-1}(t,t_0)\hat{A}^S(\hat{U}^\dagger)^{-1}(t,t_0) = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}^S\hat{U}(t,t_0). \tag{3.23}$$

Je zřejmé, že v Heisenbergově reprezentaci se vlnové funkce s časem nemění. Na čase jsou namísto nich závislé operátory přiřazené pozorovatelným fyzikálním veličinám. Pokusme se najít obdobu Schrödingerovy rovnice, která bude popisovat časový vývoj operátorů (nad rámec jejich případné vlastní, explicitní časové závislosti $A^S(t)$). Zderivujme podle času rovnost (3.23)

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{A}^H(t) = \frac{d}{dt}\left(\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}^S(t)\hat{U}(t,t_0)\right) = \frac{d}{dt}\left(\hat{U}^\dagger(t,t_0)\right)\hat{A}^S(t)\hat{U}(t,t_0) + \\ + \hat{U}^\dagger(t,t_0)\frac{d}{dt}\left(\hat{A}^S(t)\right)\hat{U}(t,t_0) + \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}^S(t)\frac{d}{dt}\left(\hat{U}(t,t_0)\right).\end{aligned}$$

Sem dosadíme časové derivace operátorů z (3.20) a zapíšeme pro kompaktnost bez časových proměnných

$$-\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{H}^S\hat{A}^S\hat{U} + \hat{U}^\dagger\frac{d}{dt}(\hat{A}^S)\hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{A}^S\hat{H}^S\hat{U}.$$

Navíc díky unitaritě $\hat{U}$ a rovnosti operátorů (3.23) můžeme psát

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{A}^H &= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{H}^S(\hat{U}\hat{U}^\dagger)\hat{A}^S\hat{U} + \hat{U}^\dagger\frac{d}{dt}(\hat{A}^S)\hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{A}^S(\hat{U}\hat{U}^\dagger)\hat{H}^S\hat{U} = \\ &= -\frac{1}{i\hbar}(\hat{U}^\dagger\hat{H}^S\hat{U})(\hat{U}^\dagger\hat{A}^S\hat{U}) + \frac{1}{i\hbar}(\hat{U}^\dagger\hat{A}^S\hat{U})(\hat{U}^\dagger\hat{H}^S\hat{U}) + \hat{U}^\dagger\frac{d}{dt}(\hat{A}^S)\hat{U} = \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\left(\hat{H}^H\hat{A}^H - \hat{A}^H\hat{H}^H\right) + \hat{U}^\dagger\frac{d}{dt}(\hat{A}^S)\hat{U},\end{aligned} \tag{3.24}$$

tedy

$$\frac{d}{dt}\hat{A}^H(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}^H(t), \hat{H}^H(t)\right] + \hat{U}^\dagger(t,t_0)\frac{d}{dt}\left(\hat{A}^S(t)\right)\hat{U}(t,t_0). \tag{3.25}$$

Rovnice (3.25) je pro pozorovatelné bez explicitní časové závislosti A^S přímou obdobou časového vývoje pozorovatelných v klasické mechanice

$$\dot{a} = \{a, H\}, \tag{3.26}$$

pokud chápeme $\frac{1}{i\hbar}[\cdot,\cdot]$ jako kvantový analog klasické Poissonovy závorky $\{\cdot,\cdot\}$.

Výhodou Heisenbergovy reprezentace je přímá analogie s klasickou mechanikou. Někdy je možné ji s výhodou využít k popisu rozptylu. Její nevýhodou oproti Schrödingerově reprezentaci však zůstává složitější řešení časového vývoje, neboť místo parciálních diferenciálních rovnic pro vektory z $\mathscr{H}$ máme podobné rovnice pro operátory.

Poznámka. Snadno nahlédneme z rovnosti (3.23), že hamiltonián systému, který není pod vlivem časově proměnných vnějších polí, je v Heisenbergově i Schrödingerově reprezentaci představován tímtéž časově nezávislým operátorem

$$\hat{H}^H(t) = \hat{H}^S.$$

Pak také

$$\left[\hat{U}(t,t_0), \hat{H}^S\right] = 0, \qquad \frac{d}{dt}A^H(t) = \left[A^H(t), H^S\right]$$

pro $A^S \neq A^S(t)$.

3.2.2 Diracova reprezentace

Poruchový nebo **interakční obraz**, jak je někdy Diracova reprezentace nazývána, kombinuje vlastnosti Schrödingerovy a Heisenbergovy reprezentace a s výhodou se užívá u některých výpočtů s časově závislou poruchou (viz kapitola 5). Předpokládejme hamiltonián ve tvaru

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t),$$

kde umíme řešit Schrödingerovu rovnici s $\hat{H}_0 \neq \hat{H}_0(t)$ a člen $\hat{V}(t)$ představuje jeho časově závislou poruchu. Definujme nyní operátor $\hat{U}_0$ způsobem

$$\hat{U}_0(t,t_1) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_1)\right). \tag{3.27}$$

Tento operátor je jistě unitární a bezpochyby je na základě našich předpokladů splněna operátorová rovnost (3.20) ve tvaru

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}_0(t,t_1) = \hat{H}_0\hat{U}_0(t,t_1). \tag{3.28}$$

Podobně jako u Heisenbergovy reprezentace definujeme vlnovou funkci v Diracově reprezentaci $|\psi^D(t)\rangle$ a operátor $\hat{A}^D$ pomocí nového unitárního operátoru $\hat{U}_0$ způsobem

$$|\psi^D(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)|\psi^S(t)\rangle, \tag{3.29a}$$
$$\hat{A}^D(t) = \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\hat{A}^S(t)\hat{U}_0(t,t_0). \tag{3.29b}$$

Zbývá nalézt rovnice, jimiž se řídí časový vývoj $|\psi^D(t)\rangle$ a $\hat{A}^D(t)$. Budeme postupovat obdobně jako v předchozím odstavci. Aplikujme časovou derivaci nejprve na rovnost (3.29a) (opět si dovolím v postupu neuvádět časové závislosti)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi^D\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\hat{U}_0^\dagger\right)|\psi^S\rangle + i\hbar\hat{U}_0^\dagger\frac{\partial}{\partial t}\left(|\psi^S\rangle\right),$$

kde užijeme rovnosti (3.28) pro časovou derivaci operátoru $\hat{U}_0^\dagger$ a Schrödingerovu rovnici (3.13) pro časovou derivaci $|\psi^S\rangle$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi^D\rangle = i\hbar\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{U}_0^\dagger\hat{H}_0\right)|\psi^S\rangle + i\hbar\hat{U}_0^\dagger\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi^S\rangle\right).$$

Dále přechodem k Diracově reprezentaci pomocí vztahů (3.29a) (3.29b) dostáváme

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi^D\rangle &= -\hat{U}_0^\dagger\hat{H}_0\hat{U}_0|\psi^D\rangle + \hat{U}_0^\dagger\hat{H}\hat{U}_0|\psi^D\rangle = -\hat{H}_0^D|\psi^D\rangle + \hat{H}^D|\psi^D\rangle = \\ &= \hat{V}^D(t)|\psi^D(t)\rangle. \end{aligned} \tag{3.30}$$

Stejným postupem jako u Heisenbergovy reprezentace bychom odvodili z rovnosti (3.29b) vztah pro časovou derivaci operátoru

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}^D(t) = \left[\hat{A}^D(t),\hat{H}_0\right] + i\hbar\hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\frac{d}{dt}\left(\hat{A}^S(t)\right)\hat{U}_0(t,t_0). \tag{3.31}$$

V Diracově reprezentaci se část dynamiky systému odráží v časové závislosti stavových vektorů (3.30) a část v závislosti operátorů odpovídajících dynamickým proměnným (3.31).

Tato reprezentace je výhodná, pokud umíme najít evoluční operátor příslušející $\hat{H}_0$ (výraz (3.27)) a chceme poruchovým výpočtem zjistit, jaký je časový vývoj systému v případě započtení časově závislého potenciálu $\hat{V}(t)$.

Příklad. Zapište operátor polohy a hybnosti částice v homogenním gravitačním poli v Heisenbergově reprezentaci.

Budeme uvažovat jednorozměrný případ. Hamiltonián částice ve Schrödingerově reprezentaci známe[9]

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + mg\hat{x}.$$

[9] V dalším operátory bez indexu budou představovat operátory ve Schrödingerově reprezentaci.

Operátory $\hat{p}^H$, resp. $\hat{x}^H$ je možno určit buď definičně pomocí evolučního operátoru (3.23), nebo pomocí odvozené diferenciální operátorové rovnice (3.25), která je v tomto případě jednodušší cestou k cíli. Snadno určíme potřebné komutátory ve Schrödingerově reprezentaci

$$\left[\hat{x}, \hat{H}\right] = \frac{1}{m} i\hbar \hat{p}; \quad \left[\hat{p}, \hat{H}\right] = -i\hbar mg$$

a použitím (3.25) získáváme sadu operátorových diferenciálních rovnic

$$\frac{d\hat{x}^H(t)}{dt} = \frac{\hat{p}^H(t)}{m}; \quad \frac{d\hat{p}^H(t)}{dt} = -mg.$$

Tuto soustavu můžeme řešit stejně jako rovnice pro číselné funkce. Dospíváme tak k řešení[10]

$$\hat{p}^H(t) = -mgt + \hat{C}_1; \quad \hat{x}^H(t) = \frac{-gt^2}{2} + \frac{\hat{C}_1 t}{m} + \hat{C}_2.$$

Pokud k úloze dodáme požadavek, aby v čase $t = 0$ byly operátory polohy a hybnosti v obou reprezentacích totožné, tedy $\hat{p}^H(0) = \hat{p}_0$, $\hat{x}^H(0) = \hat{x}_0$, získáváme neurčené operátory $\hat{C}_1$, $\hat{C}_2$

$$\hat{p}^H(t) = -mgt + \hat{p}_0; \quad \hat{x}^H(t) = \frac{-gt^2}{2} + \frac{\hat{p}_0 t}{m} + \hat{x}_0.$$

Podíváme se ještě na vývoj středních hodnot. Jestliže počáteční střední hodnoty operátorů ve Schrödingerově reprezentaci měly hodnoty $\langle \hat{p} \rangle_{\psi_0} = p_0$, $\langle \hat{x} \rangle_{\psi_0} = x_0$, dostáváme známý časový vývoj operátorů v Heisenbergově reprezentaci

$$\langle \hat{p}^H(t) \rangle_\psi = p_0 - mgt, \quad \langle \hat{x}^H(t) \rangle_\psi = x_0 + \frac{p_0 t}{m} - \frac{1}{2} g t^2.$$

Příklad. Určete časový vývoj operátoru komponenty spinu elektronu v homogenním magnetickém poli $\vec{B} = (0, 0, B)$. Gravitaci neuvažujte. Užijte Heisenbergovu reprezentaci.

Hamiltonián nabité částice v magnetickém poli má tvar

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B},$$

kde $\hat{\vec{\mu}}$ představuje operátor vlastního magnetického momentu (spinu), jenž je definován pomocí operátoru komponent spinu $\hat{\vec{s}}$

$$\hat{\vec{\mu}} = \frac{\mu \hat{\vec{s}}}{s}; \quad \hat{\vec{s}} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3).$$

Magnetický moment μ nabývá pro elektron hodnoty $\mu = \frac{e\hbar}{2m_e c}$ a spin $s = 1/2$. $\hat{\sigma}_i$ představují Pauliho matice

[10] Místo číselných integračních konstant získáváme však koeficienty operátorové.

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{3.32}$$

jež vyhovují komutačním relacím

$$\left[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\right] = 2i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k.$$

Hamiltonián našeho systému je možno zapsat

$$\hat{H} = -\frac{\mu_0 \hbar B}{2}\hat{\sigma}_3.$$

Zajímají nás operátory $\hat{\sigma}_i^H$, k jejichž určení užijeme (3.25). Využitím komutačních relací Pauliho matic získáváme rovnice

$$\frac{d\hat{\sigma}_1^H(t)}{dt} = \mu_0 B\hat{\sigma}_2^H(t), \quad \frac{d\hat{\sigma}_2^H(t)}{dt} = -\mu_0 B\hat{\sigma}_1^H(t), \quad \frac{d\hat{\sigma}_3^H(t)}{dt} = 0,$$

jež doplněním počátečních podmínek $\hat{\sigma}_i^H(0) = \hat{\sigma}_i$ (podmínka stejného tvaru operátorů v Heisenbergově a Schrödingerově reprezentaci v počátečním čase) vede na řešení

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_1^H(t) &= \hat{\sigma}_1 \cos(\mu_0 Bt) + \hat{\sigma}_2 \sin(\mu_0 Bt), \quad \hat{\sigma}_3^H(t) = \hat{\sigma}_3, \\ \hat{\sigma}_2^H(t) &= -\hat{\sigma}_1 \sin(\mu_0 Bt) + \hat{\sigma}_2 \cos(\mu_0 Bt). \end{aligned}$$

Pokud vektor projekce spinu $\vec{p}$ měl v počátečním čase tvar

$$\vec{p} = (p_1, p_2, p_3) = (\langle\hat{\sigma}_1\rangle_{|\psi_0\rangle}, \langle\hat{\sigma}_2\rangle_{|\psi_0\rangle}, \langle\hat{\sigma}_3\rangle_{|\psi_0\rangle}), \quad \|\vec{p}\| = 1,$$

je vývoj středních hodnot $\langle\hat{\sigma}_i^H(t)\rangle_\psi$ (a tedy i vývoj projekce spinu $\vec{p}(t)$) určen rovnicemi

$$\begin{aligned} \langle\hat{\sigma}_1^H(t)\rangle_\psi &= p_1 \cos(\mu_0 Bt) + p_2 \sin(\mu_0 Bt), \\ \langle\hat{\sigma}_2^H(t)\rangle_\psi &= -p_1 \sin(\mu_0 Bt) + p_2 \cos(\mu_0 Bt), \\ \langle\hat{\sigma}_3^H(t)\rangle_\psi &= p_3. \end{aligned}$$

Vlivem magnetického pole tedy dochází k precesi spinu elektronu.

Příklad. Mějme elektron v rotujícím magnetickém poli $\vec{B} = (B_1 \cos(\omega t), B_1 \sin(\omega t), B_0)$. Určete jeho stav v libovolném čase. Magnetické pole je dostatečně silné, aby bylo možné gravitaci zanedbat. Užijte Diracovu reprezentaci.

Hamiltonián má tvar (viz předchozí příklad)

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = -\frac{\mu_0 \hbar B_0}{2}\hat{\sigma}_3 - \frac{\mu_0 \hbar B_1}{2}\left[\cos(\omega t)\hat{\sigma}_1 + \sin(\omega t)\hat{\sigma}_2\right].$$

Pro užití Diracovy reprezentace oddělíme časově nezávislou část $\hat{H}$ (stejnou jako v minulém příkladě) od časově závislé:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\mu_0 \hbar B}{2}\hat{\sigma}_3; \quad \hat{V}(t) = -\frac{\mu_0 \hbar B_1}{2}\left[\cos(\omega t)\hat{\sigma}_1 + \sin(\omega t)\hat{\sigma}_2\right]. \tag{3.33}$$

Časový vývoj stavu v Diracově reprezentaci je určen rovnicí (3.30). Potřebujeme tedy určit operátor $\hat{V}^D(t)$, k čemuž máme dvě možnosti. Použít rovnost (3.31) a získat tak časovou derivaci $\frac{d}{dt}(\hat{V}^D(t))$. To však kvůli vlastní časové závislosti $\hat{V}(t)$ nedá nijak elegantní rovnici, navíc jsme tak již postupovali v předchozích dvou příkladech. Užijeme proto nyní přímo definice transformace (3.29a) k nalezení $\hat{V}^D(t)$. Musíme tedy určit unitární operátoru $\hat{U}_0(t)$. Zjednodušme jeho definici (3.27) volbou $t_1 = 0$

$$\hat{U}_0(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right) = \exp\left(i\frac{\mu_0 B_0}{2}\hat{\sigma}_3 t\right).$$

Využijeme vztahu dokazovaného v zimním semestru

$$\exp\left(i\alpha\vec{n}\cdot\hat{\vec{\sigma}}\right) = \cos(\alpha)\mathbb{1} + i\sin(\alpha)\vec{n}\cdot\hat{\vec{\sigma}},$$

kde $\alpha \in \mathbb{C}$, $\|\vec{n}\| = 1$, $\hat{\vec{\sigma}} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$ a $\hat{\sigma}_i$ představuje Pauliho matice (3.32). Jeho použitím dostáváme

$$\hat{U}_0(t) = \begin{pmatrix} \exp\left(i\frac{\mu_0 B_0}{2}t\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-i\frac{\mu_0 B_0}{2}t\right) \end{pmatrix}.$$

Interakční hamiltonián $\hat{V}(t)$ (viz (3.33)) je možno rovněž zapsat maticově

$$\hat{V}(t) = -\frac{\mu_0 \hbar B_1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \exp(-i\omega t) \\ \exp(i\omega t) & 0 \end{pmatrix}.$$

Tím však máme vše připraveno pro určení $\hat{V}^D(t)$. Na základě (3.29b) můžeme psát

$$\begin{aligned}\hat{V}^D(t) &= \hat{U}_0^\dagger(t)\hat{V}(t)\hat{U}_0(t) = \\ &= -\frac{\mu_0\hbar B_1}{2}\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\mu_0 B_0}{2}t} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\mu_0 B_0}{2}t} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{i\frac{\mu_0 B_0}{2}t} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\mu_0 B_0}{2}t} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

a po roznásobení matic

$$\hat{V}^D(t) = -\frac{\mu_0\hbar B_1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \exp\left[-i(\omega+\mu_0 B_0)t\right] \\ \exp\left[i(\omega+\mu_0 B_0)t\right] & 0 \end{pmatrix}.$$

Stav částice se spinem je popsán vektorem $|\psi^D(t)\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_1(t)\rangle \\ |\psi_2(t)\rangle \end{pmatrix}$. Rovnice (3.30) přechází po dosazení na soustavu

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial|\psi_1\rangle}{\partial t} &= -\frac{\mu_0\hbar B_1}{2}\exp\left[-i(\omega+\mu_0 B_0)t\right]|\psi_2\rangle, \\ i\hbar\frac{\partial|\psi_2\rangle}{\partial t} &= -\frac{\mu_0\hbar B_1}{2}\exp\left[i(\omega+\mu_0 B_0)t\right]|\psi_1\rangle. \end{aligned}$$

Tím tento příklad i kapitolu uzavřeme.

4 Matice hustoty a smíšené kvantové stavy

Ve fyzice se setkáváme se situacemi, kdy nelze experimentálně získat úplnou informaci o stavu systému v daný okamžik (např. z důvodu příliš velkého počtu částic, nedostatečné kvality aparatury, či z nemožnosti dostatečně rychle zpracovat získaná data). V takovém případě se uchylujeme ke statistickému popisu. Nejprve si připomeneme, jak ke statistickému popisu přistupuje klasická hamiltonovská fyzika.

Ve statistické fyzice je stav systému popsán funkcí $\rho : TM \mapsto \mathbb{R}_0^+$, nazývanou **hustota pravděpodobnosti**, určující pravděpodobnostní rozdělení na fázovém prostoru. Tato funkce musí splňovat normalizační podmínku

$$\int_{TM} \rho(x,p)dx\,dp = 1.$$

Střední hodnota pozorovatelné A popsané funkcí $a(x,p)$ ve stavu určeném hustotou pravděpodobnosti ρ je dána

$$\langle A\rangle_\rho = \int_{TM} a(x,p)\rho(x,p)\,dx\,dp.$$

Vývoj hustoty pravděpodobnosti v čase řídí rovnice kontinuity (viz [6])

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{3N}\left[\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho\frac{dx_k}{dt}\right) + \frac{\partial}{\partial p_k}\left(\rho\frac{dp_k}{dt}\right)\right].$$

Za předpokladu, že pohyb každého bodu fázového prostoru je určen Hamiltonovými pohybovými rovnicemi

$$\frac{dx_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_k},$$

plyne odsud pro časový vývoj hustoty pravděpodobnosti Liouvillova věta

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \sum_{k=1}^{3N}\left[\frac{\partial H}{\partial x_k}\frac{\partial\rho}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial\rho}{\partial x_k}\right] = \{H,\rho\}. \tag{4.1}$$

Poznámka. Nenechme se zmást formální podobností s časovým vývojem časově nezávislé pozorovatelné, určeným též Poissonovou závorkou, ovšem s opačným znaménkem:

$$\frac{da}{dt} = \{a,H\} = -\{H,a\}.$$

V analogii očekáváme, že kvantové hustoty pravděpodobnosti budou operátory na $\mathscr{H}$, které každému stavu přiřadí pravděpodobnost, že se v něm systém nachází.

V dalším odvozování uvažujeme konečný počet normalizovaných stavů $(|\psi_m\rangle)_{m=1}^n$, ve kterých se systém může nacházet. Zobecnění výsledků, jež obdržíme, na spočetný počet stavů se formulují jako postuláty.

Stav systému v kvantové mechanice je popsán vektorem $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$. Tomuto stavu je možno přiřadit projektor $\hat{P}_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi|$. Projektor $\hat{P}_{|\psi\rangle}$ má tu vlastnost, že stav $|\psi\rangle$ (a libovolný jeho komplexní násobek)[11] je jeho vlastním stavem příslušejícím vlastnímu číslu 1 a že stavy ortogonální na $|\psi\rangle$ patří do nulového prostoru (jádra). To budeme interpretovat, že stavu $|\psi\rangle$ je přiřazena pravděpodobnost 1 a všem stavům kolmým na $|\psi\rangle$ nulová.

Pokud stav systému neznáme s jistotou, ale víme, že s pravděpodobností p_m mu lze přiřadit vektor $|\psi_m\rangle$, mohli bychom zobecněním stejné myšlenky tuto vědomost vyjádřit operátorem

$$\hat{\rho} = \sum_{m=1}^{n} p_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m|. \tag{4.2}$$

Ukážeme, že takto sestavený operátor skutečně obsahuje veškeré informace pro popis kvantového systému a předpovědi výsledků měření.

Definice 4.1. Buď $\hat{B}$ operátor na $\mathscr{H}$, $(|i\rangle)_{i\in\mathscr{I}}$ ortonormální báze $\mathscr{H}$. Potom definujeme **stopu operátoru** $\hat{B}$ dle předpisu

$$\operatorname{Tr}\hat{B} = \sum_i \langle i|\hat{B}|i\rangle.$$

S touto definicí je podmínku normalizace

$$\sum_{m=1}^{n} p_m = 1$$

možno na úrovni $\hat{\rho}$ vyjádřit jako $\operatorname{Tr}\hat{\rho} = 1$.

Se stopou operátoru se v této kapitole budeme setkávat často, shrňme proto (bez důkazů) několik jejích základních vlastností. Ty platí pro třídu tzv. jaderných operátorů, o kterých se přednáší více ve funkcionální analýze; v případech, které budou pro nás relevantní, nejsou předpoklady limitujícím faktorem.

1. Stopa je lineární: $\operatorname{Tr}\left(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B}\right) = \alpha\operatorname{Tr}\hat{A} + \beta\operatorname{Tr}\hat{B}$.

2. Hodnota $\operatorname{Tr}\hat{B}$ nezávisí na výběru báze $(|i\rangle)$, jinými slovy je též invariantní vůči podobnostní transformaci $\hat{B} \mapsto \hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1}$. Volbou báze, v níž je operátor diagonalizovatelný, snadno odvodíme $\operatorname{Tr}\hat{B} = \sum\sigma(\hat{B})$, kde sčítání bere v úvahu algebraické násobnosti.[12]

[11] Obzvlášť si všimněme, že takto přiřazený projektor nezávisí na výběru fáze, tedy $\hat{P}_{|\psi\rangle} = \hat{P}_{e^{i\varphi}|\psi\rangle}$, $\forall\varphi \in \mathbb{R}$.

[12] Připomeňme, že další známý invariant podobnostních transformací, determinant, je zase roven součinu všech hodnot spektra.

3. Pravidlo **cyklické záměny**: $\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{A})$. To platí, i pokud operátory $\hat{A}$, $\hat{B}$ zobrazují mezi různými Hilbertovy prostory (například pokud odpovídají obdélníkovým maticím) a dokonce i pro bra, resp. kety. V případě součinu více operátorů platí v libovolném uzávorkování, např. $\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{Tr}\big((\hat{A}\hat{B})\hat{C}\big) = \mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B})$, ne však $\mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{B}\hat{A})$.

Věta 4.2. Nechť $\hat{\rho}$ je operátor definovaný dle (4.2) s pravděpodobnostmi $p_m > 0$. Pak pro každé $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ platí

$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0.$$

(tedy $\hat{\rho}$ je pozitivní operátor).

Důkaz. Dle definice $\hat{\rho}$ platí

$$\hat{\rho}|\psi\rangle = \sum_{m=1}^{n} p_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m|\psi\rangle.$$

Vynásobením této rovnosti zleva bra $\langle\psi|$ dostáváme

$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle = \sum_{m=1}^{n} p_m |\langle\psi_m|\psi\rangle|^2,$$

což je součet samých nezáporných členů. □

Operátor (4.2) je tedy pozitivní, má jednotkovou stopu a navíc (jak snadno nahlédneme z jeho definice) je samosdružený. Kvantová mechanika postuluje, že každý takový operátor popisuje možný fyzikální stav systému.

Definice 4.3 (Postulát 1)**.** Stavy v kvantové mechanice jsou popsány operátory $\hat{\rho}$ nazývanými **matice hustoty** (operátor hustoty, statistický operátor) s vlastnostmi

(i) $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = 1$,

(ii) $\hat{\rho}$ je samosdružený ($\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$),

(iii) $\hat{\rho}$ je pozitivní ($\forall|\psi\rangle \in \mathscr{H} : \langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0$).

Matice hustoty mající hodnost rovnu jedné (což jsou právě všechny projektory na jednorozměrné podprostory $\mathscr{H}$) nazýváme **čisté stavy**. Všechny ostatní stavy nazýváme **smíšené**.

Poznámka. Podmínky $(i) + (iii)$ implikují omezenost $\hat{\rho}$.

Protože výpočet hodnosti není v obecném případě praktický, setkáváme se i s jinými ekvivalentními způsoby, jak poznat čisté stavy od smíšených, případně míru smíšenosti kvantifikovat. Základní takovou měrou je **čistota stavu** definovaná jako $\mathrm{Tr}\big(\hat{\rho}^2\big)$. Čisté stavy splňují $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}^2 = 1$ a pro všechny ostatní leží čistota v intervalu $(0, 1)$.

Čisté stavy popisuje matice hustoty tvaru $\hat{\rho}_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi|$. Přechod zpět k vektorovému vyjádření $|\psi\rangle$ je nejednoznačný, matice hustoty smazává informaci o komplexní fázi vektoru. To však fyzikálně ničemu nevadí, protože víme, že i ve vektorové formulaci kvantové mechaniky fáze (stejně jako délka vektoru) nemá vůbec žádnou fyzikální podstatu. V jistém ohledu je tak formulace pomocí matice hustoty dokonce blíže měřitelné realitě díky tomu, že tuto nejednoznačnost v popisu stavu neobsahuje.

Poznamenejme ještě, že ani v rámci projektorů není rozklad (4.2) jednoznačný: v obecném případě může existovat více různých kombinací stavů a jejich přiřazených pravděpodobností, které dávají stejné $\hat{\rho}$. Pomocí vzorců, které jsou vyjádřené prostřednictvím $\hat{\rho}$, pak takové situace není možné vzájemně od sebe poznat, jejich chování je identické.

Věnujme se nyní časovému vývoji $\hat{\rho}$. Předpokládejme, že se vývoj každého ze stavů $|\psi_m(t)\rangle$ řídí Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_m(t)\rangle = \hat{H}|\psi_m(t)\rangle, \quad \text{resp.} \quad -i\hbar\frac{d}{dt}\langle\psi_m(t)| = \langle\psi_m(t)|\hat{H} \tag{4.3}$$

a že k jiné změně směsi (např. dalšímu směšování) stavů nedochází. Časový vývoj matice hustoty $\hat{\rho}$ je tedy možno zapsat

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{m=1}^{n} p_m|\psi_m(t)\rangle\langle\psi_m(t)|$$

Zderivováním poslední rovnosti podle času a dosazením časových derivací stavů z (4.3) dostáváme

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) &= i\hbar\sum_{m=1}^{n} p_m\left[\frac{-i}{\hbar}\hat{H}|\psi_m(t)\rangle\langle\psi_m(t)| + \frac{i}{\hbar}|\psi_m(t)\rangle\langle\psi_m(t)|\hat{H}\right] = \\ &= \hat{H}\hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t)\hat{H} = \left[\hat{H},\hat{\rho}(t)\right]. \end{aligned}$$

Poznámka. V tomto případě platí přesná analogie s klasickou statistickou mechanikou, viz (4.1). Znamená to ale také to, že je zde opačné znaménko (opačné pořadí v komutátoru), než u časového vývoje operátoru v Heisenbergově obrazu (3.25)!

Definice 4.4 (Postulát 2)**.** Pro izolovaný fyzikální systém se časový vývoj matice hustoty $\hat{\rho}(t)$ řídí rovnicí[13]

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = \left[\hat{H},\hat{\rho}(t)\right]. \tag{4.4}$$

Poznámka. V soustavách, které nejsou izolované, může docházet i ke změnám pravděpodobnostního rozdělení. Pro soustavy, které mohou jednosměrně interagovat s klasickým okolím, pak existuje úplnější verze výše uvedeného vztahu, známá jako řídící rovnice (*master equation*). Lindbladova verze této rovnice je

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho} = \frac{-i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{\rho}\right] + \sum_{k=1}^{N^2-1}\gamma_k\left(L_k\hat{\rho}L_k^\dagger - \frac{1}{2}\left\{L_k^\dagger L_k,\hat{\rho}\right\}\right), \tag{4.5}$$

[13] Známá je jako *von Neumannova rovnice*.

kde N je dimenze matice hustoty $\hat{\rho}$, γ_k jsou kladné konstanty popisující sílu interakce s prostředím a L_k jsou Lindbladovy operátory, které musí být bezestopé. Je tudíž plně vyjádřitelná pomocí operátoru $\hat{\rho}$, bez nutnosti znát detaily jeho rozkladu (4.2). V tomto předmětu se jí nebudeme hlouběji věnovat.

Podívejme se nyní, jak bude potřeba upravit naše dosavadní znalosti o měření fyzikálních veličin v kvantové fyzice. Ve srovnání s minulým semestrem bude třeba přeformulovat

- pravděpodobnost naměření výsledku a pozorovatelné $\hat{A}$,
- střední hodnotu pozorovatelné $\hat{A}$ v daném fyzikálním stavu,
- změnu stavu v důsledku měření.

Ve všech případech samozřejmě platí, že můžeme výsledky spočítat v jednotlivých členech $|\psi_m\rangle$ rozkladu (4.2) a spočítat průměr vážený odpovídajícími pravděpodobnostmi. Tak budeme postupovat i při odvození očekávaných tvarů, které pak potvrdíme formou postulátů.

Mějme ortonormální bázi vektorů $(|a,k\rangle)_{k=1}^{l}$ tvořící vlastní podprostor operátoru $\hat{A}$ (přiřazeného měřitelné veličině A) příslušející jeho vlastní hodnotě a, tedy

$$\hat{A}|a,k\rangle = a|a,k\rangle \quad k = 1,\ldots,l.$$

Ze zimy víme, že pravděpodobnost $W_{\hat{A}=a,|\psi\rangle}$, že při měření pozorovatelné $\hat{A}$ na systému ve stavu $|\psi\rangle$ naměříme hodnotu a, je rovna

$$W_{\hat{A}=a,|\psi\rangle} = \sum_{k=1}^{l} |\langle\psi|a,k\rangle|^2 = \sum_{k=1}^{l} \langle\psi|a,k\rangle\langle a,k|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi\rangle,$$

kde $\hat{P}_{\hat{A}=a}$ je projekční operátor splňující

$$\hat{P}_{\hat{A}=a} = \sum_{k=1}^{l} |a,k\rangle\langle a,k| = \hat{P}^{\dagger}_{\hat{A}=a}, \quad \hat{P}_{\hat{A}=a} = \hat{P}^{2}_{\hat{A}=a}. \tag{4.6}$$

Je přirozené očekávat, že pravděpodobnost $W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}}$ naměření $\hat{A} = a$ na systému popsaného maticí hustoty $\hat{\rho}$ definované dle (4.2) bude rovna

$$W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}} = \sum_{m=1}^{n} p_m W_{\hat{A}=a,|\psi_m\rangle} = \sum_{m=1}^{n} p_m \langle\psi_m|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle.$$

K úpravě do pěknějšího tvaru si dopomůžeme následujícím trikem, který pak využijeme i do budoucna. Buď $(|i\rangle)_{i\in\mathscr{I}}$ (libovolná) ortonormální báze $\mathscr{H}$, potom

$$\begin{aligned}
W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}} &= \sum_{m=1}^{n} p_m \sum_i \langle\psi_m|i\rangle\langle i|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle && \text{(rozklad jednotky)}\\
&= \sum_{m=1}^{n}\sum_i \langle i|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle p_m \langle\psi_m|i\rangle && \text{(čísla komutují)}\\
&= \operatorname{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}\sum_{m=1}^{n}|\psi_m\rangle p_m\langle\psi_m|\right) && \text{(definice stopy a linearita)}\\
&= \operatorname{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\right) && \text{(definice } \hat{\rho}\text{).}
\end{aligned}$$

Tyto pravděpodobnosti můžeme využít k výpočtu střední hodnoty při měření operátoru $\hat{A}$ na stavu $\hat{\rho}$ (označme $\langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}}$) – využitím linearity stopy:

$$\langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} a W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}} = \operatorname{Tr}\Big(\underbrace{\textstyle\sum_{a\in\sigma(\hat{A})} a\hat{P}_{\hat{A}=a}}_{\text{spektrální rozklad }\hat{A}}\hat{\rho}\Big) = \operatorname{Tr}\left(\hat{A}\hat{\rho}\right).$$

Ke stejnému výsledku můžeme alternativně dospět i použitím vzorce pro $\langle\hat{A}\rangle_{|\psi_m\rangle}$:

$$\begin{aligned}
\langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}} &= \sum_{m=1}^{n} p_m\langle\hat{A}\rangle_{|\psi_m\rangle} = \sum_{m=1}^{n} p_m\langle\psi_m|\hat{A}|\psi_m\rangle = \sum_{m=1}^{n} p_m\sum_i\langle\psi_m|\hat{A}|i\rangle\langle i|\psi_m\rangle =\\
&= \sum_{m=1}^{n}\sum_i\langle i|\psi_m\rangle p_m\langle\psi_m|\hat{A}|i\rangle = \sum_{m=1}^{n}\operatorname{Tr}\left(p_m|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\hat{A}\right) = \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{A}\right).
\end{aligned}$$

Zbývá nám vyřešit, jak se změní matice hustoty $\hat{\rho}$, provedeme-li na systému měření pozorovatelné $\hat{A}$. Mějme čistý stav $|\psi\rangle$, na němž naměříme hodnotu a pozorovatelné $\hat{A}$. V důsledku měření přejde systém do stavu $\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi\rangle$, kde $\hat{P}_{\hat{A}=a}$ je projektor na vlastní podprostor příslušející vlastní hodnotě a (projekční postulát). Tento stav není normalizovaný, ale lze normalizovat právě tehdy, když existuje nenulová pravděpodobnost události. Fázi přiřazenou v nové normalizaci kvantová mechanika ponechává neurčenou.

Pokud výsledek a získáme při měření smíšeného stavu $\hat{\rho}$, uvažujme opět konvexní kombinaci výsledných stavů po projekci, ale s pravděpodobnostmi p_m ještě vynásobenými pravděpodobnostmi, že konkrétní stav $|\psi_m\rangle$ výsledek a vůbec dá:

$$\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} p_m\langle\psi_m|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle\frac{\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle\right)\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle\right)^{\dagger}}{\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle\right)^{\dagger}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle\right)} \tag{4.7}$$

Druhý člen (skalární součin) se pokrátí s jmenovatelem třetího díky samosdruženosti projektorů a jejich idempotenci (4.6) a zůstane

$$\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} p_m\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\hat{P}^{\dagger}_{\hat{A}=a} = \hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}.$$

Takový stav by ale nebyl správně normalizovaný. Ukazuje se, že jeho stopa je

$$\operatorname{Tr}\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a} = \operatorname{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}\right) = \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{P}^{2}_{\hat{A}=a}\right) = W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}}.$$

Důvod je jednoduchý, upravené pravděpodobnosti $p_m\langle\psi_m|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle$ vystupující v (4.7) netvoří pravděpodobností rozdělení. Jejich součtem místo jednotky je pravděpodobnost, že k měření a vůbec dojde. Celý výraz bychom tedy jí měli vydělit, protože při zkoumání stavu po měření nás už zajímají jen situace, kdy měření proběhlo úspěšně.[14] To vlastně znamená operátor $\operatorname{Tr}\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a}$ opravit vydělením jeho vlastní stopou:

$$\hat{\rho}_{\hat{A}=a} = \frac{\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a}}{\operatorname{Tr}\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a}} = \frac{\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}}{\operatorname{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}\right)}.$$

Vidíme, že všechny výsledky výše je možné vyjádřit pomocí operátoru $\hat{\rho}$ bez potřeby znalosti jeho kompozice tvaru (4.2). To shrnuje náš třetí postulát.

Definice 4.5 (Postulát 3)**.** Při měření pozorovatelné $\hat{A}$ na kvantovém stavu popsaném maticí hustoty $\hat{\rho}$ může výsledek $a \in \sigma(\hat{\rho})$ nastat s pravděpodobností

$$W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}} = \operatorname{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\right). \tag{4.8}$$

Kvantový stav v tom případě přejde na

$$\hat{\rho}_{\hat{A}=a} = \frac{\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}}{\operatorname{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}\right)}. \tag{4.9}$$

Střední hodnota pozorovatelné $\hat{A}$ odpovídající těmto výsledkům je rovna

$$\langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}} = \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) = \operatorname{Tr}\left(\hat{A}\hat{\rho}\right). \tag{4.10}$$

Formalizmus smíšených stavů nám umožňuje klást si i nový druh otázky, na který „vektorová“ kvantová mechanika nemohla nabídnout smysluplnou odpověď – jmenovitě, jak popisovat měření, u kterých výsledek nedokážeme rozlišit (např. z důvodu velkého množství měření, měření provedené jiným pozorovatelem, omezené rozlišovací schopnosti apod.) – a tím ilustrovat kvantovou operaci, u které dochází ke změnám vlastních čísel $\hat{\rho}$.

V takovém případě můžeme jednoduše matice hustoty (4.9) smísit s pravděpodobnostmi, kdy který případ nastane, danými (4.8). Výsledkem je

$$\hat{\rho}_{\hat{A}} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} \operatorname{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\right)\frac{\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}}{\operatorname{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\right)} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} \hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}. \tag{4.11}$$

[14] To jinými slovy říká, že ve výrazu (4.7) jsme správně měli použít *podmíněné* pravděpodobnosti.

Transformace (4.11) typicky vyrábí i z čistých stavů smíšené a smíšeným stavům dále snižuje čistotu. S podobnými operacemi se můžeme setkat i v jiných situacích, než při provádění kvantových měření bez zaznamenávání výsledků. Podobné transformace popisují další jevy doprovázené ztrátou kvantové koherence – vliv tepelného šumu, interakce s okolím v případě nedostatečně odizolovaného systému, ...

Příklad. Matice hustoty na $\mathscr{H} = \mathbb{C}^2$.

Matice hustoty $\hat{\rho} \in \mathbb{C}^{2,2}$ musí dle definice 4.3 splňovat tři podmínky. Při jejím hledáním přejdeme do báze $(\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3, \mathbb{1})$, kde $\hat{\sigma}_i$ jsou Pauliho matice (3.32) a $\mathbb{1}$ představuje jednotkový operátor.

Jelikož $\hat{\sigma}_i = \hat{\sigma}_i^\dagger$ a $\mathbb{1} = \mathbb{1}^\dagger$, je operátor $\hat{\rho}$ definovaný obecná lineární kombinace

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \hat{\sigma}_i + \alpha_4 \mathbb{1}, \quad \alpha_i \in \mathbb{C}$$

samosdružený, a tak splněna podmínka (ii), právě tehdy, kdy koeficienty α_i jsou reálné. Dále snadno nahlédneme, že $\operatorname{Tr} \sigma_i = 0$ a $\operatorname{Tr} \mathbb{1} = 2$. Abychom zaručili jednotkovou stopu matice hustoty $\hat{\rho}$, musí být $\alpha_4 = \frac{1}{2}$. Budeme tedy níže hledat její vyjádření $\hat{\rho}$ již jen ve tvaru

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \hat{\sigma}_i\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\alpha_3 & \alpha_1 - i\alpha_2 \\ \alpha_1 + i\alpha_2 & 1-\alpha_3 \end{pmatrix}, \tag{4.12}$$

kde bylo užito explicitních tvarů Pauliho matic (3.32) a navíc jsme pro pohodlnost přeznačili $\alpha_i \mapsto \alpha_i/2$. Zbývá nám zaručit pozitivnost $\hat{\rho}$. Snadno nahlédneme, že vlastní čísla matice (4.12) jsou rovna

$$\lambda^{(\pm)} = \frac{1 \pm \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2}}{2},$$

a tudíž je podmínkou pozitivity $\hat{\rho}$ nerovnost

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 \leq 1. \tag{4.13}$$

Poslední nerovnost tvoří množinu, jež bývá nazývána Blochovou koulí. Množina všech kvantových stavů je (i v obecnějších případech) vždy konvexní, přičemž na jejím povrchu leží čisté stavy, uvnitř potom stavy smíšené.

Předpokládejme nyní pro ilustraci čistý stav, tedy rovnost v (4.13). Ta zaručí vlastní čísla $\lambda^{(+)} = 1$ a $\lambda^{(-)} = 0$. Vektor popisující čistý stav $|\psi\rangle$ je vlastním vektorem $\hat{\rho}$ příslušející vlastnímu číslu $\lambda^{(+)} = 1$. Jeden z jeho možných tvarů je

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1-\alpha_3)}}\begin{pmatrix} \alpha_1 - i\alpha_2 \\ 1-\alpha_3 \end{pmatrix}, \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

Snadno nahlédneme, že

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2(1-\alpha_3)}\begin{pmatrix} \alpha_1 - i\alpha_2 \\ 1-\alpha_3 \end{pmatrix}(\alpha_1 + i\alpha_2, \quad 1-\alpha_3) = \hat{\rho}.$$

Zkoumejme časový vývoj matice hustoty. Předpokládejme hamiltonián $\hat{H}$ ve tvaru $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$, $E_1 \leq E_2$. Položme $\alpha_i = \alpha_i(t)$. Víme, že časový vývoj $\hat{\rho}$ se řídí von Neumannovou rovnicí (4.4), která po dosazení $\hat{H}$, $\hat{\rho}$ a po úpravě získává tvar

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\alpha}_3 & \dot{\alpha}_1 - i\dot{\alpha}_2 \\ \dot{\alpha}_1 + i\dot{\alpha}_2 & \dot{\alpha}_3 \end{pmatrix} = (E_1 - E_2) \begin{pmatrix} 0 & \alpha_1 - i\alpha_2 \\ -\alpha_1 - i\alpha_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Řešení pro $\alpha_3(t)$ je triviální. Řešení $\alpha_1(t)$, $\alpha_1(t)$ se naleze elegantně přechodem k nové funkci $z(t) = \alpha_1(t) - i\alpha_2(t)$. Časový vývoj matice hustoty $\hat{\rho} = \hat{\rho}(t)$ je pak možno zapsat

$$\hat{\rho}(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \alpha_3(0) & \left[\alpha_1(0) - i\alpha_2(0)\right] \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t\right\} \\ \left[\alpha_1(0) + i\alpha_2(0)\right] \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t\right\} & 1 - \alpha_3(0) \end{pmatrix}.$$

Dále zkusíme určit střední hodnotu energie v čase $t = 0$ ve stavu $\hat{\rho}$ v případě výše zavedených $\hat{\rho}$ a $\hat{H}$. K tomuto účelu si pojmenujeme standardní bázi v prostoru $\mathscr{H} = \mathbb{C}^2$:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ze (4.10) víme, že střední hodnota energie systému ve stavu $\hat{\rho}$ je určena

$$\langle \hat{H} \rangle_{\hat{\rho}} = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{H}\right) = \sum_{i=1}^{2} \langle i|\hat{\rho}\hat{H}|i\rangle = \frac{1}{2}\left[E_1(1 + \alpha_3) + E_2(1 - \alpha_3)\right].$$

Snadno nahlédneme $\langle \hat{H} \rangle_{\hat{\rho}} \in \langle E_1, E_2 \rangle$, neboť $\alpha_3 \in \langle -1, 1 \rangle$. Pravděpodobnost $W_{\hat{H}=E_1}$ naměření $\hat{H} = E_1$ je dle (4.8) rovna

$$W_{\hat{H}=E_1} = \mathrm{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{H}=E_1}\hat{\rho}\right) = \langle 1|\hat{\rho}|1\rangle = \frac{1}{2}(1 + \alpha_3),$$

protože $\hat{P}_{\hat{H}=E_1}$ představuje projekční operátor tvaru $\hat{P}_{\hat{H}=E_1} = |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$.

Po průchodu filtrem přechází matice hustoty $\hat{\rho}$ na novou matici $\hat{\rho}_{\hat{H}}$ podle vztahu (4.11). Přímo můžeme psát

$$\hat{\rho}_{\hat{H}} = \sum_{E=E_1,E_2} \hat{P}_{\hat{H}=E}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{H}=E} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \alpha_3 & 0 \\ 0 & 1 - \alpha_3 \end{pmatrix}.$$

Měřením energie tedy byla vytvořena stacionární matice hustoty.

Příklad. Mějme kanonický soubor kvantových jednorozměrných harmonických oscilátorů s určeným multiplikátorem $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Určete střední hodnotu energie a její rozptyl. Výsledky ověřte limitními přechody $\beta \to 0$, $\beta \to +\infty$.

Nejpravděpodobnější rozdělení $\rho(x,p)$ klasického kanonického souboru popsaného hamiltoniánem $H(x,p)$ má tvar (viz [6])

$$\rho(x,p) = A\ \exp\left\{-\beta H(x,p)\right\},$$

kde A je normalizační konstanta. Očekáváme, že kvantověmechanický soubor určený hamiltoniánem $\hat{H}$ bude popsán maticí hustoty $\hat{\rho}$ definovanou

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\operatorname{Tr} e^{-\beta\hat{H}}} e^{-\beta\hat{H}},$$

Dělením stopou $\operatorname{Tr} e^{-\beta\hat{H}}$ je zajištěna jednotková stopa $\hat{\rho}$, samosdruženost $\hat{\rho}$ plyne ze samosdruženosti $\hat{H}$ a pozitivnost $\hat{\rho}$ je evidentní z pozitivity funkce exp ve vyjádření v diagonální bázi. $\hat{\rho}$ je tedy maticí hustoty v korektním smyslu. Ze zimy víme, že soubor vlastních funkcí jednorozměrného harmonického oscilátoru $(|n\rangle)_{n=0}^{+\infty}$ tvoří úplnou ortonormální bázi $\mathscr{H}$. Navíc

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle.$$

Střední hodnotu energie určíme ze (4.10)

$$\langle\hat{H}\rangle_{\hat{\rho}} = \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{H}\right) = \frac{1}{\operatorname{Tr} e^{-\beta\hat{H}}}\sum_{n=0}^{+\infty}\langle n|e^{-\beta\hat{H}}\hat{H}|n\rangle.$$

S operátorem v exponentu se vypořádáme provedením rozkladu dle jeho spektra, hamiltonián v sumě mimo exponent necháme působit na ket $|n\rangle$

$$\langle\hat{H}\rangle_{\hat{\rho}} = \frac{1}{\sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}}\sum_{n=0}^{+\infty}\hbar\omega(n+\frac{1}{2})e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}. \tag{4.14}$$

Označne

$$Z(\beta) = \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}.$$

Jedná se o geometrickou řadu, jež můžeme sečíst s výsledkem

$$Z(\beta) = \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{2\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}.$$

Výraz (4.14) je možno zapsat pomocí $Z(\beta)$

$$\langle\hat{H}\rangle_{\hat{\rho}} = \frac{1}{Z(\beta)}\frac{-dZ(\beta)}{d\beta}$$

a tím snadno najít hledanou střední hodnotu

$$\langle \hat{H} \rangle_{\hat{\rho}} = \frac{\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \to \begin{cases} \xrightarrow{\beta\to 0\,(T\to+\infty)} +\infty, \\ \xrightarrow{\beta\to+\infty\,(T\to 0)} \frac{\hbar\omega}{2}. \end{cases}$$

Podobnými úpravami získáme vyjádření pro rozptyl energie

$$(\Delta\hat{H})^2_{\hat{\rho}} = \langle \hat{H}^2 \rangle_{\hat{\rho}} - \langle \hat{H} \rangle^2_{\hat{\rho}} = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 \frac{1}{\sinh^2\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \to \begin{cases} \xrightarrow{\beta\to 0\,(T\to+\infty)} +\infty, \\ \xrightarrow{\beta\to+\infty\,(T\to 0)} 0. \end{cases}$$

Zamyšlení nad získanými limitními výsledky ponecháme na čtenáři.

4.1 Složené systémy a provázané stavy

Mohlo by se zdát, že smíšené stavy vůbec nemusíme uvažovat v situacích, kdy máme přesné informace o systému, není tomu ale tak.

Připomeňme si nejprve poslední zbývající postulát kvantové mechaniky. Ten je ve formulaci pomocí matice hustoty jen málo odlišný od zimy:

Definice 4.6 (Postulát 4)**.** Pro fyzikální systémy A, B s Hilbertovými prostory $\mathscr{H}_A$, $\mathscr{H}_B$ přiřazujeme složenému systému AB Hilbertův prostor $\mathscr{H}_{AB}$. Jestliže pak systémy A a B jsou nezávisle připraveny ve stavech ρ^A, ρ^B, přiřazujeme složenému systému stav

$$\rho^{AB} = \rho^A \otimes \rho^B. \tag{4.15}$$

Složené stavy můžeme dále superponovat a nyní i míchat. Žádná verze postulátu ale nemluví o opačné úloze – jak zredukovat stav složeného systému na stav, který bychom mohli přiřadit jedné jeho součásti a využívat k počítání výsledků měřených pouze na ní.

Uvažujme pro příklad Hilbertův prostor $\mathbb{C}^4$ daný složením dvou identických systémů, každý s Hilbertovým prostorem $\mathbb{C}^2$ ($\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ je izomorfní $\mathbb{C}^4$), 4 vektory báze takového prostoru označíme

$$\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}, \tag{4.16}$$

což je zkrácený zápis tenzorového součinu, zavedený už v zimě.

Zkoumejme lineární superpozici

$$|\psi_1\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}. \tag{4.17}$$

Na tomto stavu je zajímavé, že pokud změříme jeden z podsystémů, způsobíme kolaps celé vlnové funkce, po němž víme s jistotu také to, v jakém stavu je druhý podsystém (to vede na EPR paradox,[15] diskuzi mezi EPR trojicí a N. Bohrem doporučujeme

[15] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen 1935

jako zajímavou četbu). To je důsledkem skutečnosti, že neexistují stavy $|a\rangle$ a $|b\rangle$ takové, aby $|\psi_1\rangle = |a\rangle|b\rangle$, jak si snadno ověříme. Stavy, které by takto šly rozložit, se nazývají **faktorizovatelné** nebo **separovatelné**. Všechny ostatní stavy, mezi které patří $|\psi_1\rangle$, se nazývají **provázané**.

(Můžeme dokonce sestavit celou novou ortonormální bázi sestávající pouze z provázaných stavů, když doplníme $|\psi_1\rangle$ o

$$|\psi_2\rangle = \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}},$$
$$|\psi_3\rangle = \frac{|10\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}},$$
$$|\psi_4\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Této čtveřici se dohromady říká Bellovy nebo bellovské stavy.)

Pro faktorizované stavy na systému složeném z podsystémů A a B je možné mluvit o stavu, ve kterém se nachází každý z podsystémů zvlášť (až na fázi, která může v tenzorovém součinu být mezi oba činitele libovolně přerozdělena). Pro provázané stavy ale podsystémům přidělit jejich vlastní stav, ze kterého by stav celého systému bylo možno zrekonstruovat, nelze. Matice hustoty však nabízí alespoň částečnou pomoc.

Označme matici hustoty složeného systému ρ^{AB}. Například pro bellovský stav $|\psi_1\rangle$ je

$$\hat{\rho}_1^{AB} = \left(\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}\right)\left(\frac{\langle 00| + \langle 11|}{\sqrt{2}}\right). \tag{4.18}$$

Připomeňme kritérium čistoty stavu pro kvadrát matice hustoty

$$\operatorname{Tr}\hat{\rho}^2 \leq 1, \tag{4.19}$$

které pro $\hat{\rho}_1^{AB}$ dá jedničku, jak má.

Pokud potřebujeme mluvit odděleně o stavu podsystému A, přiřadíme mu **redukovanou matici hustoty** $\hat{\rho}^A$, který se z $\hat{\rho}^{AB}$ získá operací zvanou **částečná stopa** přes systém B, označenou a definovanou jako

$$\hat{\rho}^A = \operatorname{Tr}_B\left(\hat{\rho}^{AB}\right),$$
$$\operatorname{Tr}_B\left(|a_1 b_1\rangle\langle a_2 b_2|\right) := |a_1\rangle\langle a_2| \operatorname{Tr}\left(|b_1\rangle\langle b_2|\right),$$

pro všechna $|a_1\rangle, |a_2\rangle \in \mathscr{H}_A$, $|b_1\rangle, |b_2\rangle \in \mathscr{H}_B$. Hodnota částečné stopy pro všechny ostatní matice hustoty se získá rozkladem do báze operátorů tvaru $|a_1 b_1\rangle\langle a_2 b_2|$ a předpokladem linearity operace Tr_B.

Takto získaný stav dává správné statistické předpovědi pro veškerá *lokální* měření na podsystému A. Navíc je kompatibilní s opačnou procedurou, kdy známe stavy podsystémů a složenému stavu přiřazujeme tenzorový součin jejich matic hustoty ($\hat{\rho}^A \otimes \hat{\rho}^B$):

$$\operatorname{Tr}_B(\rho^A \otimes \rho^B) = \rho^A.$$

Nejedná se však o reverzibilní operaci. Provázaným stavům složeného systému AB přiřadí částečné stopy přes B, resp. A smíšené stavy $\hat{\rho}^A$, resp. $\hat{\rho}^B$, pro které obecně

$$\rho^A \otimes \rho^B \neq \rho^{AB}.$$

Konkrétně výsledek levé strany předchozí rovnice bude v těchto případech smíšený stav, přestože jsme začínali s čistým.

Vraťme se nyní k našemu bellovskému stavu (4.17) a určeme pro ilustraci redukovanou matici hustoty podsystému A (pro B vychází stejně). Po krátkém výpočtu získáme

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_1^A &= \mathrm{Tr}_B\left(\hat{\rho}_1^{AB}\right) = \mathrm{Tr}_B\left(\frac{|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 11|}{2}\right) \\ &= \frac{|0\rangle\langle 0|\langle 0|0\rangle + |1\rangle\langle 0|\langle 0|1\rangle + |0\rangle\langle 1|\langle 1|0\rangle + |1\rangle\langle 1|\langle 1|1\rangle}{2} \\ &= \frac{1}{2}\mathbb{1}.\end{aligned}$$

A jelikož stopa jednotkové matice ve dvourozměrném systému je 2, pro získaný stav najdeme čistotu

$$\mathrm{Tr}\left((\hat{\rho}_1^A)^2\right) = \frac{1}{2} \leq 1,$$

takže jsme dostali smíšený stav z čistého. Jedná se dokonce o nejvíce smíšený stav, jaký je na dvourozměrném stavovém prostoru možný: pro libovolné binární měření dává pravděpodobnost $1/2$ pro oba výsledky. Odsud vidíme, že smíšené stavy mají v kvantové mechanice využití i bez statistické neurčitosti.

Čistotu redukovaného stavu (za předpokladu čistého stavu složeného systému) můžeme brát jako možnou míru provázanosti dvou podsystémů. V rámci daného tenzorového rozkladu systému na podsystémy je provázanost stavu nezávislá na volbě jejich jednotlivých bází. To je evidentní z nezávislosti částečné stopy na volbě báze systému, přes nějž ji sčítáme, a nezávislosti čistoty na volbě báze druhého.

5 Přibližné metody v kvantové mechanice

5.1 WKB aproximace

Této metody[16] se v matematické fyzice užívá při hledání přibližného tvaru spektra a vlastních funkcí hamiltoniánu jednorozměrného systému v x-reprezentaci. Předpokládáme tedy

$$\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}, dx), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\times .$$

Spektrum hamiltoniánu $\hat{H}$ je určeno hodnotami E splňujícími

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{5.1}$$

Uvažujme nyní konkrétní hodnotu E nejprve jako klasickou hodnotu energie systému. Řešení rozdělíme na tři části:

I. klasická oblast, ve které $E \gg V(x)$, tedy $T = E - V(x) \gg 0$,

II. klasicky nedostupná oblast, kde $V(x) \gg E$,

III. přechodová oblast, kde hodnota energie je s potenciálem srovnatelná.

Očekávání je takové, že v oblasti *I* se bude částice chovat semiklasicky, jako superpozice postupných vln odpovídajících klasické (lokální) hodnotě hybnosti. V oblasti *II* by měl být výskyt potlačen a případy *III* by měly obě situace hladce napojovat. Potenciálových jam *I*, oddělených potenciálovými valy, můžeme uvažovat i více, prozatím zůstaneme u jedné. Toto rozdělení pro jednu potenciálovou jámu ilustruje obrázek 1.

Klasická oblast

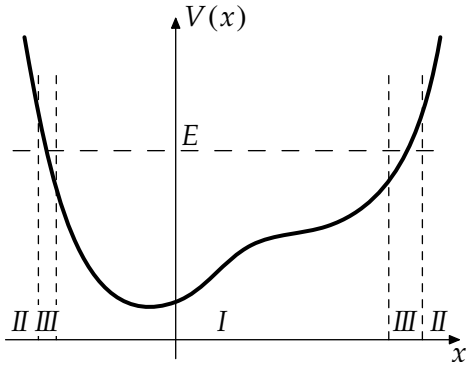
Při hledání vlastní funkce hamiltoniánu užitím WKB aproximace začneme na oblasti *I*, kde řešení předpokládáme tvaru vlny

$$\psi(x) = A(x)e^{i\varphi(x)}.$$

O amplitudě $A(x) \in \mathbb{R}$ budeme předpokládát, že je na uvažovaném intervalu nenulová a kladná, aby fáze $\varphi(x) \in \mathbb{R}$ mohla být všude dobře definována. Dosazením do (5.1) dostáváme pro naše veličiny rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(A'' + 2iA'\varphi' - A\varphi'^2 + iA\varphi''\right) = (E - V)A,$$

[16] WKB metoda je pojmenována po jejích autorech (G. Wentzel, H. Kramers, L. Brillouin), již ji společně v roce 1926 vyvinuli pro přibližné řešení diferenciálních rovnic. Kvantová teorie ji jen aplikuje.



Obrázek 1: Rozdělení souřadné osy x na intervaly klasické, klasicky nedostupné a přechodové oblasti podle hodnot potenciálové funkce $V(x)$ a volby energetické hladiny E.

v níž si všimneme, že veškerá závislost na φ vystupuje ve tvaru vazeb pro jeho derivace. Označíme proto

$$\varphi'(x) =: k(x) \quad : \quad \varphi(x) = \int k(x)dx,$$

pak

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(A'' + 2iA'k - Ak^2 + iAk'\right) = (E - V)A. \tag{5.2}$$

Díky omezení na reálné hodnoty $A(x)$ a $\varphi(x)$ můžeme rovnici (5.2) rozdělit na reálnou a imaginární část. Vyřešíme nejprve imaginární:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M}\left(2A'k + Ak'\right) &= 0 \\ \frac{A'}{A} &= -\frac{k'}{2k} \\ A(x) &= Ck(x)^{-1/2} \end{aligned} \tag{5.3}$$

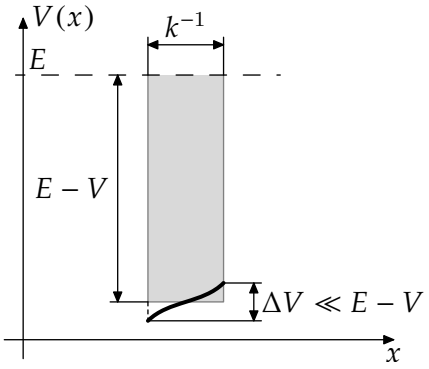
Tato vazba je za předpokladu, že vlnová funkce na intervalu I neprotne nulu, přesná.

Reálná část má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(A'' - Ak^2\right) = (E - V)A. \tag{5.4}$$

Sem bychom mohli dosadit z (5.3) a zkoušet řešit čistě pro $k(x)$. Rovnice se však výrazně zjednodušuje pro potenciály, které se v proměnné x příliš prudce nemění. Konkrétně budeme předpokládat, že na rozměrové škále dané okamžitou hodnotou $1/k(x)$ ($k(x)$ má funkci vlnového čísla) se dostupná kinetická energie $E - V(x)$ změní zanedbatelně vůči své střední hodnotě (viz obrázek 2) a tento předpoklad přeneseme i na $A(x)$ s tím, že platnost tohoto kroku oprávníme zpětně po dořešení. V j-tém řádu Taylorova rozvoje

$$A^{(j)}(x)\left(\frac{1}{k(x)}\right)^j \ll A(x), \tag{5.5}$$



Obrázek 2: Ilustrace předpokladu pomalého vývoje $V(x)$ (přesněji efektivní kinetické energie $E - V(x)$) vzhledem ke $k(x)$. Jestliže platí $\Delta V \ll E - V$, můžeme potenciál na intervalu délky k^{-1} nahradit konstantou.

konkrétně pro druhý řád

$$\frac{A''(x)}{k(x)^2} \ll A(x). \tag{5.6}$$

To nám umožní v (5.4) zanedbat první člen a zbytek rovnice lze vykrátit A. To ponechá jen triviální rovnost

$$k(x)^2 = \frac{2M}{\hbar^2}(E - V(x)). \tag{5.7}$$

Potřebujeme ale oprávnit poslední předpoklad pro $A(x)$, který nám toto zanedbání umožnil. Vyjádříme-li $A(x)$ pomocí (5.3) a (5.7), získáváme $A''(x)$ ve tvaru

$$A'' = \left(\frac{V''}{4(E-V)} + \frac{V'^2}{4(E-V)} + \frac{V'^2}{4^2(E-V)^2} \right) A,$$

vidíme tedy, že pokud srovnání tvaru (5.5) platí pro funkci $E - V(x)$, tedy pro $j = 1$ a pro $j = 2$

$$\frac{V'}{k} \ll E - V, \quad \frac{V''}{k^2} \ll E - V,$$

plyne odsud také (5.6).

Rovnice (5.7) tedy spolu s (5.3) určují vlnovou funkci na intervalu I, která se chová jako postupná vlna, jejíž vlnové číslo odpovídá de Broglieho vlnovému číslu pro hybnost spočítanou z kinetické energie $E - V(x)$,

$$k_{\mathrm{dB}} = \frac{2\pi}{\lambda_{\mathrm{dB}}} = \frac{p}{\hbar} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2M(E-V)},$$

a jejíž amplituda je vyšší (nižší) v místech pomalejší (rychlejší) oscilace.[17] Nezapomínejme, že (5.7) má dvě řešení lišící se znaménkem, které dávají postupné vlny ve dvou

[17] To je intuitivní: hustota pravděpodobnosti se chová jako převrácená hodnota $k(x)$, tedy přeneseně jako převrácená hodnota rychlosti, kterou by klasická částice daným bodem procházela.

směrech. Obecné řešení I díky linearitě (5.1) bude libovolná jejich superpozice

$$\psi_I(x) = \frac{C_1}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(i \int k(x)dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(-i \int k(x)dx\right) \tag{5.8}$$

či ekvivalentně

$$\psi_I(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int k(x)dx + \varphi_0\right) \tag{5.9}$$

pro

$$k(x) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2M\big(E - V(x)\big)}.$$

Klasicky nedostupná oblast

V oblasti II použijeme analytické prodloužení dřívějších výsledků. Vyjdeme z rovnice (5.7), která pro $V(x) > E$ přiřazuje $k(x)$ ryze imaginární hodnotu. Přeznačíme tedy

$$\kappa(x)^2 = -k(x)^2 = \frac{2M}{\hbar^2}\big(V(x) - E\big) \quad (> 0)$$

a do vzorce (5.3) dosadíme $k(x) = i\kappa(x)$. Tím okamžitě dostáváme exponenciálně rostoucí nebo klesající řešení

$$\psi_{II}(x) = \frac{\tilde{C}_1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(\int \kappa(x)dx\right) + \frac{\tilde{C}_2}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(-\int \kappa(x)dx\right) \tag{5.10}$$

Přechodová oblast

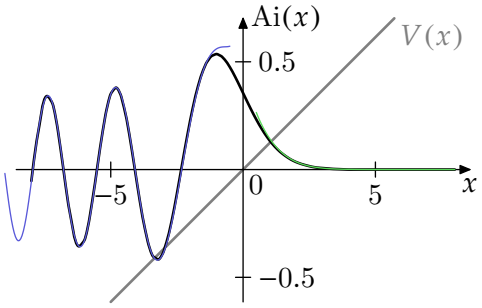
Stejný trik nemůžeme využít v oblasti III, protože v ní nemůže být splněna podmínka $|\Delta V(x)| \ll |E - V(x)|$ (situaci dále nenapomáhá, že amplituda i vlnová délka divergují, jak $V(x) \to E^-$). Pro dořešení úlohy na těchto kritických úsecích potřebujeme uvažovat $V(x)$ včetně jeho změn podél x.

WKB aproximace předpokládá, že rozdělení na oblasti I, II, III lze provést tak, že v přechodových oblastech lze potenciál $V(x)$ dobře aproximovat úsečkou. Vyřešme tedy „kanonický“ tvar

$$-\psi''(x) + x\psi(x) = 0.$$

do kterého se vhodnou transformací nezávislé proměnné dá (5.1) vždy převést.[18]

[18] Je potřeba trasformací $x \mapsto x - x_0$ bod obratu posunout do $x = 0$, volbou hladiny nulové energie $E = 0$ posunout odpovídajícím způsobem vertikálně potenciálovou funkci $V(x)$ a nakonec škálováním $x \mapsto \alpha x$ opravit konstanty. Hodnota neznámé funkce $\psi(x)$ zůstane zachována. Pozor na to, že v jednom bodě obratu bude potřeba $\alpha > 0$ a ve druhém $\alpha < 0$.



Obrázek 3: Graf Airyho funkce $\mathrm{Ai}(x)$ a jejích aproximací pro kladná a záporná x. Slabší čarou potenciálová funkce (v nesouvisejících jednotkách; voleno $E = 0$), jíž by takové řešení odpovídalo.

Tuto rovnici řeší libovolná lineární kombinace speciálních **Airyho funkcí** $\mathrm{Ai}(x)$ a $\mathrm{Bi}(x)$. Obrázek 3 ukazuje graf funkce $\mathrm{Ai}(x)$ a jejích dvou aproximací platných pro $x \ll 0$ a $x \gg 0$:

$$\begin{aligned} \mathrm{Ai}(x) &\overset{x\to-\infty}{\approx} \frac{1}{\sqrt{\pi}(-x)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(-x)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right), \\ \mathrm{Ai}(x) &\overset{x\to+\infty}{\approx} \frac{1}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right). \end{aligned} \tag{5.11}$$

Druhá bázová funkce má podobné chování pro záporná x, ale na kladné poloose se chová jako kladná exponenciála a diverguje.

Vidíme, že limitní tvary Airyho funkce jsou aplikovatelné již velmi blízko nuly, tedy přechodovou oblast stačí volit relativně úzkou. Srovnejme navíc tvary aproximací (5.11) s řešeními (5.9) a (5.10) pro odpovídající „potenciál“

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2M}x.$$

a $E = 0$. Tehdy pro $x < 0$, resp. $x > 0$ získáváme

$$k(x) = \sqrt{-x}, \quad \text{resp.} \quad \kappa(x) = \sqrt{x}.$$

Odpovídající integrály vystupující v (5.9), resp. (5.10) dávají

$$\int k(\tilde{x})d\tilde{x} = -\frac{2}{3}(-x)^{\frac{3}{2}} + c, \quad \int \kappa(\tilde{x})d\tilde{x} = \frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}} + c,$$

což jsou členy objevující se na stejných pozicích v (5.11), dokonce i faktor $1/\sqrt{k(x)} = (-x)^{-1/4}$, resp. $1/\sqrt{\kappa(x)} = x^{-1/4}$ souhlasí. Vidíme tedy, že vhodnou volbou konstant C, $\tilde{C}_1$, $\tilde{C}_2$, φ_0 bude i v obecném případě snadné řešení oblastí *I* i *II* na odpovídajícím způsobem posunutou a protaženou funkci $\mathrm{Ai}(x)$ hladce napojit.

Airyho funkce si pro většinu praktických výpočtů nemusíme pamatovat, postačí z pozorování výše vyextrahovat **propojovací formule**:

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\exp\left(-\int_{x_o}^{x}\kappa(x)dx\right) \quad\leftrightarrow\quad \frac{2}{\sqrt{k(x)}}\sin\left(\int_{x}^{x_o}k(x)dx+\frac{\pi}{4}\right) \tag{5.12a}$$

a podobně z asymptotiky Bi bychom získali

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\exp\left(+\int_{x_o}^{x}\kappa(x)dx\right) \quad\leftrightarrow\quad \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\cos\left(\int_{x}^{x_o}k(x)dx+\frac{\pi}{4}\right). \tag{5.12b}$$

(Oba vzorce platí pro potenciál rostoucí napravo od bodu obratu x_o, v opačném případě platí s obrácenými mezemi všech integrálů.)

Napojení vzorců a vznik kvantizační podmínky

Od řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice (5.1), aby byla vlastními funkcemi hamiltoniánu, vyžadujeme, aby byla normalizovatelná. Limitně tedy pro $x \to \pm\infty$ musí klesat k nule, což pro první klasicky nedostupnou oblast z obrázku 1 umožňuje pouze člen (5.10) s kladnou exponenciálou a pro druhou se zápornou. Podívejme se, co to bude znamenat při napojování částečných řešení *I*, *II*, *III* do úplného řešení:

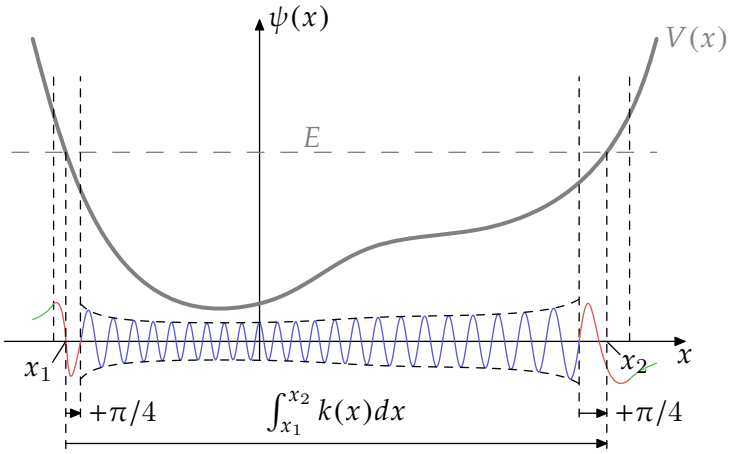
Začneme v první nedostupné oblasti, kde volíme v (5.10) $\tilde{C}_2 = 0$. Poté použijeme propojovací vzorec (5.12a) (s obrácenými mezemi) a napravo od bodu obratu získáváme asymptotiku

$$\frac{2\tilde{C}_1}{\sqrt{k(x)}}\sin\left(\int_{x_1}^{x}k(\tilde{x})d\tilde{x}+\frac{\pi}{4}\right)$$

v důsledku relací (5.11). Ve střední oblasti *I* tedy volíme $C = 2\tilde{C}_1$ a $\varphi_0 = \pi/4$. Přechod mezi exponenciálním a sinusovým řešením je (oproti integraci od bodu obratu x_1) doprovázen fázovým zpomalením o $\pi/4$. Stejnou funkci pak budeme chtít ve druhém bodě obratu x_2 napojit opět na exponenciálu klesající do $x \to +\infty$, na čemž dojde k dalšímu zpomalení o $\pi/4$. Na intervalu $\langle x_1, x_2\rangle$ vlnová funkce získá celkovou fázi

$$\int_{x_1}^{x_2}k(x)dx + 2\times\frac{\pi}{4},$$

která musí být celočíselným (a zřejmě přirozeným) násobkem π, aby nějaký (kladný nebo záporný) násobek pravé strany (5.11) šel se získanou funkcí v oblasti *I* dát do rovnosti. Vzhledem k tomu, že součástí předpisu (5.7) pro funkci $k(x)$ je energie E, dostáváme podmínku, která může platit jen pro některé speciální hodnoty volby E a pro ostatní vede k nenormalizovatelné funkci $\psi(x)$ – tedy *kvantizační podmínku* uvažovaného systému. Příklad správného navázání pro vhodně zvolenou energii E ukazuje obrázek 4.



Obrázek 4: Příklad vlnové funkce nalezené WKB aproximací pro potenciálovou funkci z obrázku 1. Modrý, resp. zelený, resp. červený graf ukazují části sinusového, resp. exponenciálního, resp. přechodového řešení. Vytažena je také amplitudová část řešení (5.9) klasické oblasti. Vzorce ve spodní části ukazují příspěvky k fázi oscilací v celém intervalu mezi body obratu x_1 a x_2.

Věnujme se významu integrálu

$$\int_{x_1}^{x_2} k(x)dx = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big)}\,dx = \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx,$$

kde $p(x)$ je klasická hybnost vymezená kinetickou energií zbývající částici z celkové energie E v místě x po odečtení potenciální složky $V(x)$. Integrál této veličiny mezi body obratu známe z Teoretické fyziky jako polovinu **redukované akce** S_0. Podmínku

$$\int_{x_1}^{x_2} k(x)dx + \frac{\pi}{2} = n\pi, n \in \mathbb{N}, \quad \text{příp.} \quad \int_{x_1}^{x_2} k(x)dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi, n \in \mathbb{N}_0, \tag{5.13}$$

tedy můžeme ekvivalentně psát jako

$$S_0 = (2n+1)\pi\hbar = \left(n + \frac{1}{2}\right)h,$$

což je přesnější verze historické **Bohr–Sommerfeldovy** kvantizace (oproti které je navíc oprava $\frac{1}{2}$ k násobku Planckovy konstanty), používané k odhadům energetických spekter před vyvinutím dnešní podoby kvantové mechaniky. WKB aproximace tedy tento vzorec nejen opravňuje, navíc přidává tuto opravu a především doplňuje i o přibližný tvar vlnových funkcí odpovídajících získaným energiím.

Příklad. Mějme částici hmotnosti M v nekonečně hluboké potenciálové jámě. Určete WKB aproximací možné hodnoty energie. Srovnejte je s přesným výsledkem ze zimy.

Uvažujme potenciál $V(x)$ definovaný

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -a < x < a, \\ +\infty & \text{jinde.} \end{cases}$$

Body obratu částice jsou pochopitelně $x_1 = -a$ a $x_2 = a$. Dle (5.13) přípustné hodnoty energie E_n splňují

$$\int_{-a}^{a} \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2}\left(E_n - V(\tilde{x})\right)}\, d\tilde{x} = \int_{-a}^{a} \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2} E_n}\, d\tilde{x} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi,$$

což po integraci dává

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8Ma^2}\left(n + \frac{1}{2}\right)^2.$$

Energetické hladiny jsme dostali nesprávné, oproti přesnému výsledku ze zimy

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8Ma^2} n^2 \tag{5.14}$$

přebývá $\frac{1}{2}$ přičtená k n. To má snadné odůvodnění. Přesně tento faktor je oprava přidaná WKB aproximací k Bohr–Sommerfeldově tvaru kvantovací podmínky za přechodové oblasti, nicméně v našem případě žádné přechodové oblasti neexistují. Řešení musí přejít ze sinusového tvaru na $(-a, a)$ okamžitě na nulu (kterou by připravené vzorce předpověděly ve tvaru $e^{-\infty}$). Správná kvantovací podmínka tedy pro tuto situaci zní

$$\int_{x_1}^{x_2} k(x)\, dx = n\pi, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

a dává skutečně výsledek (5.14).

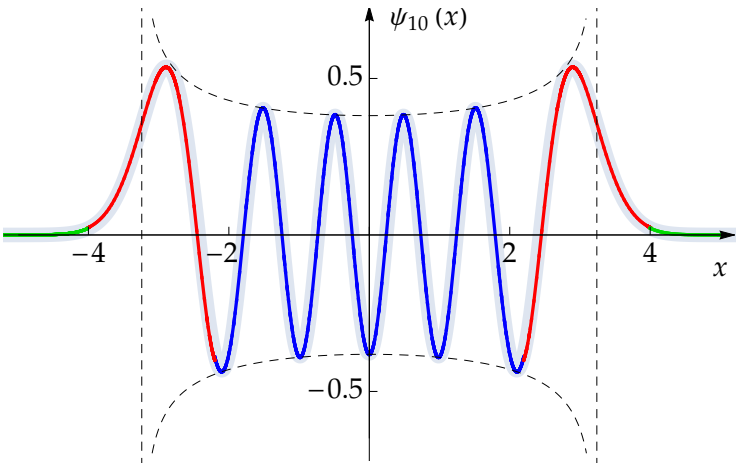
Příklad. Mějme částici hmotnosti M v poli jednorozměrného harmonického oscilátoru. Určete možné hodnoty energie WKB aproximací a porovnejte je s přesnými hodnotami.

Z klasického hamiltoniánu jednorozměrného harmonického oscilátoru nejprve určíme body obratu:

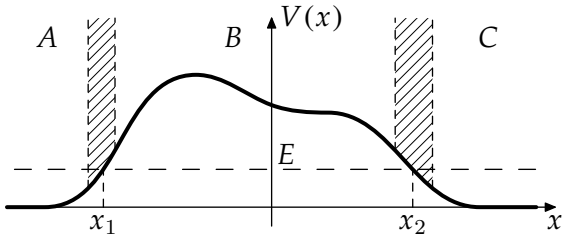
$$H(p, x) = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 x^2 \quad \Rightarrow \quad x_{1,2} = \pm\sqrt{\frac{2E}{M\omega^2}},$$

Vyjdeme opět z (5.13), kde po dosazení integračních mezí a potenciálu dostáváme pro možné hodnoty energie E_n rovnost

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2}\left(E_n - \frac{M\omega^2}{2}\tilde{x}^2\right)}\, d\tilde{x} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$$



Obrázek 5: Vlnová funkce získaná WKB aproximací pro 10. excitovaný stav kvantového harmonického oscilátoru. Barevné označení navázaných částí odpovídá obrázku 4. V pozadí širším tahem pro srovnání přesné řešení pomocí Hermitova polynomu. Vyznačena je též amplituda řešení v klasické oblasti a klasické body obratu.



Obrázek 6: Situace uvažovaná při studiu tunelového jevu

a po integraci

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

což přesně souhlasí s velmi pracně získaným výsledkem ze zimy. Srovnání vlnových funkcí ukazuje obrázek 5. Aproximace pro vlnové funkce funguje nejlépe pro vyšší excitace, pro nízké hodnoty n vychází energie správně, ale napojení nefunguje velmi hladce v důsledku nepříliš zřetelného oddělení oblastí *I* a *III* blízko dna paraboly.

Příklad. (Tunelový jev)

Mějme systém jako na obrázku 6, kde $E = \frac{p_0^2}{2M}$. Potenciál $V(x)$ má limity 0 v obou nekonečnech, takže umožňuje rovnoměrný pohyb s hybností p_0, v jisté oblasti však překračuje hodnotu E. Jedná se tak o situaci přesně opačnou k potenciálové jámě, tentokrát jsou klasicky dostupné oblasti A a C na krajích a klasicky nedostupná oblast B mezi nimi.

Abychom ukázali, že kvantová částice může bariérou protunelovat, a spočetli, s jakou pravděpodobností, budeme hledat stacionární řešení, které se asymptoticky bude

chovat v sektoru A jako lineární superpozice dopadající a odražené vlny

$$\psi_A(x) = Ae^{\frac{ip_0x}{\hbar}} + RAe^{\frac{-ip_0x}{\hbar}} \tag{5.15a}$$

a v sektoru C jako vlna prošlá

$$\psi_C(x) = TAe^{\frac{ip_0x}{\hbar}}. \tag{5.15b}$$

V sektoru B nepožadujeme žádnou asymptotiku.

Budeme postupovat zprava doleva: na pravé straně od potenciálové bariéry budeme postulovat řešení tvaru (5.8) s $C_2 = 0$ a vhodným fázovým posunem (integrační konstantou), které se asymptoticky (když $V \to 0$) chová jako

$$\psi_C(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(i\int_{x_2}^{x} k(x) + i\frac{\pi}{4}dx\right) \approx C\sqrt{\frac{\hbar}{p_0}}e^{\frac{ip_0x}{\hbar}+i\varphi_0} = \text{const.}\, e^{\frac{ip_0x}{\hbar}},$$

a kosinovou a sinovou část tohoto řešení navážeme dle propojovacích formulí (5.12a) a (5.12b) (s ozrcadlenými mezemi) na sektor B:

$$\psi_B = \frac{C}{\sqrt{\kappa(x)}}\left(\exp\left(\int_{x}^{x_2}\kappa(x)dx\right) + \frac{i}{2}\exp\left(-\int_{x}^{x_2}\kappa(x)dx\right)\right).$$

Z hlediska bodu x_1 je integrály v exponentech možné přepsat jako

$$\int_{x}^{x_2}\kappa(x)dx = \underbrace{\int_{x_1}^{x_2}\kappa(x)dx}_{\text{const.}} - \int_{x_1}^{x}\kappa(x)dx,$$

tedy

$$\psi_B = \frac{C}{\sqrt{\kappa(x)}}\left(Q\exp\left(-\int_{x_1}^{x}\kappa(x)dx\right) + \frac{i}{2Q}\exp\left(\int_{x_1}^{x}\kappa(x)dx\right)\right),$$

kde

$$Q = \exp\left(\int_{x_1}^{x_2}\kappa(x)dx\right).$$

Tento zápis je připraven k opětovnému použití propojovacích formulí, tektokrát k přechodu přes bod x_1 do oblasti A:

$$\psi_A(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}}\left(2Q\sin\left(\int_{x}^{x_1}k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{i}{2Q}\cos\left(\int_{x}^{x_1}k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right)\right)$$

Nakonec opět uvažujeme asymptotickou oblast $x \to -\infty$, kde $V \to 0$:

$$\psi_A(x) \approx C\sqrt{\frac{\hbar}{p_0}}\left(2Q\sin\left(-\frac{p_0x}{\hbar} + \varphi_0'\right) + \frac{i}{2Q}\cos\left(-\frac{p_0x}{\hbar} + \varphi_0'\right)\right).$$

Převodem sin, cos zpět na exponenciální tvar a porovnáním nalezených tvarů $\psi_A(x)$, $\psi_C(x)$ s (5.15) dostaneme koeficienty průchodu a odrazu pro amplitudy

$$T = -ie^{i(\varphi_0+\varphi_0')}\frac{4Q}{1+4Q^2}, \quad R = e^{2i\varphi_0'}\frac{1-4Q^2}{1+4Q^2}.$$

Intenzita tedy projde s transmitivitou

$$\mathcal{T} = T^2 = \left|\frac{4Q}{1+4Q^2}\right|^2.$$

Tento vzorec funguje dobře hlavně pro potenciály s pozvolnými a dobře definovanými lineárními přechodovými oblastmi (podmínky WKB aproximace). Dále pro $Q \gg 1$ (velmi vysoká a/nebo široká bariéra) dostáváme

$$T \approx Q^{-2} = e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2M(V(x)-E)}d\tilde{x}},$$

tedy exponenciální snižování koeficientu průchodu se šířkou bariéry.

5.2 Ritzova variační metoda

Variační metody nacházejí použití v situacích, kdy jiné přibližné metody hledání spektra nebo vlastních funkcí hamiltoniánu selžou. Zde se seznámíme s Ritzovou variační metodou. Její základní myšlenka je založena na prostém faktu, že střední hodnota libovolné veličiny nemůže být menší, než nejnižší hodnota ze spektra jejich hodnot. Ritzovu metodu ukážeme pro Hilbertovy prostory spočetné dimenze s hamiltoniány s čistě bodovým spektrem.

Je-li E_0 energie základního stavu systému popsaného hamiltoniánem $\hat{H}$, můžeme princip Ritzovy variační metody vystihnout nerovností

$$E_0 \leq \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}, \tag{5.16}$$

platnou pro všechny nenulové vektory $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$. Buď $(|\psi_i\rangle)_{i\in\mathbb{N}_0}$ ortonormální soubor vlastních vektorů $\hat{H}$ splňujících

$$\hat{H}|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle, \quad E_0 \leq E_1 \leq \ldots, \quad \sum_{i\in\mathbb{N}_0}|\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \mathbb{1}.$$

Potom

$$\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_{i,j}\frac{\langle\psi|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\hat{H}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_i E_i\frac{\langle\psi|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0,$$

přičemž rovnost nastává pro $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle$.

Minimalizace funkcionálu vystupujícího na pravé straně nerovnosti (5.16) není na celém $\mathscr{H}$ úlohou o nic snazší, než řešení vlastních hodnot operátoru $\hat{H}$. Proto se v praxi provádí výběr n-parametrické třídy vektorů $|\psi(\alpha_1,\ldots,\alpha_n)\rangle$ a minimalizuje se výraz

$$E(\alpha_1,\ldots,\alpha_n) = \frac{\langle\psi(\alpha_1,\ldots,\alpha_n)|\hat{H}|\psi(\alpha_1,\ldots,\alpha_n)\rangle}{\langle\psi(\alpha_1,\ldots,\alpha_n)|\psi(\alpha_1,\ldots,\alpha_n)\rangle}. \tag{5.17}$$

Je-li výraz na pravé straně spočitatelný, jedná se o hledání minima funkce n proměnných, tudíž řešíme

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_i}(\alpha_1,\ldots,\alpha_n) = 0, \quad i = 1,\ldots,n,$$

odkud nalezneme bod $(\alpha_1^0,\ldots,\alpha_n^0)$, v němž funkce $E(\alpha_1,\ldots,\alpha_n)$ nabývá minima. Hledaná aproximace energie základního stavu $E_0^{(\mathrm{var})}$ je potom rovna $E_0^{(\mathrm{var})} = E(\alpha_1^0,\ldots,\alpha_n^0)$. Jí přísluší vlastní vektor $|\psi_0^{(\mathrm{var})}\rangle = |\psi(\alpha_1^0,\ldots,\alpha_n^0)\rangle$.

Aproximaci prvního excitovaného stavu určíme rovněž hledáním minima funkce (5.17), nyní však s dodatečnou vazbou

$$\langle\psi(\alpha_1,\ldots,\alpha_n)|\psi_0^{(\mathrm{var})}\rangle = 0.$$

Řešením této úlohy získáme bod $(\alpha_1^1,\ldots,\alpha_n^1)$, energii 1. excitovaného stavu $E_1^{(\mathrm{var})} = E(\alpha_1^1,\ldots,\alpha_n^1)$ a příslušný vlastní vektor $|\psi_1^{(\mathrm{var})}\rangle = |\psi(\alpha_1^1,\ldots,\alpha_n^1)\rangle$. Do vyšších excitovaných hladin postupujeme analogicky.

Poznámka. Obecně lze ukázat, že nejen základní, ale i obecně k-tá nejnižší energie $E_k^{(\mathrm{var})}$ získaná variační metodou je větší nebo rovna k-té nejnižší energii ze spektra hamiltoniánu $\hat{H}$.

Poznámka. V závislosti na charakteru zvolené třídy vektorů řešení úlohy pro vyšší excitované stavy může a nemusí existovat, například se může stát, že množina neobsahuje *žádnou* dvojici vzájemně ortogonálních nenulových vektorů.

Častá volba třídy vektorů je lineární obal n pevně zvolených lineárně nezávislých vektorů $(|\varphi_1\rangle,\ldots,|\varphi_n\rangle)$ (nemusí tvořit ortonormální soubor). Potom volíme

$$|\psi(\alpha_1,\ldots,\alpha_n)\rangle = \alpha_1|\varphi_1\rangle + \ldots + \alpha_n|\varphi_n\rangle.$$

Definujme podprostor

$$W = [|\varphi_1\rangle,\ldots,|\varphi_n\rangle]_\lambda$$

a kanonickou inkluzi

$$P_W : W \to \mathscr{H} : x \mapsto x.$$

Sdružené zobrazení $P_W^\dagger : \mathscr{H} \to W$ je ortogonální projekce na podprostor W. Minimum funkce (5.17) je potom nejmenší vlastní hodnotou hermitovského operátoru $\hat{H}_W$, definovaného

$$\hat{H}_W = \hat{P}_W^\dagger \hat{H} \hat{P}_W, \tag{5.18}$$

na konečněrozměrném prostoru W. Problém hledání spektra $\hat{H}$ je tím převeden na hledání spektra matice $\hat{H}_W$ v libovolné bázi.

Uvedeme zde bez důkazu větu, jež dává do souvislosti vlastní hodnoty $\hat{H}$ a $\hat{H}_W$.[19]

Věta 5.1. Buďte $E_0 \leq E_1 \leq \ldots \leq E_{n-1}$ n nejmenších vlastních hodnot operátoru $\hat{H}$ (každou vlastní hodnotu je třeba započítat tolikrát, kolik je její degenerace). Označme $e_0 \leq e_1 \leq \ldots \leq e_{n-1}$ vlastní hodnoty operátoru $\hat{H}_W$ definovaného dle (5.18). Potom

$$E_j \leq e_j, \quad j = 0, 1, \ldots, n-1.$$

Poznámka. Povšimněme si, že v tomto případě dá variační metoda vždy tolik hodnot, jakou jsme zvolili dimenzi podprostoru.

Matici $\hat{H}_W$ může být nesnadné zkonstruovat. V bázi $(|\varphi_k\rangle)_{k=1}^n$ by její (k,l)-tý element H_{kl} splňoval

$$\hat{H}_W|\varphi_l\rangle = \sum_{k=1}^{n} H_{kl}|\varphi_k\rangle,$$
$$\hat{H}|\varphi_l\rangle = \sum_{k=1}^{n} H_{kl}|\varphi_k\rangle + \text{členy ortogonální na } W,$$

Typicky máme pouze přístup k maticovým elementům daným vzorci

$$\langle\varphi_j|\hat{H}|\varphi_l\rangle = \sum_{k=1}^{n} \langle\varphi_j|\varphi_k\rangle H_{kl},$$

které, uspořádané do matice, odpovídají matici $(H_{kl})_{k,l=1}^n$ operátoru $\hat{H}_W$ vynásobené zleva Gramovou maticí G naší báze. Podmínku vlastních čísel

$$\det(\hat{H}_W - \lambda\mathbb{1}) = 0$$

tedy rovněž vynásobíme $\det G$ a získáme ekvivalentní tvar

$$\det\Big(\langle\varphi_j|\hat{H}|\varphi_l\rangle - \lambda\langle\varphi_j|\varphi_l\rangle\Big) = 0,$$

ve kterém se vlastní energie nejčastěji hledají.

Poznámka. Je obtížné odhadnout chybu této aproximace. Pokud např. pro jednorozměrný harmonický oscilátor s bází vlastních funkcí $(|n\rangle)_{n\in\mathbb{N}_0}$ zvolíme nepříliš vhodnou parametrizaci

$$|\psi(\alpha_1, \ldots, \alpha_5)\rangle = \alpha_1|10\rangle + \ldots + \alpha_5|14\rangle,$$

je zřejmé, že Ritzovou variační metodou získáme hodnotu energie základního stavu $E_0^{(\mathrm{var})} = \hbar\omega(10 + 1/2)$ místo skutečné hodnoty $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

[19] Neplést s dřívější poznámkou, která mluví o jiném srovnání.

Než přestoupíme k příkladu, dokážeme si kvantovou obdobu viriálového teorému. Buďte T resp. $V(\vec{x})$ kinetická resp. potenciální energie soustavy. Viriálem v klasické mechanice rozumíme funkci

$$\vec{x} \cdot \nabla V(\vec{x}),$$

přičemž platí, že časová střední hodnota viriálu je rovna dvojnásobku časové střední hodnoty kinetické energie, tj.

$$\langle \vec{x} \cdot \nabla V(\vec{x}) \rangle = 2\langle T \rangle.$$

Očekáváme obdobu v kvantové mechanice.

Věta 5.2 (Viriálový teorém)**.** Nechť hamiltonián $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$ má tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \hat{V}(\vec{x}).$$

Buď $|\psi\rangle$ jeho stacionární stav splňující $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Označme $\hat{T} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M}$. Potom platí

$$2\langle \hat{T} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \hat{\vec{X}} \cdot \nabla \hat{V}(\vec{x}) \rangle_{|\psi\rangle}. \tag{5.19}$$

Důkaz. Ze zimy víme, že časový vývoj střední hodnoty pozorovatelné $\hat{A} \neq \hat{A}(t)$ ve stavu $|\psi\rangle$ je určen rovnicí

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_{|\psi\rangle}.$$

Navíc pro stacionární stav $|\psi\rangle$ a operátor $\hat{A} \neq \hat{A}(t)$ platí

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_{|\psi\rangle} = 0,$$

protože $|\psi\rangle$ se vyvíjí pouze ve fázi a na té střední hodnota nezávisí (vyzkoušejte si).

Buď $\hat{A} = \hat{\vec{P}} \cdot \hat{\vec{X}}$ a $|\psi\rangle$ stacionární stav z předpokladů věty. Určili jsme tedy

$$\left\langle \left[\hat{\vec{P}} \cdot \hat{\vec{X}}, \hat{H} \right] \right\rangle_{|\psi\rangle} = 0. \tag{5.20}$$

Užitím komutačních relací (1.1) a (1.2) určíme komutátor na levé straně (5.20)

$$\left[\hat{\vec{P}} \cdot \hat{\vec{X}}, \hat{H} \right] = \hat{P}_i \left[\hat{X}_i, \hat{H} \right] + \left[\hat{P}_i, \hat{H} \right] \hat{X}_i = \hat{P}_i \left[\hat{X}_i, \frac{\hat{P}_j \hat{P}_j}{2M} \right] + \left[\hat{P}_i, \hat{V}(\vec{x}) \right] \hat{X}_i =$$

$$= \frac{i\hbar}{M} \hat{\vec{P}}^2 - i\hbar \nabla \hat{V}(\vec{x}) \cdot \hat{\vec{X}}$$

a dosazením získaného výsledku do (5.20)

$$i\hbar \left(2\langle \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} \rangle_{|\psi\rangle} - \langle \hat{\vec{X}} \cdot \nabla \hat{V}(\vec{x}) \rangle_{|\psi\rangle} \right) = 0.$$

Tím je však formule (5.19) dokázána. □

Příklad. Užití Ritzovy variační metody k určení energie základního stavu atomu helia.

Atom helia je ve velmi dobré aproximaci možno považovat za systém tvoření dvěma elektrony nacházejícími se v coulombickém poli jádra. Hamiltonián zkoumaného systéme má tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2_{(1)}}{2M} + \frac{\hat{\vec{P}}^2_{(2)}}{2M} - \frac{Z\tilde{e}^2}{|\hat{\vec{X}}_{(1)}|} - \frac{Z\tilde{e}^2}{|\hat{\vec{X}}_{(2)}|} + \frac{\tilde{e}^2}{|\hat{\vec{X}}_{(1)} - \hat{\vec{X}}_{(2)}|}, \tag{5.21}$$

kde v případě helia klademe $Z = 2$. Dále jsme zavedli označení $\tilde{e}^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$. Buď $\hat{H}_0$ hamiltonián bez posledního členu, $\hat{H}'$ buď poslední člen, zprostředkovávající vzájemnou interakci elektronů. Ze zimy známe explicitní tvar vlnové funkce ψ_{100} popisující základní stav elektronu v iontu He^+

$$\psi_{100}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{\frac{-Zr}{a}}, \tag{5.22}$$

kde a představuje Bohrův poloměr

$$a = \frac{\hbar^2}{M\tilde{e}^2}.$$

V základním stavu $|\psi\rangle$ atomu helia se nacházejí oba elektrony ve stavu $\psi_{100}(r, \vartheta, \varphi)$, kam se „vejdou“ ve shodě s Pauliho vylučovacím principem díky rozdílnému spinu (spin i vylučovací princip pro účely nynějšího výpočtu zcela odignorujeme). Vlnová funkce $|\psi\rangle \in L^2(\mathbb{R}^6, d^3x_{(1)}d^3x_{(2)})$, jež je vlastní funkcí $\hat{H}_0$ příslušející energii základního stavu $E_0^{(0)}$, má tvar

$$|\psi\rangle = \psi_{100}(r_1, \vartheta_1, \varphi_1)\psi_{100}(r_2, \vartheta_2, \varphi_2) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a}\right)^3 e^{\frac{-Z}{a}(r_1+r_2)}. \tag{5.23}$$

Energie $E_0^{(0)}$ je určena výrazem

$$E_0^{(0)} = \frac{-\tilde{e}^2Z^2}{a}. \tag{5.24}$$

V zimě jsme rovně určovali energii základního stavu atomu helia pomocí poruchové teorie do 1. řádu s uvážením poruchového členu $\hat{H}'$. Příslušná oprava energie $E_0^{(1)}$ vyšla

$$E_0^{(1)} = \langle\psi|\hat{H}'|\psi\rangle = \frac{5}{8}\frac{\tilde{e}^2Z}{a}, \tag{5.25}$$

kde $|\psi\rangle$ je vlastní funkce (5.23) operátoru $\hat{H}_0$. Pro energii základního stavu jsme tak dostali

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = -108.8 + 34.0 = -74.8eV. \tag{5.26}$$

Nyní použijeme Ritzovu variační metodu k získání jiného odhadu. Užijeme přitom jednoparametrickou třídu zkušebních vektorů popsaných vlnovými funkcemi

$$|\varphi(r_1, \varphi_1, \vartheta_1, r_2, \varphi_2, \vartheta_2, \xi)\rangle = \frac{1}{\pi}\xi^3 e^{-\xi(r_1+r_2)}, \tag{5.27}$$

kde variujeme hodnotu vystupující na místě zlomku Z/a ve výrazu (5.23). (Povšimněme si, že při volbě $\xi = Z/a$ přechází (5.27) na (5.23).) Pro $\forall \xi \in \mathbb{R}$ jsou vlnové funkce (5.27) normalizované k jedničce. Dle (5.17) hledáme minimum funkce

$$E(\xi) = \langle\varphi(\xi)|\hat{H}|\varphi(\xi)\rangle = \langle\varphi(\xi)|\hat{H}_0|\varphi(\xi)\rangle + \langle\varphi(\xi)|\hat{H}'|\varphi(\xi)\rangle. \tag{5.28}$$

Druhý skalární součin na pravé straně poslední rovnosti získáme přímo z (5.25) záměnou $Z/a \mapsto \xi$, neboť operátor $\hat{H}'$ je na Z nezávislý, tj.

$$\langle\varphi(\xi)|\hat{H}'|\varphi(\xi)\rangle = \frac{5}{8}\tilde{e}^2\xi. \tag{5.29}$$

První skalární součin na pravé straně (5.28) je možno vyřešit rovněž bez počítání integrálu. Operátor $\hat{H}_0$ je však třeba rozdělit, neboť v jeho potenciální části explicitně vystupuje závislost na Z. Abychom mohli při pevném Z provést pro $\forall \xi \in \mathbb{R}$ záměnu $Z/a \mapsto \xi$, musíme operátor $\hat{H}_0 = \hat{H}_0(Z)$ rozepsat jako

$$\hat{H}_0(Z) = \hat{T} + \hat{V}(Z) = \hat{T} + \frac{Z}{\xi a}\hat{V}(\xi a), \tag{5.30}$$

kde operátor kinetické energie $\hat{T}$ je představován prvními dvěma členy formule (5.21), v níž druhé dva členy reprezentují operátor $\hat{V}(Z)$.

Viriálový teorém (5.19) v případě našeho potenciálu má podobu

$$2\langle\hat{T}\rangle_{|\varphi(\xi)\rangle} = -\langle\hat{V}\rangle_{|\varphi(\xi)\rangle}.$$

Navíc z (5.24) musí platit

$$(\hat{T} + \hat{V}(\xi a))|\varphi(\xi)\rangle = -\tilde{e}^2\xi^2 a|\varphi(\xi)\rangle.$$

Z posledních dvou formulí je možno získat

$$\langle\hat{T}\rangle_{|\varphi(\xi)\rangle} = \tilde{e}^2\xi^2 a, \quad \langle\hat{V}\rangle_{|\varphi(\xi)\rangle} = -2\tilde{e}^2\xi^2 a.$$

Na základě rovnosti (5.30) musí být

$$\langle\varphi(\xi)|\hat{H}_0(Z)|\varphi(\xi)\rangle = \tilde{e}^2\xi(\xi a - 2Z)$$

což ve spojení s předchozím výsledkem (5.29) dává

$$E(\xi) = \tilde{e}^2\xi(\xi a - 2Z + \frac{5}{8}). \tag{5.31}$$

Tato funkce nabývá minima v bodě $\xi_0 = \frac{1}{a}\left(Z - \frac{5}{16}\right)$ a hledaná hodnota energie je rovna

$$E_0^{(\mathrm{var})} = E(\xi_0) = \frac{-\tilde{e}^2}{a}\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 \cong -77.5eV, \tag{5.32}$$

Což s experimentální hodnotou $E_0^{(\mathrm{exp})} = -78.9eV$ souhlasí podstatně lépe, než výsledek (5.26).

Získaný výsledek (5.32) je možno chápat (se zpětným pohledem na (5.24)) jako energii základního stavu, kde odpudivá síla mezi elektrony způsobila odstínění části náboje každého z nich.

5.3 Nestacionární poruchová teorie

Předpokládejme hamiltonián ve tvaru

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon\hat{V}(t), \tag{5.33}$$

kde $\hat{H}_0$ nezávisí na čase.[20] Jak tvar hamiltoniánu napovídá, budeme dále užívat Diracovy reprezentace. Předpokládejme, že v počátečním čase t_0 máme systém ve stavu $|\psi(t_0)\rangle$ a že jeho časový vývoj umíme vyřešit v případě $\varepsilon = 0$. Pro tento případ je časový vývoj stavu $|\psi(t_0)\rangle$ možno popsat Diracovým evolučním operátorem $\hat{U}_0(t, t_0)$, zavedeným v kapitole 3.2.2 rovností (3.28)

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}_0(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle. \tag{5.34}$$

V dalším se budeme zabývat úlohou, v níž máme zadán stav systému $|\psi(t_0)\rangle$ v čase t_0 a zajímá nás, s jakou pravděpodobností přejde systém po provedení měření v čase t_f do stavu $|\psi_f\rangle$, tedy určením výrazu

$$|\langle\psi_f|\psi(t_f)\rangle|^2. \tag{5.35}$$

Zaveďme za tímto účelem evoluční operátor ve Schrödingerově reprezentaci $\hat{U}(t, t_0)$ zohledňující celý hamiltonián (5.33) (v dalším operátory a stavy bez dodatečných indexů znamenají Schrödingerovu reprezentaci)

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle. \tag{5.36}$$

Podobně pro vývoj stavů v Diracově reprezentaci zavedeme operátor $\hat{U}^D(t, t_0)$ splňující[21]

$$|\psi^D(t)\rangle = \hat{U}^D(t, t_0)|\psi^D(t_0)\rangle. \tag{5.37}$$

[20] Nestacionární poruchová teorie se liší od poruchové teorie zavedené v zimě závislosti poruchového členu $\hat{V} = \hat{V}(t)$ na čase, ale také účelem – nezkoumáme stacionární stavy, ale časový vývoj.

[21] Máme tedy už celkem 3 evoluční operátory: $\hat{U}_0(t, t_0)$, $\hat{U}(t, t_0)$ a $\hat{U}^D(t, t_0)$. Připomeňme, že všechny jsou unitární.

Vztah mezi stavy v Diracově a Schrödingerově reprezentaci popisuje rovnice (3.29a)

$$|\psi^D(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)|\psi(t)\rangle.$$

Za předpokladu $|\psi(t_0)\rangle = |\psi^D(t_0)\rangle =: |\psi_0\rangle$ (tedy že obě reprezentace se v čase t_0 shodují), můžeme poslední rovnost užitím (5.36) přepsat jako

$$|\psi^D(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)|\psi_0\rangle,$$

odkud srovnáním s (5.37) získáváme rovnost mezi zavedenými evolučními operátory

$$\hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) = \hat{U}^D(t,t_0). \tag{5.38}$$

Dále na základě rovnosti (3.30) popisující časový vývoj stavů v Diracově reprezentaci musí platit

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi^D(t)\rangle = \varepsilon\hat{V}^D(t)|\psi^D(t)\rangle,$$

odkud dosazením z (5.37) dostáváme diferenciální rovnici pro operátor $\hat{U}^D(t,t_0)$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}^D(t,t_0) = \varepsilon\hat{V}^D(t)\hat{U}^D(t,t_0). \tag{5.39}$$

Vraťme se nyní k výrazu (5.35) a dosaďme do něj z (5.36) a (5.38)

$$|\langle\psi_f|\psi(t_f)\rangle|^2 = |\langle\psi_f|\hat{U}(t_f,t_0)|\psi_0\rangle|^2 = |\langle\psi_f|\hat{U}_0(t_f,t_0)\hat{U}^D(t_f,t_0)|\psi_0\rangle|^2.$$

Protože

$$\langle\psi_f|\hat{U}_0(t_f,t_0) = \left(\hat{U}_0(t_f,t_0)^\dagger|\psi_f\rangle\right)^\dagger = |\psi_f^D\rangle^\dagger,$$

převedli jsme původní úlohu na hledání maticových elementů[22]

$$\langle\psi_f|\psi(t_f)\rangle = \langle\psi_f^D|\hat{U}^D(t_f,t_0)|\psi_0\rangle \tag{5.40}$$

operátoru $\hat{U}^D(t_f,t_0)$, který se budeme snažit získat na základě rovnosti (5.39). Předpokládejme poruchový rozvoj $\hat{U}^D(t_f,t_0)$ ve tvaru

$$\hat{U}^D(t_f,t_0) = \sum_{n=0}^{+\infty}\varepsilon^n\hat{U}^{D^{(n)}}(t_f,t_0). \tag{5.41}$$

Členy rozvoje $\hat{U}^{D^{(n)}}(t_f,t_0)$ určíme dosazením poslední rovnosti do diferenciální rovnice (5.39) a porovnáním členů se stejnými mocninami ε. Člen s nultou mocninou ε se vyskytuje pouze na levé straně, tedy

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}^{D^{(0)}}(t,t_0) = 0$$

[22] Díky rovnosti reprezentací stavu v čase t_0 jsou všechny komponenty získaného výrazu v Diracově obraze.

a protože $\hat{U}^{D^{(0)}}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$, také

$$\hat{U}^{D^{(0)}}(t_f, t_0) = \mathbb{1}.$$

Dále porovnáním členů úměrných ε, resp. ε^2 atd. získáváme pro další členy rozvoje (5.41) rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}^{D^{(1)}}(t, t_0) = \hat{V}^D(t) \hat{U}^{D^{(0)}}(t, t_0) = \hat{V}^D(t),$$

resp.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}^{D^{(2)}}(t, t_0) = \hat{V}^D(t) \hat{U}^{D^{(1)}}(t, t_0),$$

a dále dle stejného vzoru, které mají okamžité řešení

$$\hat{U}^{D^{(1)}}(t_f, t_0) = \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} \hat{V}^D(t_1)\, dt_1, \tag{5.42a}$$

$$\hat{U}^{D^{(2)}}(t_f, t_0) = \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} \hat{V}^D(t_2) \hat{U}^{D^{(1)}}(t_2, t_0)\, dt_2 = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{V}^D(t_2) \hat{V}^D(t_1), \tag{5.42b}$$

atd. Obecně pro n-tý člen rozvoje (5.41)

$$\begin{aligned} \hat{U}^{D^{(n)}}(t_f, t_0) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t_f} dt_n \cdots \int_{t_0}^{t_3} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{V}^D(t_n) \ldots \hat{V}^D(t_2) \hat{V}^D(t_1) \\ &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int\int \cdots \int_{t_0 < t_1 < t_2 < \ldots < t_n < t_f} dt_1 dt_2 \ldots dt_n \hat{V}^D(t_n) \ldots \hat{V}^D(t_2) \hat{V}^D(t_1). \end{aligned} \tag{5.42c}$$

V literatuře je možno potkat operátor $\hat{U}^{D^{(n)}}(t_f, t_0)$ zapsaný pomocí formálního operátoru časového uspořádání $\hat{T}$.

Definice 5.3. Buď $\hat{A} = \hat{A}(t)$ jednoparametrická třídá operátorů, buďte t_1, t_2 libovolné časy. **Časově uspořádaný součin** operátorů $\hat{A}(t_1)$ a $\hat{A}(t_2)$ definujeme jako

$$\hat{T}\left[\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\right] = \begin{cases} \hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2), & \text{když} \quad t_1 \geq t_2, \\ \hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1), & \text{když} \quad t_1 < t_2. \end{cases}$$

Analogicky definujeme časově uspořádaný součin libovolného počtu operátorů $\hat{A}(t_1) \cdot \ldots \cdot \hat{A}(t_N)$.

Věnujme pozornost následujícímu integrálu:

$$\int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \hat{T}\left[\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\right] = \underbrace{\int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1)}_{t_2 \geq t_1} + \underbrace{\int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_2}^{t_f} dt_1 \hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)}_{t_2 < t_1}. \quad (5.43)$$

Formální záměnou $t_1 \leftrightarrow t_2$ ve druhém integrálu

$$\int_{t_0}^{t_f} dt_1 \int_{t_1}^{t_f} dt_2 \hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1)$$

a následnou záměnou integračního pořadí zjistíme, že oba integrály na pravé straně (5.43) se shodují. Dostáváme tak

$$\int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \hat{T}\left[\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\right].$$

Nahrazením explicitních mezí na levé straně celým integračním rozsahem (t_0, t_f) a časovým uspořádáním součinu v integrandu jsme započítali každou dvojici časů (t_x, t_y), $t_x > t_y$ dvakrát (jednou jako (t_x, t_y) a jednou jako (t_y, t_x)) a to je zřejmě třeba opravit vydělením integrálu dvojkou. Obecně pro vyšší řády můžeme integrovat přes celý rozsah ve všech proměnných a dělit počtem permutací proměnných:

$$\int_{t_0}^{t_f} dt_n \cdots \int_{t_0}^{t_3} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{A}(t_n) \ldots \hat{A}(t_1) = \frac{1}{n!} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_f} dt_n \hat{T}\left[\hat{A}(t_1) \ldots \hat{A}(t_n)\right].$$

Rozvoj operátoru $\hat{U}^D(t_f, t_0)$ (5.41) je pak možno elegantněji zapsat

$$\hat{U}^D(t_f, t_0) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\varepsilon^n}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_f} dt_n \hat{T}\left[\hat{V}^D(t_1) \ldots \hat{V}^D(t_n)\right], \quad (5.44)$$

což je řada připomínající rozvoj exponenciály. Zaveďme formálně

$$\hat{T} \exp\left\{\int_{t_0}^{t_f} d\tilde{t} \hat{A}(\tilde{t})\right\} = \mathbb{1} + \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \hat{A}(t_1) + \frac{1}{2!} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \hat{T}\left[\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\right] + \ldots$$

Vyjádření (5.44) je pak možno převést do finálního tvaru

$$\hat{U}^D(t_f, t_0) = \hat{T} \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} \hat{V}^D(\tilde{t}) d\tilde{t}\right\}.$$

Poznámka. Srovnejte tvar tohoto zápisu řešení (5.39) s řešením (3.21) rovnice (3.20) s konstantním operátorem $\hat{H}_0$.

V dalším předpokládejme nejhrubší možnou aproximaci operátoru $\hat{U}^D(t_f, t_0)$, tedy

$$\hat{U}^D(t_f, t_0) \approx \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon \int_{t_0}^{t_f} \hat{V}^D(t_1) dt_1. \tag{5.45}$$

Dále buď $\hat{H}_0|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle$ a $\hat{H}_0|\psi_f\rangle = E_1|\psi_f\rangle$, takže

$$|\psi_f^D\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t_f - t_0)}|\psi_f\rangle.$$

Tvar maticového elementu ve výrazu (5.40) budeme řešit zvlášť pro $\langle\psi_f|\psi_0\rangle = 0$ a $\langle\psi_f|\psi_0\rangle = 1$. Uvažujme nejprve první z případů a dosaďme předpokládaný tvar řešení (5.45) do (5.40). Dostáváme

$$\begin{aligned}\left|\langle\psi_f^D|\hat{U}^D(t_f, t_0)|\psi_0\rangle\right|^2 &= \left|\langle\psi_f|\hat{U}^D(t_f, t_0)|\psi_0\rangle\right|^2 \approx \\ \approx \left|\langle\psi_f|\psi_0\rangle - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\langle\psi_f|\int_{t_0}^{t_f}\hat{V}^D(t_1)dt_1|\psi_0\rangle\right|^2 &= \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}\left|\langle\psi_f|\int_{t_0}^{t_f}\hat{V}^D(t_1)dt_1|\psi_0\rangle\right|^2,\end{aligned}$$

kde je možno převést operátor $\hat{V}^D(t_1)$ do Schrödingerovy reprezentace užitím (3.29b) a zaměnit pořadí integrace a vytknout konstanty ze skalárního součinu. Výsledkem je

$$\left|\langle\psi_f^D|\hat{U}^D(t_f, t_0)|\psi_0\rangle\right|^2 = \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{t_f} e^{\frac{i}{\hbar}(t_1 - t_0)(E_1 - E_0)}\langle\psi_f|\hat{V}(t_1)|\psi_0\rangle dt_1\right|^2. \tag{5.46}$$

(Je nutné si uvědomit, že i ket $|\psi_0\rangle$ je v Diracově obraze, proto je v předchozím členu v exponenciále i E_0.) Při nejhrubší aproximaci musí pro ortogonální stavy platit, že pravděpodobnost, že částice, jež byla v čase t_0 ve stavu $|\psi_0\rangle$, bude po provedení měření v čase t_f převedena do stavu $|\psi_f\rangle$, je stejná jako pravděpodobnost, že měření v čase t_f převede částici, jež byla v čase t_0 ve stavu $|\psi_f\rangle$, do stavu $|\psi_0\rangle$, tj. invariantní vůči časové inverzi.

Vezměme si nyní případ $\langle\psi_f|\psi_0\rangle = 1$ a zkoumejme stejným způsobem výraz

$$\left|\langle\psi_f^D|\hat{U}^D(t_f, t_0)|\psi_0\rangle\right|^2 \approx \left|\langle\psi_f|\psi_0\rangle - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\langle\psi_f|\int_{t_0}^{t_f}\hat{V}^D(t_1)\,dt_1|\psi_0\rangle\right|^2.$$

Výraz na pravé straně je ≥ 1, neboť reálná část výrazu v absolutní hodnotě je tvořena pouze $\langle\psi_f|\psi_0\rangle$ a je rovna jedné. K ní přispěje ryze imaginární druhý člen,[23] a tak hodnota posledního výrazu musí být ≥ 1. V tomto případě je třeba v rozvoji $\hat{U}^D(t_f,t_0)$ uvažovat členy úměrné alespoň ε^2, abychom získali smysluplný výsledek.

Vraťme se k případu $\langle\psi_f|\psi_0\rangle = 0$. Zde se může v nejhrubší aproximaci stát, že pravděpodobnost přechodu $\left|\langle\psi_f|\psi(t_f)\rangle\right|^2$ je malá v porovnání s pravděpodobnostmi přechodů do jiných stavů $|\psi'_f\rangle$. Pro nejhrubší smysluplnou aproximaci může být třeba započítat i členy vyššího řádu rozvoje. Podívejme se, jak dopadne aproximace do ε^2. Užitím explicitního vyjádření $\hat{U}^{D(2)}(t_f,t_0)$ (5.42b) dostáváme

$$\left|\langle\psi_f|\hat{U}^D(t_f,t_0)|\psi_0\rangle\right|^2 \approx \left|\langle\psi_f|\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f}\hat{V}^D(t_1)dt_1 - \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t_f}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\hat{V}^D(t_1)\hat{V}^D(t_2)\right)|\psi_0\rangle\right|^2.$$

Uvažujme libovolnou ortonormální bázi $(|\psi_k\rangle)_k$, potom lze poslední výraz upravit

$$\begin{aligned}&\left|\langle\psi_f| - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f}\hat{V}^D(t_1)dt_1 - \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t_f}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\hat{V}^D(t_1)\left(\sum_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\right)\hat{V}^D(t_2)|\psi_0\rangle\right|^2 = \\ &= \left|-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f}\langle\psi_f|\hat{V}^D(t_1)|\psi_0\rangle dt_1 - \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t_f}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\sum_k\langle\psi_f|\hat{V}^D(t_1)|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\hat{V}^D(t_2)|\psi_0\rangle\right|^2.\end{aligned} \tag{5.47}$$

Pokud byla do prvního řádu poruchového rozvoje $\hat{U}^D(t_f,t_0)$ pravděpodobnost přechodu $\left|\langle\psi_f|\hat{U}^D(t_f,t_0)|\psi_0\rangle\right|^2$ „malá“, bude v posledním výrazu převažovat člen s dvojným integrálem. Ten je možno chápat jako přeskok přes mezistav, který umožnil systému dostat se v důsledku našeho měření v čase t_f do finálního stavu $|\psi_f\rangle$. Nejsme totiž schopni rozlišit, zda systém v nějakém mezistavu byl či nikoliv. Za povšimnutí rovněž stojí, že uvnitř absolutní hodnoty se sčítají amplitudy pravděpodobnosti – tím pádem může docházet k interferenci. Je snadno uvěřitelné, že při započítání vyšších členů rozvoje (5.41) zohledníme více možných přeskoků přes mezistavy.

Příklad. Interakce elektromagnetického záření s látkou

Předpokládejme záření popsané klasicky, tedy Maxwellovými rovnicemi pomocí vektoru intenzity elektrického pole $\vec{E}$ a vektoru magnetické indukce $\vec{B}$. Abychom tento předpoklad ospravedlnili, budeme uvažovat záření s dlouhými vlnovými délkami v porovnání s rozměry atomů (vzpomeňme na Comptonův rozptyl). Dále předpokládejme,

[23] Dle uvažovaného předpokladu je $|\psi_f\rangle = |\psi_0\rangle$ a integrál zachovává samosdruženost integrandu $\hat{V}^D(t_1)$. Skalární součin ve druhém členu je tedy střední hodnotou samosdruženého operátoru, a proto reálný.

že záření neinteraguje s jádry – tedy že dochází ke změně pouze v atomových obalech (excitace, deexcitace). Jelikož $\vec{E}$ má na náboje urychlující, resp. zpomalující účinek, zatímco $\vec{B}$ pouze natáčí směr pohybu náboje, budeme v prvním přiblížení zkoumat vliv pouze $\vec{E}$. Hamiltonián jednoho atomu zapíšeme

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \sum_{k=1}^{n} e\vec{E}(t)\hat{\vec{X}}_{(k)},$$

kde $\hat{H}_0$ popisuje elektrony vázané v coulombickém potenciálu jádra, zatímco suma na pravé straně popisuje jejich interakci s vnějším elektrickým polem (dopadajícím zářením).

Zavedeme operátor celkového elektrického dipólového momentu všech elektronů $\hat{\vec{D}}$ vztahem

$$\hat{\vec{D}} = \sum_{k=1}^{n} e\hat{\vec{X}}_{(k)}.$$

Za předpokladu, že dopadající EM záření je lineárně polarizované, lze volbou soustavy souřadnic docílit, aby $\vec{E}(t)||\hat{D}_1$. Interakční člen $\hat{V}(t)$ je možno zapsat

$$\hat{V}(t) = E(t)\hat{D}_1.$$

Zabývejme se nyní otázkou, s jakou pravděpodobností $W_{|\psi_0\rangle\to|\psi_1\rangle}(t_0, t_1)$ v prvním řádu nestacionárního poruchového rozvoje přejde systém, jenž byl v čase t_0 ve stavu $|\psi_0\rangle$, do ortogonálního stavu $|\psi_1\rangle$ v čase t_1. Za tímto účelem předpokládejme $\hat{H}_0|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle$, $\hat{H}_0|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle$. Dle (5.46), kde klademe $\varepsilon = 1$, je hledaná pravděpodobnost

$$W_{|\psi_0\rangle\to|\psi_1\rangle}(t_0, t_1) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{t_1} e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)(E_1-E_0)}\langle\psi_1|\hat{D}_1E(t)|\psi_0\rangle dt\right|^2 =$$

$$= \left|\langle\psi_1|\hat{D}_1|\psi_0\rangle\right|^2 \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{t_1} e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)(E_1-E_0)}E(t)dt\right|^2 \tag{5.48}$$

Z klasické elektrodynamiky je znám vzorec pro energii $I(\nu)$ EM záření dopadajícího na jednotku plochy na jednotkový rozsah frekvencí kolem ν za čas $t_1 - t_0$

$$I(\nu) = \frac{c\varepsilon_0}{2\pi}\left|\int_{t_0}^{t_1} e^{2\pi i\nu(t-t_0)}E(t)dt\right|^2,$$

kde $E(t)$ v integrandu představuje intenzitu kolmo dopadající složky elektrického pole. Označíme-li $\nu = \frac{|E_1-E_0|}{h}$, je možno užitím poslední rovnosti zjednodušit výraz (5.48) do finální podoby

$$W_{|\psi_0\rangle\to|\psi_1\rangle}(t_0, t_1) = \frac{2\pi}{c\varepsilon_0\hbar^2}\left|\langle\psi_1|\hat{D}_1|\psi_0\rangle\right|^2 I(\nu).$$

Pravděpodobnost excitace (resp. deexcitace) $E_0 \leftrightarrow E_1$ je tedy úměrná členu $\left|\langle\psi_1|\hat{D}_1|\psi_0\rangle\right|^2$ (jejž je třeba brát jako konstantu) a hustotě energie složky EM vlnění o frekvenci blízké $\nu = \frac{|E_1 - E_0|}{h}$.

Příklad. Poruchový rozvoj v nejnižším řádu pro potenciál $\hat{V} \neq \hat{V}(t)$ (v Diracově obraze může být $\hat{V}^D = \hat{V}^D(t)$)

Budeme postupovat obdobně jako v předchozím příkladu. Mějme systém v čase t_0 ve stavu $|\psi_0\rangle$. V čase t_1 provádíme měření. Zajímá nás pravděpodobnost $W_{|\psi_0\rangle\to|\psi_1\rangle}(t_0, t_1)$, že jím převedeme systém do stavu $|\psi_1\rangle$. Hamiltonián má tvar $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, přičemž předpokládáme $\langle\psi_1|\psi_0\rangle = 0$, $\hat{H}_0|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle$, $\hat{H}_0|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle$. Hledaná pravděpodobnost je dle (5.46), kde klademe $\varepsilon = 1$, po jednoduché úpravě rovna

$$W_{|\psi_0\rangle\to|\psi_1\rangle}(t_0, t_1) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_0\rangle\right|^2 \left|\int_{t_0}^{t_1} e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_0)t} dt\right|^2 .$$

Poslední integrál je možno spočítat[24] s výsledkem

$$W_{|\psi_0\rangle\to|\psi_1\rangle}(t_0, t_1) = \frac{4\left|\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_0\rangle\right|^2}{(E_1 - E_0)^2} \sin^2\left(\frac{E_1 - E_0}{2\hbar}(t_1 - t_0)\right).$$

Zavedeme-li označení

$$I_T(\omega) = \frac{4}{\omega^2}\sin^2\left(\frac{1}{2}\omega T\right), \tag{5.49}$$

(viz graf na obrázku 7), pak

$$W_{|\psi_0\rangle\to|\psi_1\rangle}(t_0, t_1) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_0\rangle\right|^2 I_{t_1 - t_0}\left(\frac{E_1 - E_0}{\hbar}\right). \tag{5.50}$$

Tohoto výsledku využijeme v následujícím příkladě. Povšimněme si výrazného potlačení posledního výrazu pro velké rozdíly energií $E_1 - E_0$. Rovněž je možno nalezený výraz odhadnout shora hodnotami $\frac{4\left|\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_0\rangle\right|^2}{(E_1 - E_0)^2}$ či $\frac{\left|\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_0\rangle\right|^2}{\hbar^2}(t_1 - t_0)^2$.

Příklad. Nabitá částice v krabici.

Mějme částici o hmotnosti M a náboji e v krabici $(0, a) \times (0, b) \times (0, c)$ v počátečním stavu $|qrs\rangle$. V čase $t = 0$ zapneme elektrické pole $\vec{E} = (E, 0, 0)$ a v čase T jej vypneme. S jakou pravděpodobností po změření energie v čase $t > T$ najdeme částici ve stavu $|QRS\rangle$, přičemž $(Q, R, S) \neq (q, r, s)$?

[24] Výpočet se provede buď exaktně matematicky s rozdělením integrandu na reálnou a imaginární část, nebo podstatně rychlejšími barbarskými fyzikálními způsoby okamžitou integrací, při níž i představuje jen symbol. Rozhodnutí nechávám na vkusu počtáře. Obě cesty vedou ke stejnému cíli.

Předpokládejme, že částice nemůže z krabice uniknout. Pracujeme tedy na $\mathscr{H} = L^2((0,a)\times(0,b)\times(0,c), d^3x)$. Částici v krabici je možno chápat jako částici v nekonečně hluboké trojrozměrné potenciálové jámě. V případě částice v *jednorozměrné* nekonečně hluboké potenciálové jámě, kde $V(x) = 0$ pro $x \in (0,a)$, mají vlastní funkce $\psi_q(x)$ tvar

$$\psi_q(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi q x}{a}\right). \tag{5.51}$$

Pro $q \in \mathbb{N}$ tvoří tyto funkce ortonormální soubor. Očekáváme, že vlastní funkce částice v krabici budou tvaru

$$|qrs\rangle = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{\pi q x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi r y}{b}\right) \sin\left(\frac{\pi s z}{c}\right) \tag{5.52}$$

a pro $q, r, s \in \mathbb{N}$ budou rovněž tvořit ON soubor, tedy $\langle qrs|QRS\rangle = \delta_{qQ}\delta_{rR}\delta_{sS}$. Označme

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \qquad \hat{H}_0 = \frac{-\hbar^2}{2M}\Delta, \quad \hat{V} = -eEx\cdot.$$

K řešení úlohy využijeme výsledku předchozího příkladu (5.50). Budeme potřebovat vlastní hodnoty E_{qrs} hamiltoniánu $\hat{H}_0$. Jeho působení na ket $|qrs\rangle$ je triviální. Platí

$$\hat{H}_0|qrs\rangle = \frac{\hbar^2}{2M}\left[\left(\frac{\pi q}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi r}{b}\right)^2 + \left(\frac{\pi s}{c}\right)^2\right]|qrs\rangle = E_{qrs}|qrs\rangle. \tag{5.53}$$

Dále bude třeba určit výraz $\langle QRS|\hat{V}|qrs\rangle$. Užitím tvaru vlnových funkcí (5.52) a dosazením za operátor $\hat{V} = -eEx\cdot$ dostáváme

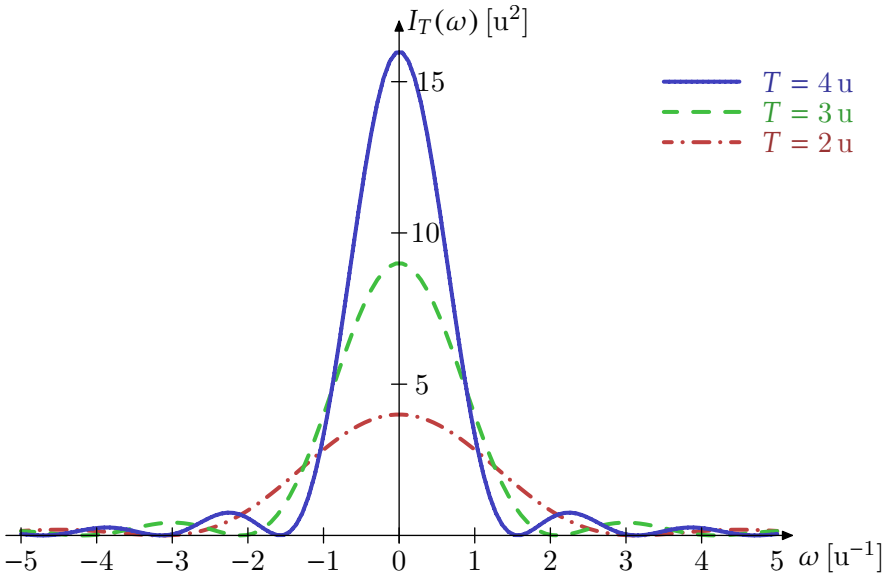
$$\langle QRS|\hat{V}|qrs\rangle = \frac{-8eE}{abc}\int_0^a dx \int_0^b dy \int_0^c dz \Bigg\{ x \sin\left(\frac{\pi q x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi Q x}{a}\right) \times \\ \sin\left(\frac{\pi r y}{b}\right)\sin\left(\frac{\pi R y}{b}\right)\sin\left(\frac{\pi s z}{c}\right)\sin\left(\frac{\pi S z}{c}\right)\Bigg\}.$$

Využitím ortonormality vlastních funkcí (5.51) se integrál zjednoduší na

$$\frac{-2eE}{a}\delta_{rR}\delta_{sS}\int_0^a x \sin\left(\frac{\pi q x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi Q x}{a}\right) dx.$$

Po ručním zintegrování zbytku se výsledek rozpadne na dva podpřípady

$$\langle QRS|\hat{V}|qrs\rangle = \begin{cases} 0 & \text{pro } (q+Q) \text{ sudé,} \\ \delta_{rR}\delta_{sS}\frac{-8aeE}{\pi^2}\frac{qQ}{(Q^2-q^2)^2} & \text{pro } (q+Q) \text{ liché.} \end{cases} \tag{5.54}$$



Obrázek 7: Průběh $I_T(\omega)$ pro různé hodnoty T. u je vhodná jednotka času, například μs. Pro delší interakční časy popisuje $I_T(\omega)$ užší spektrum energií.

Výsledná pravděpodobnost $W_{|qrs\rangle\to|QRS\rangle}(T)$, že částici, jež byla na počátku ve stavu $|qrs\rangle$ převedeme měřením provedeném po čase T do stavu $|QRS\rangle$, je dle (5.50) rovna

$$W_{|qrs\rangle\to|QRS\rangle}(T) = \left(\frac{8aeE}{\pi^2\hbar}\right)^2 \left(\frac{qQ}{(Q^2-q^2)^2}\right)^2 I_T\left(\frac{E_{QRS}-E_{qrs}}{\hbar}\right)\delta_{rR}\delta_{sS},$$

přičemž musí navíc $q \neq Q$, $(q+Q)$ liché. V 1. řádu poruchové teorie může systém přeskočit pouze do stavů s Q lišícím se o liché číslo. Přeskok do zbylých stavů by se objevil ve vyšším řádu poruchové teorie (viz (5.47)), kde by byl reprezentován dvěma přeskoky.

Věnujme chvíli pozornost funkci $I_T(\omega)$ definované (5.49). Tato funkce nabývá maxima pro $\omega = 0$, přičemž nulové hodnoty nabývá v bodech $\omega_T = \frac{2\pi k}{T}$, kde $k \in \mathbb{Z}\backslash\{0\}$. Průběh pro $T = 2, 3, 4$ je na obrázku 7.

Z grafu vidíme, že pro T malé je $I_T(\omega)$ dost široké, tj. nezanedbatelné pro velký počet možných energií. Naproti tomu pro T velké je $I_T(\omega)$ nezanedbatelné pouze v malé oblasti kolem nuly. Čím delší tedy je působení pole, tím menší bude rozptyl nalézaných energií cílového stavu. Toto je možno chápat jako projev principu neurčitosti energie: Při měření trvajícím čas T jsme schopni určit energii E s přesností maximálně řádu $\hbar/T$.

5.4 Náhlá změna hamiltoniánu

V poslední ze zde probíraných přibližných metod budeme uvažovat systém, jež je v čase $t_0 < 0$ popsán hamiltoniánem $\hat{H}_-$. V čase $t = 0$ dojde ke změně v systému. Systém je v čase $t > 0$ popsán novým hamiltoniánem $\hat{H}_+$ (může se jednat o chemickou reakci,

změnu parametrů HO, rozpad jádra...). Budeme se zabývat otázkou, s jakou pravděpodobností při měření energie v čase $t > 0$ naměříme energii E_+, pokud byl systém v čase $t_0 < 0$ ve stacionárním stavu $|\psi_-\rangle$: $\hat{H}_-|\psi_-\rangle = E_-|\psi_-\rangle$.[25]

Předpokládejme, že známe spektrum i vlastní vektory operátorů $\hat{H}_-$, $\hat{H}_+$. Časový vývoj počátečního stacionárního stavu $|\psi_-\rangle = |\psi_-(t_0)\rangle$ je pro čas $t < 0$ určen rovnicí

$$|\psi_-(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_-(t-t_0)}|\psi_-(t_0)\rangle.$$

Pro čas $t = 0$ potom

$$|\psi_-(0)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}E_-t_0}|\psi_-(t_0)\rangle. \tag{5.55}$$

Za předpokladu, že vlastní funkce operátoru $\hat{H}_+$ tvoří ON bázi $\mathscr{H}$ $(|\varphi_j\rangle)_{j\in\mathscr{I}}$: $\hat{H}_+|\varphi_j\rangle = E_j|\varphi_j\rangle$, je možno zapsat vývoj počátečního stavu $|\psi_-(t_0)\rangle$ v čase $t > 0$ pomocí rozkladu vektoru (5.55) do báze vlastních funkcí $\hat{H}_+$, jejichž časový vývoj známe:

$$|\psi_-(t)\rangle = \sum_{j\in\mathscr{I}} e^{\frac{-i}{\hbar}E_jt}\langle\varphi_j|\psi_-(0)\rangle\,|\varphi_j\rangle. \tag{5.56}$$

Předpokládejme, že v čase $t_1 > 0$ provádíme měření energie a zajímá nás, s jakou pravděpodobností $W_{|\psi_-\rangle\to|\psi_+\rangle}(t_0,t_1)$ převedeme systém do stacionárního stavu $|\psi_+\rangle = |\varphi_1\rangle$. Dle očekávání je tato pravděpodobnost rovna

$$W_{|\psi_-\rangle\to|\psi_+\rangle}(t_0,t_1) = |\langle\psi_-(t_1)|\psi_+\rangle|^2 = |\langle\psi_-(t_1)|\varphi_1\rangle|^2,$$

kam dosazením za $|\psi_-(t_1)\rangle$ z (5.56) a (5.55) a využitím ortonormality báze $(|\varphi_j\rangle)_{j\in\mathscr{I}}$ dostaneme

$$\begin{aligned} W_{|\psi_-\rangle\to|\psi_+\rangle}(t_0,t_1) &= \left|\sum_{j\in\mathscr{I}} e^{\frac{i}{\hbar}E_jt_1}e^{\frac{i}{\hbar}E_-t_0}\langle\psi_-|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\varphi_1\rangle\right|^2 = \left|e^{\frac{i}{\hbar}E_1t_1+\frac{i}{\hbar}E_-t_0}\langle\psi_-|\varphi_1\rangle\right|^2 = \\ &= |\langle\psi_-|\varphi_1\rangle|^2 = |\langle\psi_-|\psi_+\rangle|^2. \end{aligned} \tag{5.57}$$

Výsledný vztah byl obdržen za velmi zjednodušujících podmínek – především jsme požadovali znalosti spekter i vlastních funkcí obou hamiltoniánů $\hat{H}_-$, $\hat{H}_+$. Získaný výsledek nicméně užijeme v následujících příkladech.

Příklad. Nekonečně hluboká jednorozměrná potenciální jáma šířky a, tj. $x \in (0,a)$, zdvojnásobí v čase $t = 0$ svou šířku, tj. $x \in (-a,a)$. S jakou pravděpodobností najdeme systém, který v čase $t < 0$ byl v základním stavu, v základním stavu v čase $t > 0$?

Tvar vlnových funkcí je na základě (5.51) následující:

$$|\psi_-\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi qx}{a}\right), \quad |\psi_+\rangle = \sqrt{\frac{1}{a}}\sin\left(\frac{\pi qx}{2a}\right).$$

[25] Jedná se o přibližnou metodu z důvodu předpokladu okamžité změny hamiltoniánu v čase $t = 0$. Vhodnější by bylo předpokládat, že ke změně hamiltoniánu dochází v časovém intervalu $(-\varepsilon,\varepsilon)$.

Základní stav $|\psi_{-0}\rangle$, resp. $|\psi_{+0}\rangle$ získáme při volbě $q = 1$. Jelikož $|\psi_{-0}\rangle$ není na $(-a, 0)$ definováno, bude hledaná pravděpodobnost $W_{|\psi_{-0}\rangle\to|\psi_{+0}\rangle}(t)$ dána dle (5.57) výrazem

$$W_{|\psi_{-0}\rangle\to|\psi_{+0}\rangle}(t) = |\langle\psi_{-0}|\psi_{+0}\rangle|^2 = \frac{\sqrt{2}}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right),$$

což po integraci dává

$$W_{|\psi_{-0}\rangle\to|\psi_{+0}\rangle}(t) = \frac{32}{9\pi^2} \cong 36\%.$$

Příklad. Mějme atom tricia s elektronem v základním stavu. V čase $t = 0$ dojde k β-rozpadu

$${}^3_1\mathrm{H} \xrightarrow{\beta} {}^3_2\mathrm{He}^+.$$

Určete pravděpodobnost, že po rozpadu nalezneme elektron v obalu ${}^3_2\mathrm{He}^+$ v základním stavu. S jakou pravděpodobností v prvním excitovaném stavu?

Normalizované vlastní funkce pro elektron v základním stavu atomu vodíku $|\psi_0^{\mathrm{H}}\rangle$ resp. kationtu helia $|\psi_0^{\mathrm{He}}\rangle$ mají tvar (viz (5.22))

$$\psi_0(r, \varphi, \vartheta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}, \tag{5.58}$$

kde v případě vodíku klademe $Z = 1$, v případě helia $Z = 2$. a_0 zde představuje Bohrův poloměr pro atom vodíku. Pravděpodobnost $W_{|\psi_0^{\mathrm{H}}\rangle\to|\psi_0^{\mathrm{He}}\rangle}$, že elektron v heliovém iontu nalezneme v základním stavu, je dle (5.57) rovna

$$W_{|\psi_0^{\mathrm{H}}\rangle\to|\psi_0^{\mathrm{He}}\rangle} = \left|\langle\psi_0^{\mathrm{H}}|\psi_0^{\mathrm{He}}\rangle\right|^2.$$

Dosazením explicitního tvaru vlnových funkcí (5.58) a po určení skalárního součinu dostáváme

$$W_{|\psi_0^{\mathrm{H}}\rangle\to|\psi_0^{\mathrm{He}}\rangle} = \frac{512}{719} \cong 70\%.$$

Přechod do 1. excitovaného stavu je komplikovanější z důvodu degenerace 1. excitovaného stavu atomu He^+. Díky Wigner–Eckartově teorému[26] ale systém může z $|\psi_{100}^{\mathrm{H}}\rangle$ přejít pouze do

$$|\psi_{200}\rangle = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}, \tag{5.59}$$

kde opět v případě iontu He^+ klademe $Z = 2$. Pravděpodobnost přechodu se rovná

$$W_{|\psi_0^{\mathrm{H}}\rangle\to|\psi_1^{\mathrm{He}}\rangle} = \frac{1}{4} = 25\,\%.$$

[26] Skalární součin $\langle\psi_{2lm}^{\mathrm{He}}|\psi_{100}^{\mathrm{H}}\rangle$, v pravděpodobnosti přechodu vystupující, lze interpretovat jako maticový element skalárního operátoru $\mathbb{1}$. Kvantová čísla l a m se tedy musejí shodovat s ketem, aby součin mohl být nenulový.

Předpokládejme dále, že máme rovnováhu mezi β-rozpadem tricia a deexcitací elektronů v obalu atomu helia $|\psi_1^{\mathrm{He}}\rangle \to |\psi_0^{\mathrm{He}}\rangle$. V důsledku této deexcitace je vyzářen foton o energii $40,8\,\mathrm{eV}$ (spadá do UV světla). Tento foton je možno absorbovat jiným materiálem a převést tak jeho energii ve viditelné světlo (předpokládejme, že se tak děje s účinností 100 %). Poločas rozpadu tricia je $T_{1/2} = 13.3\,\mathrm{let}$. Určete, kolik tricia je třeba k získání zdroje světla o světelném výkonu 1 W.

Postup nechám na bujné fantazii počtáře. Výsledek by měl být kolem 1.85 kg.

6 Propagátor

Otázka dráhového integrálu a propagátorů se historicky váže hlavně k postavě Richarda Feynmana, jehož pojednání o štěrbinovém experimentu lze doporučit jako zajímavou četbu pro rozšíření motivační části poznámek. Tato kapitola jinak vychází hlavně z knihy Quantum Field Theory [3].

6.1 Všechny možné historie

Uvažujme vlnovou funkci (pro jednoduchost jednorozměrnou) $\psi(q_i, t_i)$ v čase t_i. **Propagátor** $K\left(q_f, t_f; q_i, t_i\right)$ je jednoznačně určené integrační jádro, které nám umožní napsat vlnovou funkci v nějakém pozdějším čase t_f podobně jako v Huygens–Fresnelově principu pro vlnění:

$$\psi(q_f, t_f) = \langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | \psi_i \rangle = \int K\left(q_f, t_f; q_i, t_i\right) \psi(q_i, t_i) \mathrm{d}q_i \tag{6.1}$$

Pokud bychom za počáteční stav formálně dosadili zobecněný vlastní stav polohy, zůstal by na pravé straně (6.1) propagátor samotný, který je tak možné interpretovat jako amplitudu pravděpodobnosti přechodu z místa q_i v čase t_i do q_f v čase t_f. Nicméně odpovídající rozdělení pravděpodobnosti je pochopitelně nenormalizovatelné (protože takové bylo pro počáteční stav).

Rozdělme nyní časový interval $\langle t_i, t_f \rangle$ do dvou podintervalů $\langle t_i, t_m \rangle$ a $\left(t_m, t_f\right\rangle$. Pokud použijeme definici propagátoru dvakrát pro výpočet $\psi(q_f, t_f)$ z $\psi(q_i, t_i)$ přes pomocnou funkci $\psi(q_m, t_m)$, dostaneme

$$\psi(q_f, t_f) = \int \int K\left(q_f, t_f; q_m, t_m\right) K\left(q_m, t_m; q_i, t_i\right) \psi(q_i, t_i) \mathrm{d}q_i \mathrm{d}q_m, \tag{6.2}$$

což nám dává rovnost platnou pro propagátor

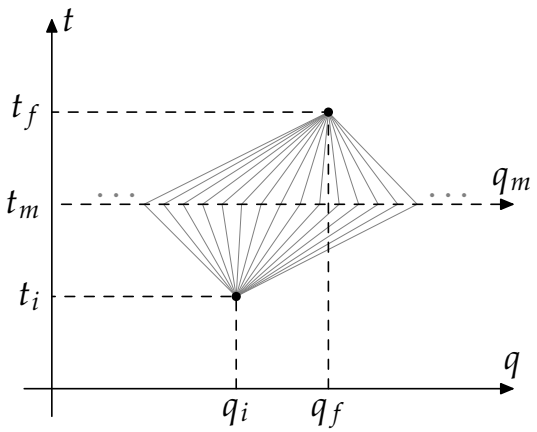
$$K\left(q_f, t_f; q_i, t_i\right) = \int K\left(q_f, t_f; q_m, t_m\right) K\left(q_m, t_m; q_i, t_i\right) \mathrm{d}q_m. \tag{6.3}$$

Jinými slovy na přechod z (q_i, t_i) do (q_f, t_f) můžeme nahlížet jako na přechod skrz *všechny možné mezibody* q_m, které mohou ležet i kdekoli mimo interval vymezený q_i a q_f, jak ukazuje obr. 8.

Hezká ilustrace tohoto principu je průchod světla optickou štěrbinou. Víme, že dochází k difrakci (ohybu), namísto toho, aby některé paprsky prošly a jiné byly pohlceny. Teprve když tloušťka štěrbiny jde k nekonečnu a světelné vlny tak skrz ní mohou projít kterýmkoli bodem roviny, dostáváme v limitě neporušený průchod paprsku.

Ukážeme nyní, že propagátor je vlastně maticový element operátoru časového vývoje. Ve Schrödingerově obraze

$$\psi(q_f, t_f) = \langle q_f | \psi(t_f) \rangle = \langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | \psi(t_i) \rangle = \int \underbrace{\langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | q_i \rangle}_{K\left(q_f, t_f; q_i, t_i\right)} \underbrace{\langle q_i | \psi(t_i) \rangle}_{\psi(q_i, t_i)} \mathrm{d}q_i.$$



Obrázek 8: Možné vývoje systému mezi fixními polohami q_i v čase t_i a q_f v čase t_f, uvažujeme-li mezistav v čase t_m, $t_i < t_m < t_f$.

Ještě elegantnější zápis získáme v Heisenbergově obraze, kde

$$|\psi^H\rangle = U(t,t_0)^{-1}|\psi^S(t)\rangle$$

pro libovolně fixně zvolený referenční čas t_0. Definujme zobecněný stav $|q,t\rangle$, který odpovídá zobecněnému vlastnímu stavu $|q\rangle$ v čase t, tedy

$$|q,t\rangle := U(t,t_0)^{-1}|q\rangle.$$

Tyto stavy mají význam pohybující se vztažné soustavy, protože

$$\langle q,t|\psi^H\rangle = \langle q|U(t,t_0)|\psi^S(t_0)\rangle = \langle q|\psi(t)\rangle = \psi(q,t). \tag{6.4}$$

Díky tomu, že ortonormální báze stavů zůstává při časovém vývoji ortonormální, můžeme psát

$$\langle q_f,t_f|\psi^H\rangle = \int \langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle\langle q_i,t_i|\psi^H\rangle \mathrm{d}q_i, \tag{6.5}$$

což díky (6.4) znamená

$$\psi(q_f,t_f) = \int \langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle\psi(q_i,t_i)\mathrm{d}q_i, \tag{6.6}$$

odsud plyne zápis

$$K\left(q_f,t_f;q_i,t_i\right) = \langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle. \tag{6.7}$$

6.2 Rovnice pro propagátor

Jakou rovnici propagátor musí splňovat zjistíme, když zkusíme spočítat jeho časovou derivaci (a q_f, t_f přeznačíme na q, t):

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}K\left(q,t;q_i,t_i\right) &= \langle q|i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}(t,t_i)|q_i\rangle = \langle q|\hat{H}\hat{U}(t,t_i)|q_i\rangle \\ \int \mathrm{d}y\langle q|\hat{H}|y\rangle\langle y|\hat{U}(t,t_i)|q_i\rangle &= \int \mathrm{d}y\langle q|\hat{H}|y\rangle K\left(y,t;q_i,t_i\right). \end{aligned} \tag{6.8}$$

Je-li $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q,t)$, potom

$$\langle q|\hat{H}|y\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}(\delta\left(q-y\right)) + V(q,t)\delta\left(q-y\right), \tag{6.9}$$

a po přetažení derivace z delta funkce k propagátoru dostaneme

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}K\left(q,t;q_i,t_i\right) = \int \mathrm{d}y\delta(q-y)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2}{\partial y^2}K\left(y,t;q_i,t_i\right) + \\ + \int \mathrm{d}yV(q,t)\delta(q-y)K\left(y,t;q_i,t_i\right). \end{aligned} \tag{6.10}$$

To dává:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}K\left(q,t;q_i,t_i\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}K\left(q,t;q_i,t_i\right) + V(q,t)K\left(q,t;q_i,t_i\right), \tag{6.11}$$

což je hledaná rovnice, která by ve 3D vypadala (postup úplně stejný):

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}K\left(\vec{x},t;\vec{x}_i,t_i\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta K\left(\vec{x},t;\vec{x}_i,t_i\right) + V(\vec{x},t)K\left(\vec{x},t;\vec{x}_i,t_i\right). \tag{6.12}$$

Neboli $K\left(\vec{x},t;\vec{x}_i,t_i\right)$ je řešením Schrödingerovy rovnice (jakožto funkce proměnné $\vec{x}$ parametrizovaná časem t) s počáteční podmínkou

$$K\left(\vec{x},t_i;\vec{x}_i,t_i\right) = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}_i). \tag{6.13}$$

Mnoho výpočtů se později zjednoduší, když navíc zavedeme propagátory respektující kauzalitu, tj. nulové pro $t_f < t_i$ resp. $t_f > t_i$: **retardovaný propagátor**

$$K^{(+)}\left(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i\right) = \theta(t_f-t_i)K\left(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i\right) \tag{6.14}$$

a **advancovaný propagátor**

$$K^{(-)}\left(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i\right) = \theta(t_i-t_f)K\left(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i\right), \tag{6.15}$$

kde θ je Heavisideova funkce.

6.3 Volná částice

Zde se budeme, jak název napovídá, zabývat systémem s hamiltoniánem $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$. Abychom si usnadnili postup, přejdeme nyní do hybností reprezentace, kde

$$\tilde{K}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right) \equiv \langle \vec{p}, t | \vec{p}_i, t_i \rangle, \tag{6.16}$$

podobně jako dříve. Když se podíváme na Schrödingerovu rovnici v této reprezentaci, obdržíme

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \tilde{K}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \tilde{K}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right). \tag{6.17}$$

Ta má řešení

$$\tilde{K}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right) = e^{\frac{-i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_i)} \delta^{(3)}\left(\vec{p} - \vec{p}_i\right), \tag{6.18}$$

resp. pro retardovaný/advancovaný propagátor obdobně:

$$\tilde{K}^{(\pm)}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right) = \theta\left(\pm(t - t_i)\right) \delta^{(3)}\left(\vec{p} - \vec{p}_i\right) e^{\frac{-i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_i)}. \tag{6.19}$$

Náš cíl je ovšem propagátor v q-reprezentaci. Abychom se k němu dostali, připomeneme si

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}}, \tag{6.20}$$

a přepíšeme výsledek v hybností reprezentaci do q-reprezentace

$$\begin{aligned}
\tilde{K}^{(\pm)}\left(\vec{x}, t; \vec{x}_i, t_i\right) &= \int \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle K^{(\pm)}\left(\vec{p}, t; \vec{p}_i, t_i\right) \langle \vec{p}_i | \vec{x}_i \rangle \mathrm{d}^3 p \mathrm{d}^3 p_i \\
&= \theta\left(\pm(t - t_i)\right) \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathrm{d}^3 p \mathrm{d}^3 p_i \delta^{(3)}\left(\vec{p} - \vec{p}_i\right) e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} e^{\frac{-i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_i)} e^{-i\frac{\vec{p}_i\vec{x}_i}{\hbar}} \\
&= \theta\left(\pm(t - t_i)\right) \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\frac{(\vec{x}-\vec{x}_i)\vec{p}}{\hbar}} e^{\frac{-i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t_i)},
\end{aligned} \tag{6.21}$$

což je ale divergentní integrál. To pro nás ale není překvapivé, i na levé straně je zobecněná funkce. Integrál lze přesto různými způsoby spočítat. Jedna cesta vedoucí k cíli by byla vektor $|\vec{x}_i\rangle$ v (6.21) nahradit funkcí k δ-funkci konvergující a limitu provést až jako poslední krok. V částicové fyzice je běžnější alternativou postup **regularizace**, který si na tomto snadném příkladu ilustrujeme.

Regularizaci provedeme nahrazením[27]

$$\frac{i}{2m} \longrightarrow \frac{i}{2m} + \varepsilon \tag{6.22}$$

ve finálním tvaru integrálu v (6.21), díky čemuž dostaneme v (6.21) integrál gaussovského typu s kladnou reálnou částí koeficientu, který rozhoduje o konvergenci. To nám umožní integrál vyčíslit, pročež provedeme limitu a pošleme ε do nuly.

[27] Často se potká ve tvaru funkčně ekvivalentního požadavku $m \to m + i\varepsilon$.

Pro zapomnětlivé připomeneme vzoreček platný pro $\mathrm{Re}\, a > 0$

$$\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}. \tag{6.23}$$

Po nahrazení a použití tohoto vzorečku dostáváme

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\theta\left(\pm(t-t_i)\right)}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{\pi}{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2m} \mp i\varepsilon\right)(t-t_i)}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{-(\vec{x}-\vec{x}_i)^2}{4\hbar^2\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2m} \mp i\varepsilon\right)(t-t_i)}\right), \tag{6.24}$$

což po zkrácení konstant a provedení limity dává výsledek

$$K^{(\pm)}\left(\vec{x},t;\vec{x}_i,t_i\right) = \theta\left(\pm(t-t_i)\right)\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_i)}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{im(\vec{x}-\vec{x}_i)^2}{2\hbar(t-t_i)}\right), \tag{6.25}$$

který si dobře zapamatujeme, protože spolu s výsledkem v hybnostní reprezentaci ho budeme extenzivně využívat v dalších kapitolách.

6.3.1 Rozplývání vlnového balíku

Nyní znovu navštívíme první cvičení z prvního semestru kvantové mechaniky. Nechť je na počátku náš systém ve stavu jednorozměrného gaussovského balíku, zbaveného fyzikálních rozměrů,

$$\psi_i(x,t=0) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-x^2}, \tag{6.26}$$

časový vývoj tohoto stavu je určen propagátorem volné částice jako

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \int \mathrm{d}x' K\left(x,t;x',t'=0\right)\psi_i(x'), \tag{6.27}$$

pokud označíme $\alpha = \frac{m}{2\hbar t}$, dosadíme za propagátor z předchozí kapitolky a za ψ_i dosadíme gaussovský balík, dostaneme

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \int \mathrm{d}x' \sqrt{\frac{\alpha}{i\pi}} e^{i\alpha(x-x')^2} e^{-x'^2}, \tag{6.28}$$

což je gaussovský integrál. Za pomoci (6.23) tak dostáváme

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{\alpha}{i\pi}} e^{i\alpha x^2} \sqrt{\frac{\pi}{1-i\alpha}} e^{\frac{-4\alpha^2x^2}{4(1-i\alpha)}} \\ &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{i\alpha}{i\alpha-1}} e^{\frac{-i\alpha}{i\alpha-1}x^2}.\end{aligned} \tag{6.29}$$

Z tohoto řešení dostaneme hustotu pravděpodobnosti

$$\rho = |\psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2\alpha^2}{\pi(1+\alpha^2)}} e^{-\frac{2\alpha^2}{1+\alpha^2}x^2}, \tag{6.30}$$

a to je na první pohled Gaussovo rozdělení se střední kvadratickou odchylkou

$$\sigma = \sqrt{\frac{1+\alpha^2}{2\alpha^2}} = \sqrt{\frac{m^2+(2\hbar t)^2}{2m^2}}. \tag{6.31}$$

Vlnový balík se rozplývá stejně jako v zimě. Všimněme si hlavně limit pro $t \to 0$, kde dostáváme původní vlnovou funkci, a $t \to +\infty$, kde σ roste asymptoticky lineárně v čase (shodně jako u Brownova pohybu).

7 Dráhový integrál

Propagátor udává časový vývoj systému. Z minulé kapitoly víme, že bychom ho mohli dostat z řešení Schrödingerovy rovnice. Ovšem propagátor se dá získat i z dráhového integrálu, což je objekt, který se pokusíme osvětlit v této kapitole.

7.1 Opravdu všechny možné historie

V kapitole 6 jsme pro propagátor odvodili vztah (6.3). Není důvod, proč místo jednoho mezičasu t_m nezjemnit rozdělení na N intervalů, jak ukazuje obrázek 9, a případně zkusit uvažovat limitu $N \to +\infty$. Uvažujme tedy propagátor zapsaný jako maticový element

$$\langle \vec{x}_f, t_f | \vec{x}_i, t_i \rangle = \langle \vec{x}_f | \hat{U}(t_f, t_i) | \vec{x}_i, t_i \rangle, \tag{7.1}$$

kde časový vývoj na intervalu $\langle t_i, t_f \rangle$ rozdělíme na malé podintervaly doby Δt, kde

$$\Delta t = \frac{t_f - t_i}{N+1}, \quad N \in \mathbb{N}. \tag{7.2}$$

Dále v časech $t_k = t_i + k\Delta t$ rozepíšeme mezistav vždy pomocí rozkladu jednotky

$$\mathbb{1} = \int \mathrm{d}^3 x_k |\vec{x}_k\rangle\langle\vec{x}_k| \tag{7.3}$$

a dostaneme tak

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_f, t_f | \vec{x}_i, t_i \rangle &= \int \mathrm{d}^3 x_1 \dots \mathrm{d}^3 x_N \\ &\qquad \langle \vec{x}_f | \hat{U}(t_f, t_N) | \vec{x}_N \rangle \langle \vec{x}_N | \hat{U}(t_N, t_{N-1}) | \vec{x}_{N-1} \rangle \dots \langle \vec{x}_1 | \hat{U}(t_1, t_i) | \vec{x}_i \rangle \\ &= \int \mathrm{d}^3 x_1 \dots \mathrm{d}^3 x_N \prod_{k=1}^{N+1} \langle \vec{x}_k | \hat{U}(t_k, t_{k-1}) | \vec{x}_{k-1} \rangle, \end{aligned} \tag{7.4}$$

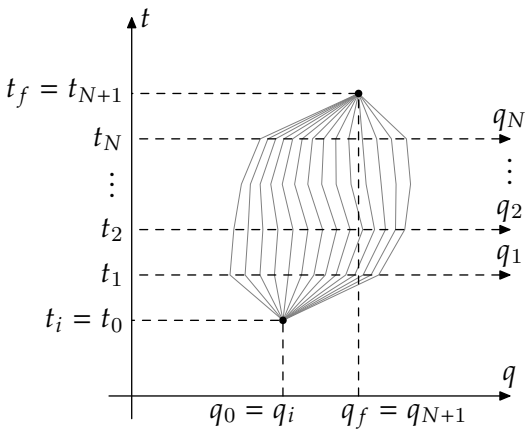
kde jsme pro pohodlnost označili též $(t_0, t_{N+1}) = (t_i, t_f)$ a $(\vec{x}_0, \vec{x}_{N+1}) = (\vec{x}_i, \vec{x}_f)$.

Z rovnice (3.20) je zřejmé, že pro malá Δt

$$\hat{U}(t_k, t_{k-1}) \approx I - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(t_k). \tag{7.5}$$

Pokud navíc předpokládáme $\hat{H}(t) = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{x}}, t)$ (jak ve zbytku kapitoly budeme), použitím vztahů $(1+az)(1+bz) \approx 1 + (a+b)z$ a $e^z \approx 1 + z$, obou platných do prvního řádu v z, dostáváme

$$\hat{U}(t_k, t_{k-1}) \approx I - \frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} - \frac{i}{\hbar} \Delta t V(\hat{\vec{x}}, t_k) \approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t V(\hat{\vec{x}}, t_k) \right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} \right). \tag{7.6}$$



Obrázek 9: Několik možných trajektorií mezi dvěma fixními polohami v ekvidistantním dělení času na $N+1$ intervalů.

Tento přepis obložíme vektory $|\vec{x}_i\rangle$ a použijeme výsledek (6.25) minulé kapitoly:

$$\begin{aligned}
&\langle \vec{x}_k|\hat{U}(t_k,t_{k-1})|\vec{x}_{k-1}\rangle \approx \\
&\quad\approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t V(\vec{x}_k,t_k)\right)\langle \vec{x}_k|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\right)|\vec{x}_{k-1}\rangle \\
&\quad= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t V(\vec{x}_k,t_k)\right)\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_k-t_{k-1})}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left(\frac{im(\vec{x}_k-\vec{x}_{k-1})^2}{2\hbar(t_k-t_{k-1})}\right) \\
&\quad= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left(\frac{im}{2\hbar}\Delta t\left(\frac{\vec{x}_k-\vec{x}_{k-1}}{t_k-t_{k-1}}\right)^2-\frac{i}{\hbar}\Delta t V(\vec{x}_k,t_k)\right)
\end{aligned} \tag{7.7}$$

Všimněme si pečlivě výrazu vzniklého tímto výpočtem v exponenciále, ve kterém již vystupují samé klasické proměnné (žádné operátory). Po vytknutí společných faktorů zbývá

$$\frac{i}{\hbar}\Delta t\left(\frac{m}{2}\left(\frac{\vec{x}_k-\vec{x}_{k-1}}{t_k-t_{k-1}}\right)^2-V(\vec{x}_k,t_k)\right), \tag{7.8}$$

kde výraz ve velké závorce je hodnota (klasického) lagrangiánu s formálně dosazenou rychlostí

$$L\left(x_k,\frac{\vec{x}_k-\vec{x}_{k-1}}{t_k-t_{k-1}},t_k\right). \tag{7.9}$$

V předchozím jsme použili řadu aproximací platných do prvního řádu v Δt. Budou tedy tím přesnější, čím Δt zvolíme nižší, a ideálně lze očekávat, že dosáhnou přesného výsledku v limitě $N\to+\infty$, kde $\Delta t\to 0$. Tehdy také integrace v (7.4) přes všechny kombinace $(x_1,x_2,\ldots,x_N)$ přejde v integraci přes *všechny trajektorie* a argument v (7.9) skutečně v rychlost v čase $t=t_k$ dané trajektorii odpovídající. Detaily oprávněnosti a existence takové limity se ve většině fyzikálních publikací nerozebírají.

Dosazením (7.7) do (7.4) a uvažováním limity $N \to +\infty$ tedy dospíváme k výsledku

$$\begin{aligned}\langle \vec{x}_f, t_f | \vec{x}_i, t_i \rangle &= \lim_{N\to+\infty} \int \mathrm{d}^3 x_1 \dots \mathrm{d}^3 x_N \prod_{k=1}^{N+1} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar \Delta t}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} L(x_k,(x_k - x_{k-1})/\Delta t, t_k)\Delta t} \\ &= \lim_{N\to+\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar \Delta t}\right)^{\frac{3(N+1)}{2}} \int \mathrm{d}^3 x_1 \dots \mathrm{d}^3 x_N e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{N+1} L(x_k,(x_k - x_{k-1})/\Delta t, t_k)\Delta t},\end{aligned} \tag{7.10}$$

což je definiční vztah **dráhového integrálu**. Pro zjednodušení zápisu se symbolicky zavádí „míra“ na prostoru všech trajektorií spojujících x_i s x_f v odpovídajících pevných časech t_i a t_f

$$\mathscr{D}\vec{x}(t) \equiv \lim_{N\to\infty} \left(\prod_{k=1}^{N} \mathrm{d}^3 x_k\right) \left(\frac{m(N+1)}{2\pi i\hbar (t_f - t_i)}\right)^{\frac{3(N+1)}{2}} \tag{7.11}$$

a rovnice zapisuje ve tvaru

$$\langle \vec{x}_f, t_f | \vec{x}_i, t_i \rangle = \int \mathscr{D}\vec{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} L(\vec{x},\dot{\vec{x}},t)\mathrm{d}t} = \int \mathscr{D}\vec{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(t)]}, \tag{7.12}$$

kde v exponentu v integrandu rozpoznáváme (klasickou) akci, dobře známou z teoretické fyziky. Tento integrál se interpretuje jako integrál přes všechny dráhy spojující počáteční a koncový bod v odpovídajících časech.

Obecně se lze setkat s tvrzením, že do integrálu (7.12) přispívají hlavně trajektorie blízké trajektorii extremální, klasické. To souvisí s pozorováním, že změna akce s výchylkou od trajektorie je v oblastech vzdálených od klasické trajektorie lineární, takže pouhým zvětšováním výchylky lze snadno najít dvojice trajektorií, které k dráhovému integrálu přispějí s opačnými znaménky. Výchylky od extremální trajektorie akci mění až ve druhém řádu, takže jejich členy e^{iS} interferují konstruktivně.

7.1.1 Výhody a nevýhody dráhového integrálu

Zápis pomocí dráhového integrálu umožňuje snadno zkonstruovat poruchový rozvoj propagátoru (ano, to nás čeká a nemine) a přes matematickou nekorektnost, kterou jsme si dovolili, výsledky dobře souhlasí s těmi, které jdou získat z tradičnějšího, operátorového, přístupu.

Nebylo dokázáno, zda $\mathscr{D}\vec{x}$ je mírou v pravém slova smyslu, a tak výpočty integrálů jsou matematicky nekorektní. (Výzva pro další generaci fyziků!)

Obdobná tvrzení platí i v kvantové teorii pole: co lze kvantovat kanonickým (operátorovým) přístupem, lze popsat i pomocí dráhového (funkcionálního) integrálu a fyzikálně měřitelné předpovědi jsou stejné. Ve většině případů je ale postup s dráhovým integrálem mnohem snazší (např. kalibrační teorie ve standardním modelu) a řadu systémů fyzikové jinak než pomocí dráhového integrálu popsat vůbec neumí. Proto se funkcionální integrál všeobecně v QFT (Quantum Field Theory) používá navzdory matematické nekorektnosti.

7.2 Volná částice

Náš nově nabitý kanón necháme pochopitelně poprvé vystřelit na volnou částici a spočítáme její propagátor přímo z definiční limity dráhového integrálu.

Již při prvním pohledu na výpočet, který nás čeká, je vidět, že bychom si měli připravit následující vzoreček (zobecnění gaussovských integrálů)

$$\int_{\mathbb{R}^N} e^{-\lambda \sum_{n=1}^{N+1}(x_n - x_{n-1})^2} \mathrm{d}x_1 \dots \mathrm{d}x_N = \sqrt{\frac{\pi^N}{(N+1)\lambda^N}} e^{-\frac{\lambda}{N+1}(x_{N+1}-x_0)^2}, \tag{7.13}$$

platný pro $\mathrm{Re}\,\lambda > 0$. Dokážeme ho indukcí.

První krok $N = 1$ dokážeme pomocí gaussovských integrálů (konvergentních díky stejné podmínce na λ):

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-\lambda((x_1-x_0)^2+(x_2-x_1)^2)} \mathrm{d}x_1 = e^{-\lambda(x_0^2+x_2^2)} \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} e^{\frac{4\lambda^2(x_0+x_2)^2}{4\cdot 2\lambda}} = \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} e^{-\frac{\lambda}{2}(x_0-x_2)^2},$$

indukční krok provedeme od $N-1$ k N:

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^N} e^{-\lambda \sum_{n=1}^{N+1}(x_n - x_{n-1})^2} \mathrm{d}x_1 \dots \mathrm{d}x_N &\overset{\text{IP}}{=} \int_{\mathbb{R}} \sqrt{\frac{\pi^{N-1}}{N\lambda^{N-1}}} e^{-\frac{\lambda}{N}(x_N-x_0)^2 - \lambda(x_{N+1}-x_N)^2} \mathrm{d}x_N = \\
&= \sqrt{\frac{\pi^{N-1}}{N\lambda^{N-1}}} e^{-\frac{\lambda}{N}x_0^2 - \lambda x_{N+1}^2} \sqrt{\frac{\pi N}{\lambda(N+1)}} e^{\frac{4\lambda^2(x_0+Nx_{N+1})^2 N}{4\lambda N^2(N+1)}} \\
&= \sqrt{\frac{\pi^N}{(N+1)\lambda^N}} e^{-\frac{\lambda}{N+1}(x_{N+1}-x_0)^2}.
\end{aligned} \tag{7.14}$$

Zpět k příkladu.

$$K_0\left(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_i, t_i\right) = \lim_{N\to\infty} \int \prod_{k=1}^{N+1} \mathrm{d}^3 x_k \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{3(N+1)}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{N+1}\frac{m}{2\Delta t}(\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})^2}, \tag{7.15}$$

každý z těchto integrálů je divergentní, opět provedeme regularizaci

$$\lambda = -\frac{im}{2\hbar\Delta t} \longrightarrow -\frac{i(m+i\varepsilon)}{2\hbar\Delta t}, \tag{7.16}$$

a provedeme výpočet pomocí připraveného vzorečku a pošleme ε do nuly:

$$\lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{3(N+1)}{2}} \left(\frac{2\pi\hbar\Delta t}{-im}\right)^{\frac{3N}{2}} \frac{1}{(N+1)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar\Delta t(N+1)}(\vec{x}_{N+1} - \vec{x}_0)^2\right). \tag{7.17}$$

Využijeme, že $\Delta t(N+1) = t_f - t_i$ a že $(\vec{x}_0, \vec{x}_{N+1}) = (\vec{x}_i, \vec{x}_f)$ a po zkrácení konstant dostáváme

$$K_0\left(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_i, t_i\right) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f - t_i)}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im(\vec{x}_f - \vec{x}_i)^2}{2\hbar(t_f - t_i)}}. \tag{7.18}$$

To je stejný výsledek, jako jsme dostali dříve v (6.25). Značení propagátoru volné částice jako $K_0(\dots)$ zde zavedené už budeme dodržovat až do konce poznámek.

7.3 Harmonický oscilátor

Ukážeme si nyní na příkladu harmonického oscilátoru, které trajektorie přispívají do dráhového integrálu nejvíc. Uvažujeme tedy langrangián 1D harmonického oscilátoru:

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{7.19}$$

Budeme nějak potřebovat formalizovat všechny trajektorie v konfiguračním prostoru, to uděláme rozdělením obecné trajektorie $x(t)$ následovně:

$$x(t) = x_{\mathrm{kl}}(t) + y(t), \tag{7.20}$$

kde $x_{\mathrm{kl}}(t)$ je klasická trajektorie, kterou lze získat např. z variace akce, a $y(t)$ je nějaká funkce, která nám právě umožní proběhnout všechny možné trajektorie. Obě funkce musejí zároveň odpovídat určitým okrajovým podmínkám, zvolíme je takto:

$$\begin{aligned} x(t_i) &= x_i = x_{\mathrm{kl}}(t_i) + 0, \\ x(t_f) &= x_f = x_{\mathrm{kl}}(t_f) + 0. \end{aligned} \tag{7.21}$$

Rádi bychom nyní využili zápisu (7.12) k výpočtu propagátoru. Tušíme, že se nám bude hodit si připomenout, že pro klasickou trajektorii platí

$$\delta S = 0 = \delta\left(\int_{x_{\mathrm{kl}}} L\mathrm{d}t\right). \tag{7.22}$$

Podívejme se na akci v exponentu (7.12)

$$S[x(t)] = S[x_{\mathrm{kl}}(t) + y(t)] = \int_{t_i}^{t_f}\left(\frac{m(\dot{x}_{\mathrm{kl}} + \dot{y})^2}{2} - \frac{m\omega^2}{2}(x_{\mathrm{kl}} + y)^2\right)\mathrm{d}t, \tag{7.23}$$

vnitřek integrálu lze rozepsat a dostat tak akci podél klasické trajektorie, akci podél $y(t)$ a smíšené členy

$$S[x(t)] = S[x_{\mathrm{kl}}(t)] + S[y(t)] + \int \ldots. \tag{7.24}$$

Poslední člen se dá rozepsat pomocí Taylorova rozvoje funkce dvou proměnných. Pro harmonický oscilátor a obecně pro tzv. separovatelné lagrangiány (lagrangiány kvadratické v x a $\dot{x}$) platí, že díky Euler–Lagrangeovým rovnicím pro klasickou trajektorii a okrajovým podmínkám (7.21), je poslední integrál roven nule. Pro ostatní lagrangiány to díky E.–L. rovnicím platí pouze pro první člen jeho Taylorova rozvoje.

Rozepišme nyní vztah (7.12) s využitím nově nabytých znalostí

$$\int \mathscr{D}x(t)e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]} = e^{\frac{i}{\hbar}S[x_{\mathrm{kl}}(t)]}\int_{\substack{y(t_0)=0\\ y(t_f)=0}} \mathscr{D}y(t)e^{\frac{i}{\hbar}S[y(t)]}, \tag{7.25}$$

a všimneme si, že integrál už nezávisí na $x_{\mathrm{kl}}(t_i)$ ani $x_{\mathrm{kl}}(t_f)$ a je to pouze funkce $(t_f - t_i)$.

Vyčíslíme nyní akci podél klasické trajektorie (viz též příklad 5.43 v [4]), studenti třetího ročníku již vědí, že E.–L. rovnice pro 1D LHO mají obecné řešení ve tvaru

$$x_{\mathrm{kl}} = a \sin \omega t + b \cos \omega t, \tag{7.26}$$

kde konstanty a a b určíme z podmínek (7.21)

$$x_i = a \sin \omega t_i + b \cos \omega t_i, \tag{7.27}$$
$$x_f = a \sin \omega t_f + b \cos \omega t_f. \tag{7.28}$$

Každý by tuto soustavu vyřešil svojí oblíbenou metodou a našel by

$$a = \frac{x_f \cos \omega t_i - x_i \cos \omega t_f}{\sin \omega (t_f - t_i)}, \tag{7.29}$$
$$b = \frac{x_f \sin \omega t_i - x_i \sin \omega t_f}{\sin \omega (t_f - t_i)}. \tag{7.30}$$

Po poměrně rozsáhlém výpočtu integrálu $S[x_{\mathrm{kl}}(t)]$, kam dosadíme klasickou trajektorii včetně konstant a a b, obdržíme

$$S[x_{\mathrm{kl}}(t)] = \frac{m\omega}{2} \frac{(x_f^2 + x_i^2) \cos \omega (t_f - t_i) - 2 x_i x_f}{\sin \omega (t_f - t_i)}. \tag{7.31}$$

Zbývající část v (7.25) určíme pomocí dvou triků. Za prvé využijeme unitárnosti časového vývoje, který si vhodně zapíšeme pomocí propagátoru

$$\psi(x, t_f) = \int \mathrm{d}y K\left(x, t_f; y, t_i\right) \psi(y, t_i), \tag{7.32}$$
$$\overline{\psi(x, t_f)} = \int \mathrm{d}z \overline{K\left(x, t_f; z, t_i\right)}\, \overline{\psi(z, t_i)}. \tag{7.33}$$

Unitárnost vývoje dává

$$\int \overline{\psi(x, t_f)} \psi(x, t_f) \mathrm{d}x = \int \overline{\psi(x, t_i)} \psi(x, t_i) \mathrm{d}x, \tag{7.34}$$

kam když vlevo dosadíme pomocí propagátoru, dostaneme

$$\int \mathrm{d}x \mathrm{d}y \mathrm{d}z K\left(x, t_f; y, t_i\right) \overline{K\left(x, t_f; z, t_i\right)} \psi(y, t_i) \overline{\psi(z, t_i)}, \tag{7.35}$$

což dohromady dává podmínku na propagátor

$$\int \mathrm{d}x \overline{K\left(x, t_f; z, t_i\right)} K\left(x, t_f; y, t_i\right) = \delta(z - y). \tag{7.36}$$

Jak už jsme dříve zjistili, hledaný propagátor LHO má tvar

$$K\left(x, t_f; y, t_i\right) = e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{\mathrm{kl}}(t)]} F(t_f - t_i), \tag{7.37}$$

což když dosadíme do podmínky (7.36), po několika úpravách obdžíme podmínku na absolutní hodnotu F, která dá řešení

$$|F|^2 = \frac{m\omega}{2\pi\hbar \sin\omega(t_f - t_i)}, \tag{7.38}$$

neboli

$$|F| = \frac{1}{2}\sqrt{2}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar \sin\omega(t_f - t_i)}}. \tag{7.39}$$

Fázi F téměř určíme z druhého triku, budeme požadovat, aby pro $\omega \to 0$ propagátor přešel v propagátor volné částice. Je konvence výsledek zapisovat takto

$$F(t_f - t_i) = \frac{1}{2}\sqrt{2}\sqrt{\frac{-im\omega}{\pi\hbar \sin\omega(t_f - t_i)}}, \tag{7.40}$$

což celkově dá hledaný výsledek ve tvaru

$$K\left(x_f, t_f; x_i, t_i\right) = \frac{1}{2}\exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar}\frac{(x_f^2 + x_i^2)\cos\omega(t_f - t_i) - 2x_i x_f}{\sin\omega(t_f - t_i)}\right)\sqrt{\frac{-2im\omega}{\pi\hbar \sin\omega(t_f - t_i)}}. \tag{7.41}$$

8 Teorie rozptylu

8.1 Propagátor poruchově

Poruchový rozvoj propagátoru je klíčovým objektem pro kvantovou teorii rozptylu. Budeme uvažovat nejjednodušší případ klasického hamiltoniánu

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \varepsilon V(\vec{x}, t). \tag{8.1}$$

Rozvoj $K\left(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_i, t_i\right)$ lze odvodit přímo z formulky pro operátor časového vývoje (5.41) se členy (5.42), získanými prostředky nestacionární poruchové teorie. Postačí převést zpět z Diracova do Schrödingerova obrazu:

$$\begin{aligned}
\hat{U}(t_f, t_i) &= \hat{U}_0(t_f, t_i) \sum_{n=0}^{+\infty} \varepsilon^n U^{D^{(n)}}(t_f, t_i) = \sum_{n=0}^{+\infty} \varepsilon^n U^{(n)}(t_f, t_i), \\
\hat{U}^{(n)}(t_f, t_i) &= \hat{U}_0(t_f, t_i) U^{D^{(n)}}(t_f, t_i) = \\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int\int \cdots \int_{t_0<t_1<t_2<\ldots<t_n<t_f} dt_1 dt_2 \ldots dt_n \hat{U}_0(t_f, t_i) \hat{V}^D(t_n) \ldots \hat{V}^D(t_2) \hat{V}^D(t_1).
\end{aligned} \tag{8.2}$$

Využitím

$$\hat{V}^D(t) = \hat{U}_0(t, t_0)^{-1} \hat{V}(t) \hat{U}_0(t, t_0)$$

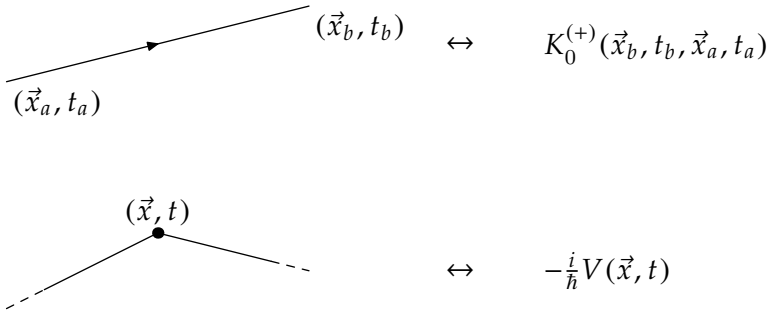
a vztahů (3.18) platných pro $\hat{U}_0$ dostáváme po troše úsilí zápis ve Schrödingerově obraze

$$\begin{aligned}
\hat{U}^{(n)}(t_f, t_i) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n & \int\int \cdots \int_{t_0<t_1<t_2<\ldots<t_n<t_f} dt_1 dt_2 \ldots dt_n \\
& \hat{U}_0(t_f, t_n) \hat{V}(t_n) \hat{U}_0(t_n, t_{n-1}) \ldots \hat{U}_0(t_2, t_1) \hat{V}(t_1) \hat{U}_0(t_1, t_0).
\end{aligned} \tag{8.3}$$

Vzpomeneme si, že propagátor je jednoduše maticovým elementem $\hat{U}(t_f, t_i)$, tedy platí

$$\begin{aligned}
K\left(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_i, t_i\right) &= \sum_{n=0}^{+\infty} \varepsilon^n K^{(n)}\left(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_i, t_i\right), \\
K^{(n)}\left(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_i, t_i\right) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int\int \cdots \int_{t_0<t_1<t_2<\ldots<t_n<t_f} dt_1 dt_2 \ldots dt_n \\
&\quad \langle \vec{x}_f | \hat{U}_0(t_f, t_n) \hat{V}(t_n) \hat{U}_0(t_n, t_{n-1}) \ldots \hat{U}_0(t_2, t_1) \hat{V}(t_1) \hat{U}_0(t_1, t_0) | \vec{x}_i \rangle.
\end{aligned} \tag{8.4}$$

Mezi každou dvojici operátorů vložme rozklad jednotky. Mezipoloh postačí uvažovat n, protože maticový element $\hat{V}(t)$ v x-reprezentaci je úměrný δ-funkci. Tím přepíšeme



Obrázek 10: Úsečka a vrchol ve Feynmanově diagramu

všechny evoluční operátory v posledním vztahu na propagátory:

$$K^{(n)}\left(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_i, t_i\right) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0<t_1<t_2<\ldots<t_n<t_f} \int \cdots \int dt_1 dt_2 \ldots dt_n \int d^3\vec{x}_1 \int d^3\vec{x}_2 \cdots \int d^3\vec{x}_n$$
$$K_0\left(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_n, t_n\right) V(\vec{x}_n, t_n) K_0\left(\vec{x}_n, t_n; \vec{x}_{n-1}, t_{n-1}\right) V(\vec{x}_{n-1}, t_{n-1}) \times$$
$$\ldots \times K_0\left(\vec{x}_2, t_2; \vec{x}_1, t_1\right) V(\vec{x}_1, t_1) K_0\left(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0\right). \tag{8.5}$$

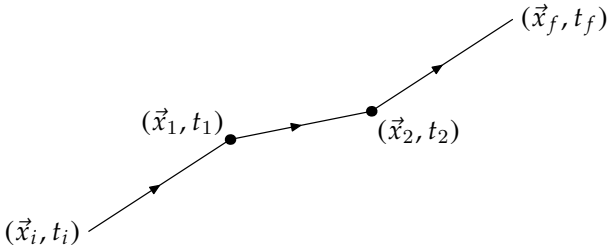
Závislost mezí integrálu jsme v kapitole 5.3 vyřešili zavedením operátoru časového uspořádání $\hat{T}$. Formalizmus propagátoru nám umožňuje nové elegantní řešení použitím retardovaného propagátoru, který si „ohlídá“ správné uspořádání mezí sám a jinak se redukuje na nulu. Můžeme tedy rozdělit všechny integrály a dospět k finální podobě poruchového členu (úvaha funguje pouze, pokud jsme měli správně uspořádané $t_i < t_f$ na začátku, proto $K^{(+)}$ i na levé straně):

$$K^{(+)(n)}\left(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_i, t_i\right) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \prod_{k=1}^{n} \left(\int d^3\vec{x}_k \int_{t_i}^{t_f} dt_k\right)$$
$$K_0^{(+)}\left(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_n, t_n\right) V(\vec{x}_n, t_n) K_0^{(+)}\left(\vec{x}_n, t_n; \vec{x}_{n-1}, t_{n-1}\right) \times$$
$$\ldots \times K_0^{(+)}\left(\vec{x}_2, t_2; \vec{x}_1, t_1\right) V(\vec{x}_1, t_1) K_0^{(+)}\left(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0\right). \tag{8.6}$$

8.1.1 Feynmanovy diagramy

Existuje velmi jednoduchý a slavný způsob, jak si n-tý člen rozvoje zapamatovat: poprvé se zde setkáváme s Feynmanovými diagramy, těmi nejzákladnějšími. Náš Feynmanův diagram bude pouze lomená čára a body na ní. Každá úsečka spojující místo $\vec{x}_a$ v čase t_a s $\vec{x}_b$ v čase t_b odpovídá v integrálu (8.6) propagátoru volné částice mezi těmito místy a časy. Každý bod zlomu odpovídá potenciálu v místě $\vec{x}$ a čase t (obrázek 10).

Všechny takto získané členy se vynásobí a výraz se integruje přes souřadnice zlomů na čáře, které smějí být kdekoli v prostoru. n-tý člen tak odpovídá lomené čáře s n zlomy, počátku a konci lomené čáry se připíší $\vec{x}_i, t_i$ a $\vec{x}_f, t_f$ a k-tému zlomu $\vec{x}_k, t_k$. Např. Feynmanův diagram druhého členu (8.6) by byl jako na obrázku 11.



Obrázek 11: Feynmanův diagram popisující člen $K^{(+)(2)}\left(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_i, t_i\right)$

V QFT se pak Feynmanovy diagramy hodí mnohem víc, protože spojnice mohou být různé (vlnovka, ...) a reprezentovat tak různé druhy částic a body mohou spojovat i víc než jednu částici a popisovat tak různé interakce více druhů částic. Pro n-tý řád výpočtu potom diagramy slouží jako jednoduchá pomůcka pro nalezení všech příspěvků do propagátoru (každé interakci bude odpovídat jiný diagram a najít všechny diagramy je relativně snadné).

8.2 Použití dráhového integrálu pro popis rozptylu

Předpokládáme, že počáteční podmínkou pro popis rozptylu je stav s přesně určenou hybností ($\vec{p}_i$) a energií, rovinná vlna [5]

$$\psi_{in}(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{\vec{p}_i\vec{x}}{\hbar} - \frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_i^2}{2m}t}, \tag{8.7}$$

očekáváme, že částice je v počátečním stavu dostatečně daleko od oblasti interakce, takže vliv potenciálu na ni lze zanedbat. Rovinná vlna je však zcela delokalizovaná, proto abychom se nedostali do sporu, předpokládáme **adiabatickou hypotézu**[28]

$$V(\vec{x}, t) \underset{t\to\pm\infty}{\longrightarrow} 0. \tag{8.8}$$

Tento stav se vyvíjí podle rovnice

$$|\psi^{(+)}(t)\rangle = \hat{U}(t, t_i)|\psi_{in}(t_i)\rangle,$$

kde, aby interakce měla čas se plně projevit, uvažujeme limitu $t_i \to -\infty$.

Obvykle nás zajímá pravděpodobnost nalezení částice v čase $t_f \to +\infty$ s danou hodnotou hybnosti $\vec{p}_f$, tj. asymptoticky ve stacionárním stavu

$$\psi_{out}(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{\vec{p}_f\vec{x}}{\hbar} - \frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_f^2}{2m}t}. \tag{8.9}$$

[28] Tento i další předpoklady plynou z idealizace stavů; kdybychom použili vlnový balík, problémy by zmizely, ale konkrétní předpovědi by byly mnohem těžší na výpočet.

Všimneme si, že oba limitní stavy lze zapsat pomocí časového vývoje volné částice ($\hat{U}_0$) jako

$$\psi_{in/out}(\vec{x},t) = \hat{U}_0(t,0)|\vec{p}_{i/f}\rangle. \tag{8.10}$$

Uvažujme výraz

$$S_{\vec{p}_f,\vec{p}_i} = \lim_{t_f\to+\infty}\langle\psi_{out}(t_f)|\psi^{(+)}(t_f)\rangle = \lim_{t_f\to+\infty}\lim_{t_i\to-\infty}\langle\psi_{out}(t_f)|\hat{U}(t_f,t_i)|\psi_{in}(t_i)\rangle, \tag{8.11}$$

ve kterém převedeme bra i ket pravé strany pomocí (8.10) a přepíšeme jako

$$S_{\vec{p}_f,\vec{p}_i} = \lim_{t_f\to+\infty}\lim_{t_i\to-\infty}\langle\vec{p}_f|\hat{U}_0(0,t_f)\hat{U}(t_f,t_i)\hat{U}_0(t_i,0)|\vec{p}_i\rangle. \tag{8.12}$$

Toto jsou maticové elementy operátoru, který se nazývá ***S*-matice** nebo **matice/operátor rozptylu**:

$$\hat{S} = \lim_{t_f\to+\infty}\lim_{t_i\to-\infty}\hat{U}_0(0,t_f)\hat{U}(t_f,t_i)\hat{U}_0(t_i,0), \tag{8.13}$$

a často se rozkládá na součin **Møllerových operátorů**

$$\hat{\Omega}^{(\pm)} = \lim_{t\to\mp\infty}\hat{U}(0,t)\hat{U}_0(t,0)$$

jako

$$\hat{S} = \left(\hat{\Omega}^{(-)}\right)^{\dagger}\left(\hat{\Omega}^{(+)}\right). \tag{8.14}$$

Operátor časového vývoje v (8.11) vyjádříme pomocí propagátoru,

$$S_{\vec{p}_f,\vec{p}_i} = \lim_{t_{i/f}\to\mp\infty}\int \mathrm{d}^3x_i\mathrm{d}^3x_f\overline{\psi_{out}}(\vec{x}_f,t_f)K^{(+)}\left(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i\right)\psi_{in}(\vec{x}_i,t_i),$$

a ten rozepíšeme pomocí (8.6):

$$\begin{aligned}S_{\vec{p}_f,\vec{p}_i} = &\lim_{t_{i/f}\to\mp\infty}\int \mathrm{d}^3x_i\mathrm{d}^3x_f\overline{\psi_{out}}(\vec{x}_f,t_f)K_0^{(+)}\left(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_i,t_i\right)\psi_{in}(\vec{x}_i,t_i) + \\ &+\left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}\right)\lim_{t_{i/f}\to\mp\infty}\int \mathrm{d}^3x_i\mathrm{d}^3x_f\mathrm{d}^3x_1\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t_1 \\ &\quad\overline{\psi_{out}}(\vec{x}_f,t_f)K_0^{(+)}\left(\vec{x}_f,t_f;\vec{x}_1,t_1\right)V(\vec{x}_1,t_1)K_0^{(+)}\left(\vec{x}_1,t_1;\vec{x}_i,t_i\right)\psi_{in}(\vec{x}_i,t_i) + \\ &+\ldots\end{aligned} \tag{8.15}$$

Ukazuje se, že pro explicitní výpočet jednotlivých elementů je výhodné přejít do

hybnostní reprezentace, kde[29]

$$\tilde{\psi}_{in/out}(\vec{p},t) = \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}_{i/f})e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}t},$$
$$\tilde{K}_0^{(+)}(\vec{p}_2,t_2;\vec{p}_1,t_1) = \theta(t_2-t_1)\delta^{(3)}(\vec{p}_2-\vec{p}_1)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_2^2}{2m}(t_2-t_1)},$$
$$\tilde{V}(\vec{p}_2-\vec{p}_1,t) = \int \frac{\mathrm{d}^3x}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_2-\vec{p}_1)\vec{x}} V(\vec{x},t)$$

a rozvoj (8.15) přechází na tvar

$$\begin{aligned} S_{\vec{p}_f,\vec{p}_i} = &\lim_{t_{i/f}\to\mp\infty} \int \mathrm{d}^3p_1 \overline{\tilde{\psi}_{out}}(\vec{p}_1,t_f)\theta(t_f-t_i)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_1^2}{2m}(t_f-t_i)}\tilde{\psi}_{in}(\vec{p}_i,t_i) + \\ &+ \left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}\right) \lim_{t_{i/f}\to\mp\infty} \int \mathrm{d}^3p_1\mathrm{d}^3p_2 \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t_1 \\ &\quad \overline{\tilde{\psi}_{out}}(\vec{p}_2,t_f)\theta(t_f-t_1)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_2^2}{2m}(t_f-t_1)}\tilde{V}(\vec{p}_2-\vec{p}_1,t_1)\theta(t_1-t_i)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_1^2}{2m}(t_1-t_i)}\tilde{\psi}_{in}(\vec{p}_i,t_i) + \\ &+ \dots \end{aligned} \tag{8.16}$$

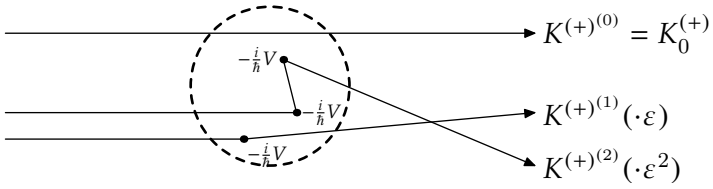
a po dosazení explicitního tvaru $\tilde{\psi}$

$$\begin{aligned} S_{\vec{p}_f,\vec{p}_i} = &\lim_{t_{i/f}\to\mp\infty} \theta(t_f-t_i)\delta^{(3)}(\vec{p}_f-\vec{p}_i) + \\ &+ \left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}\right) \lim_{t_{i/f}\to\mp\infty} \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t_1 \theta(t_f-t_1)e^{\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_f^2}{2m}t_1}\tilde{V}(\vec{p}_f-\vec{p}_i,t_1)\theta(t_1-t_i)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_i^2}{2m}t_1} + \\ &+ \dots \end{aligned}$$

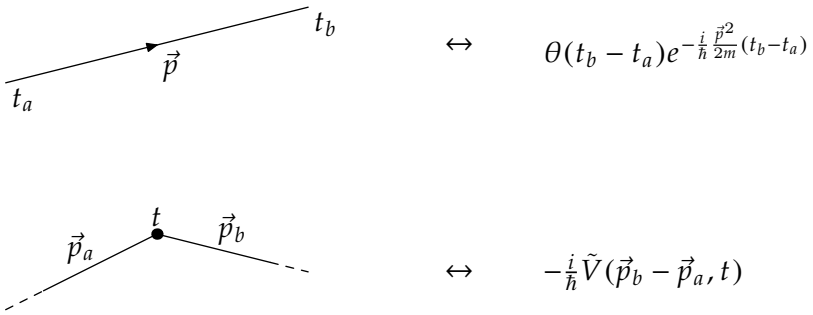
V posledním výrazu je snadné vyhodnotit limity počátečního a koncového času interakce. Z časových integrálů od t_i do t_f se stanou integrály od $-\infty$ do $+\infty$ a θ-funkce zahrnující jeden z krajních časů vymizí (nahradí se 1). Vnitřní θ-funkce zůstanou, jak ukazuje další člen rozvoje:

$$\begin{aligned} S_{\vec{p}_f,\vec{p}_i} = &\delta^{(3)}(\vec{p}_f-\vec{p}_i) + \\ &+ \left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}\right) \int \mathrm{d}t_1 e^{\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_f^2}{2m}t_1}\tilde{V}(\vec{p}_f-\vec{p}_i,t_1)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_i^2}{2m}t_1} + \\ &+ \left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}\right)^2 \int \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\mathrm{d}^3p_1 \\ &\quad e^{\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_f^2}{2m}t_2}\tilde{V}(\vec{p}_f-\vec{p}_1,t_2)\theta(t_2-t_1)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_1^2}{2m}(t_2-t_1)}\tilde{V}(\vec{p}_1-\vec{p}_i,t_1)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_i^2}{2m}t_1} + \\ &+ \dots \end{aligned} \tag{8.17}$$

[29] Rozdíl hybností v argumentu $\tilde{V}$ reprezentuje stejnou závislost maticových elementů $\langle\vec{p}_2|\hat{V}(t)|\vec{p}_1\rangle$. Dále využíváme toho, že platí $\langle\vec{x}_2|\hat{H}|\vec{x}_1\rangle = \hat{H}\delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2)$.



Obrázek 12: Možné dráhy částice odpovídající poruchovým členům 0., 1. a 2. řádu při průchodu interakční oblastí



Obrázek 13: Úsečky a vrcholy v budování členů rozvoje propagátoru v p-reprezentaci

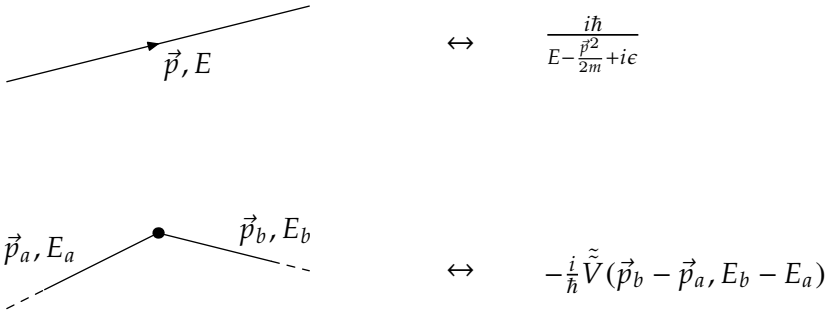
Tento rozvoj se interpretuje tak, že první člen odpovídá situaci, kdy k žádné interakci nedojde a částice pouze proletí beze změny hybnosti, a pro účely rozptylu se ignoruje. Druhý člen odpovídá jednomu zapůsobení poruchy dané operátorem $\hat{V}(t)$, které může proběhnout v jakýkoli okamžik $t_1 \in (-\infty, +\infty)$ a může změnit hybnost dle maticového elementu $\hat{V}(t)$ v hybnostní reprezentaci. Další členy obsahují časově uspořádaný součin (díky přítomnosti funkcí θ) více takových událostí a jsou úměrné vyšším mocninám poruchového parametru ε. Tuto interpretaci ukazuje obrázek 12.

Feynmanovy diagramy pro zapamatování výsledku je potřeba trochu upravit vzhledem k faktu, že v důsledku přechodu od x- k p-reprezentaci přestal být operátor potenciální energie $\hat{V}(t)$ multiplikativní (nebo v jazyce maticových elementů diagonální). Zato propagátor hybnost zachovává. Proto příspěvek k integrandu za každý vrchol bude potřeba určit ze vstupní a výstupní hybnosti a času t, zatímco člen odpovídající úsečce obsahuje počáteční a koncový čas a hybnost podél pohybu. Obrázek 10 se tedy změní tak, že místo indexů $\vec{x}$ u *vrcholů* budou indexy $\vec{p}$ u *spojnic*, viz obrázek 13.

8.2.1 Od času k energii

Je také možné, i když pro naše účely poněkud zbytné, provést Fourierovu transformaci v čase. Tento postup je běžný hlavně v QFT a je to tedy příprava na další rok.

Nejprve si potřebujeme připravit vzoreček pro regularizovanou Fourierovu trans-



Obrázek 14: Feynmanovy diagramy v energii a hybnosti

formaci $\theta(t)$,[30]

$$\int_{\mathbb{R}} e^{i(\omega+i\varepsilon)t}\theta(t)\mathrm{d}t = \int_0^\infty e^{i(\omega+i\varepsilon)t}\mathrm{d}t = \frac{1}{i(\omega+i\varepsilon)}\left[e^{i(\omega+i\varepsilon)t}\right]_0^\infty = \frac{-1}{i(\omega+i\varepsilon)} = \frac{i}{\omega+i\varepsilon}.$$

Pokud nyní označíme

$$\begin{aligned}\tilde{\tilde{V}}(\vec{p}_2-\vec{p}_1, E_2-E_1) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^4}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}t e^{\frac{i}{\hbar}((E_2-E_1)t-(\vec{p}_2-\vec{p}_1)\vec{x})}V(\vec{x},t),\\ \tilde{\tilde{K}}^{(+)}(\vec{p}_2,E_2;\vec{p}_1,E_1) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2 e^{\frac{i}{\hbar}E_2t_2}\tilde{K}^{(+)}(\vec{p}_2,t_2;\vec{p}_1,t_1)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t_1},\end{aligned} \tag{8.18}$$

už máme skoro všechno připravené na rozvoj v energii, ještě vyčíslíme explicitně K_0 propagátor volné částice. Krátký výpočet s regularizací a použitím odvozeného vzorečku dá

$$\tilde{\tilde{K}}_0^{(+)}(\vec{p}_2,E_2;\vec{p}_1,E_1) = \lim_{\varepsilon\to 0^+}\delta^{(3)}(\vec{p}_2-\vec{p}_1)\delta(E_2-E_1)\frac{i\hbar}{E_1-\frac{\vec{p}_1^2}{2m}+i\varepsilon}, \tag{8.19}$$

kde limitu z regularizace nemůžeme hned odstranit, protože kdybychom za E_0 dosadili, měli bychom problém s divergencí.

n-tý člen rozvoje propagátoru opět dostaneme z upravených Feynmanových diagramů, kde každé úsečce je přiřazena hybnost a energie a člen se získá poskládáním členů dle obrázku 14. Krajním úsečkám diagramu přiřadíme $E_i, \vec{p}_i$ a $E_f, \vec{p}_f$, vnitřním oindexované dvojice. Za E_i a E_f se do integrálu dosadí $\vec{p}_i^2/2m$ a $\vec{p}_f^2/2m$ a přes vnitřní energie a hybnosti se integruje. Výsledek vyjde opět v energetické reprezentaci a je možné jej převést do hybnostní pomocí inverzního vztahu k (8.18). Jako poslední krok se provede limita $\varepsilon \to 0_+$. Typicky k výpočtu budete potřebovat reziduální větu z analýzy.

[30] Limita lze provést pouze ve smyslu zobecněných funkcí, nahrazení $\varepsilon \to 0$ by dalo nesprávný výsledek.

8.2.2 Coulombův rozptyl

Odvozený vztah (8.17) lze vyzkoušet na Coulombově rozptylu, který nás v prvním řádu dovede k Rutherfordově formuli, známé z Teoretické fyziky. Jako první krok bude potřeba si připravit Fourierovu transformaci Coulombova potenciálu

$$V = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}, \tag{8.20}$$

tedy bude třeba spočítat

$$\tilde{V}(\vec{p}_2 - \vec{p}_1, t) = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_2 - \vec{p}_1)\vec{x}\right)}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{r} \mathrm{d}^3x =: v(\vec{p}_2 - \vec{p}_1). \tag{8.21}$$

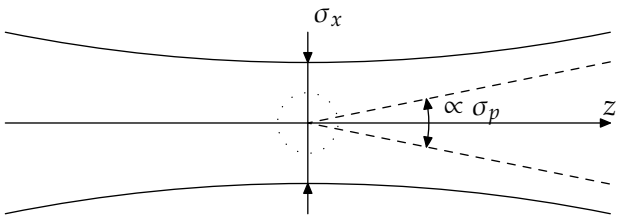
To je divergentní integrál a opět ho musíme regularizovat, to provedeme přenásobením vnitřku integrálu e^{-ar}, $a > 0$, a nakonec položíme $a \to 0$. Integraci provedeme ve sférických souřadnicích s osou z natočenou ve směru $\vec{p}$

$$\begin{aligned}
v(\vec{p}) &= \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x} - ar\right)}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{r} \mathrm{d}^3x \Bigg|_{a=0} \\
&= \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0(2\pi\hbar)^3} \int e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta - ar} r \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}r \mathrm{d}\varphi \Bigg|_{a=0} \\
&= \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{\varepsilon_0(2\pi\hbar)^3} \int_0^\pi \underbrace{[\ldots]}_{0} + \frac{1}{a + \frac{i}{\hbar}p\cos\theta} \int_0^\infty e^{-(\frac{i}{\hbar}p\cos\theta + a)r} \mathrm{d}r \sin\theta \mathrm{d}\theta \Bigg|_{a=0} \\
&\vdots \\
&= \frac{Ze^2}{(2\pi)^3\varepsilon_0\hbar p^2},
\end{aligned}$$

kde $p = |\vec{p}|$. Tento mezivýsledek dosadíme (8.17) s volbou $\varepsilon = 1$ (malost opravy předpokládáme již vyjádřenou malou hodnotou konstanty e). Podíváme se pouze na opravu prvního řádu: nultý řád odpovídá minutí rozptylového jádra a vyšší řády zanedbáme.[31] V integraci přes čas najdeme Fourierovu transformaci jedničky, která dá jako výsledek δ-funkci

$$\begin{aligned}
S_{\vec{p}_f,\vec{p}_i} &= -\frac{i}{\hbar} \frac{Ze^2}{(2\pi)^3\varepsilon_0\hbar(\vec{p}_f - \vec{p}_i)^2} \int \mathrm{d}t_1 \exp\left(\frac{it_1}{\hbar}\left(\frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m} - \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}\right)\right) \\
&= -\frac{i}{\hbar} \frac{Ze^2}{(2\pi)^2\varepsilon_0(\vec{p}_f - \vec{p}_i)^2} \delta\left(\frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m} - \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}\right).
\end{aligned}$$

[31] Poctivější výpočet by ukázal, že zanedbáváme nekonečno, ale vyřešení takové drobné nepříjemnosti přenecháme částicovým fyzikům.



Obrázek 15: Parametry dopadající vlny

Náš konečný cíl je určit závislost účinného průřezu rozptylu na prostorovém úhlu, to jest

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = A\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\Omega}, \tag{8.22}$$

kde A představuje plošný průřez svazku dopadajících částic. Nastává rozpor s dříve položeným předpokladem rovinné dopadající vlny, protože ta má nekonečný průřez. Předvedeme si tedy (protentokrát) úplný výpočet, ve kterém uvažujeme superpozici rovinných vln s hybnostmi blízkými $\vec{p}_0$,

$$|\psi_{in}\rangle = \int \mathrm{d}^3\Delta p \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{3/4}} e^{-\frac{(\Delta\vec{p})^2}{4\sigma_p^2}} |\vec{p}_0 + \Delta\vec{p}\rangle,$$

kde σ_p určuje rozptyl hybností $\ll |p_0|$. To je minimalizující vlnový balík, který v čase $t = 0$ prochází počátkem souřadnic se střední hybností $\vec{p}_0$. Potom amplituda pravděpodobnosti naměření výsledné hybnosti $\vec{p}_f$ je

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}_f|\hat{S}|\psi_{in}\rangle &= \int \mathrm{d}^3\Delta p \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{3/4}} e^{-\frac{(\Delta\vec{p})^2}{4\sigma_p^2}} S_{\vec{p}_f,\vec{p}_0+\Delta\vec{p}} \\ &= -\frac{i\alpha}{(2\pi\sigma_p^2)^{3/4}\hbar\pi} \int \mathrm{d}^3\Delta p \frac{1}{(\vec{p}_f - \vec{p}_0 - \Delta\vec{p})^2} \delta\left(\frac{\vec{p}_f^2}{2m} - \frac{(\vec{p}_0+\Delta\vec{p})^2}{2m}\right) e^{-\frac{(\Delta\vec{p})^2}{4\sigma_p^2}},\end{aligned} \tag{8.23}$$

kde

$$\alpha = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}.$$

Argument δ-funkce rozepíšeme jako

$$\frac{\vec{p}_f^2}{2m} - \frac{(\vec{p}_0+\Delta\vec{p})^2}{2m} = \frac{\vec{p}_f^2 - \vec{p}_0^2 - 2\vec{p}_0\cdot\Delta\vec{p}}{2m} + O\big(|\Delta\vec{p}|^2\big)$$

a uvažujeme $\vec{p}_0 = (0, 0, p_0)$, tedy

$$\delta\left(\frac{\vec{p}_f^2}{2m} - \frac{(\vec{p}_0+\Delta\vec{p})^2}{2m}\right) \approx \delta\left(\frac{p_0}{m}\left(\Delta p_z - \frac{\vec{p}_f^2 - p_0^2}{2p_0}\right)\right)$$

Protože dále je integrand nezanedbatelný pouze pro $|\Delta\vec{p}| \lesssim \sigma_p \ll p_0$ (díky exponenciále) a pro $|\vec{p}_f| \approx |\vec{p}_0 + \Delta\vec{p}| \approx p_0$ (díky δ-funkci), můžeme v argumentu nahradit

$$\frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m} - \frac{(\vec{p}_0 + \Delta\vec{p})^2}{2m} \approx \frac{p_0}{m}\left(\Delta p_z - \frac{(|\vec{p}_f| - p_0)(|\vec{p}_f| + p_0)}{2p_0}\right) \approx \frac{p_0}{m}\left(\Delta p_z - (|\vec{p}_f| - p_0)\right).$$

To nám umožní částečně zintegrovat (8.23) přes Δp_z:

$$\langle \vec{p}_f|\hat{S}|\psi_{in}\rangle \approx -\frac{i\alpha m}{(2\pi\sigma_p^2)^{3/4}\hbar\pi p_0}\int \mathrm{d}^2\Delta p \frac{1}{(\vec{p}_f - \vec{p}_0 - \Delta\vec{p})^2} e^{-\frac{(\Delta\vec{p})^2}{4\sigma_p^2} - \frac{(|\vec{p}_f| - p_0)^2}{4\sigma_p^2}}.$$

Dále v integrandu díky stejnému pozorování o velikosti $\vec{p}_f$ aproximujeme

$$(\vec{p}_f - \vec{p}_0 - \Delta\vec{p})^2 = \vec{p}_f^{\,2} + \vec{p}_0^{\,2} - 2\vec{p}_f\cdot\vec{p}_0 + O(|\Delta\vec{p}|) \approx 2p_0^2(1-\cos\vartheta) = 4p_0^2\sin^2\frac{\vartheta}{2}, \quad (8.24)$$

kde ϑ je úhel rozptýlené vlny $\vec{p}_f$ od směru dopadající vlny $\vec{p}_0$ (osy z). Zanedbali jsme $\Delta\vec{p}$ v jakékoli mocnině, aby se snáze integrovalo ve zbytku, což je již jen dvourozměrný Gaussův integrál

$$\begin{aligned}
\langle \vec{p}_f|\hat{S}|\psi_{in}\rangle &\approx -\frac{i\alpha m}{(2\pi\sigma_p^2)^{3/4}\hbar\pi p_0}\frac{1}{4p_0^2\sin^2\frac{\vartheta}{2}} e^{-\frac{(|\vec{p}_f| - p_0)^2}{4\sigma_p^2}} \int \mathrm{d}^2\Delta p e^{-\frac{(\Delta\vec{p})^2}{4\sigma_p^2}} \\
&= -\frac{i\alpha m}{(2\pi\sigma_p^2)^{3/4}\hbar\pi p_0}\frac{1}{4p_0^2\sin^2\frac{\vartheta}{2}} e^{-\frac{(|\vec{p}_f| - p_0)^2}{4\sigma_p^2}} 4\pi\sigma_p^2 \\
&= -\frac{i\alpha m\sqrt{\sigma_p}}{(2\pi)^{3/4}\hbar p_0^3\sin^2\frac{\vartheta}{2}} e^{-\frac{(|\vec{p}_f| - p_0)^2}{4\sigma_p^2}}
\end{aligned}$$

Tento výsledek odpovídá hustotě pravděpodobnosti naměření $\vec{p}_f$

$$w(\vec{p}_f) = \frac{\sigma_p}{(2\pi)^{3/2}}\left(\frac{\alpha m}{\hbar p_0^3\sin^2\frac{\vartheta}{2}}\right)^2 e^{-\frac{(|\vec{p}_f| - p_0)^2}{2\sigma_p^2}}$$

a celkové pravděpodobnosti (integrované ve sférických souřadnicích použitím prostorového úhlu $\mathrm{d}\Omega = \sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta\mathrm{d}\varphi$)

$$\begin{aligned}
P &= \int p_f^2 \mathrm{d}p_f \mathrm{d}\Omega w(\vec{p}_f) = \int \mathrm{d}\Omega \frac{\sigma_p}{(2\pi)^{3/2}}\left(\frac{\alpha m}{\hbar p_0^3\sin^2\frac{\vartheta}{2}}\right)^2 \int \mathrm{d}p_f p_f^2 e^{-\frac{(|\vec{p}_f| - p_0)^2}{2\sigma_p^2}} \\
&\approx \int \mathrm{d}\Omega \underbrace{\frac{\sigma_p^2}{2\pi}\left(\frac{\alpha m}{\hbar p_0^2\sin^2\frac{\vartheta}{2}}\right)^2}_{dP/d\Omega}
\end{aligned}$$

Nakonec si vzpomeneme, že neurčitost hybnosti v x a v y velikosti σ_p odpovídají díky Heisenbergovým relacím neurčitosti v poloze (viz obrázek 15)

$$\sigma_x = \sigma_y = \frac{\hbar}{2\sigma_p}$$

a tedy ploše svazku $A \propto \pi\big(\hbar/(2\sigma_p)\big)^2$, a dosadíme do (8.22)[32]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \left(\frac{\hbar}{2\sigma_p}\right)^2 \frac{\sigma_p^2}{2\pi} \left(\frac{\alpha m}{\hbar p_0^2 \sin^2\frac{\vartheta}{2}}\right)^2 = \left(\frac{\alpha m}{2p_0^2 \sin^2\frac{\vartheta}{2}}\right)^2 = \left(\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 m v_0^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}}. \quad (8.25)$$

To je slavná **Rutherfordova formule**. Svůj název nese po autorovi experimentu, který ukázal rozložení náboje v látce a prosadil planetární model atomu nad pudingovým. Experimenty probíhaly v letech 1909–1914 a první vysvětlení jejich výsledku podal E. Rutherford v roce 1911. Jednalo se o bombardování zlaté folie α částicemi, podle pudingového modelu by se při srážení částice neměly rozptylovat do prostoru (i zpětně), ale pouze mírně vychylovat z původního směru. Zatímco kdyby náboj byl soustředěn v protonovém *jádře*, docházelo by ke zpětným odrazům a i odrazům do různých směrů. Při pohledu na vzoreček, který později dostal jméno Rutherfordův, vidíme, že se Rutherford nespletl se svojí, ryze kinematickou, předpovědí (nezapomínejte, že jsme napsali pouze derivaci účinného průřezu, ne přímo vztah pro průřez samotný). Nutno poznamenat, že sami objevitelé nejprve chtěli pozorovat rozptylování částic na pudingovém modelu, ale detektory za folií ne a ne dávat správné hodnoty (dokonce je kvůli tomu podezřívali, že nefungují), vše se ale napravilo, když detektor umístili před folii i do dalších míst kolem a našli chybějící částice, které se rozptylovaly i zpětně.

V současnosti Rutherfordova formule hraje nezastupitelnou roli v *HEIS* (High-energy ion scattering) metodách ve spektroskopii. Měřením účinného průřezu srážek v různých prostorových úhlech lze totiž určit protonové číslo látky, kterou bombardujeme, a tím i určit její prvkové složení. Při započítání rozptylování na elektronech lze určit hloubku, do které záření v materiálu pronikne v závislosti na energii dopadajícího záření (*stopping power*). Dohromady je tak možné zjistit řadu informací o zkoumaném materiálu.

Při pohledu na výsledek (8.25) a aproximaci (8.24) vidíme, že všechny fyzikálně podstatné členy lze získat použitím $S_{\vec{p}_f,\vec{p}_i}$ jako amplitudy pravděpodobnosti a umocněním na druhou. To samozřejmě není možné kvůli přítomnosti δ-funkce. Nicméně po jejím *škrtnutí* a umocnění na druhou zbyde rozdíl již jen v přítomnosti několik konstant ($2\pi\hbar$ a hmotnosti). Proto takto kompletní postup stačí obvykle provést jednou a zapamatovat si tyto rozdíly jako „opravu“ pro ostatní instance.

[32] Gaussovský svazek o rozptylu σ_x nemá jasnou hranici, ale blízko středu má hustotu pravděpodobnosti blízkou konstantě $1/(2\pi\sigma_x^2)$. Dosadíme tedy plošný obsah $A = 2\pi\sigma_x^2$, odpovídající rovnoměrnému rozdělení po celé ploše.

9 Partiční suma

Nezávisí-li $\hat{H}$ explicitně na čase, lze propagátor přepsat s pomocí báze $(|\psi_j\rangle)_{j\in\mathscr{J}}$, $\hat{H}|\psi_j\rangle = E_j|\psi_j\rangle$ na

$$\begin{aligned} K(\vec{x}_2,t_2;\vec{x}_1,t_1) =: K(\vec{x}_2;\vec{x}_1;t_2-t_1) &= \langle \vec{x}_2,t_2|\vec{x}_1,t_1\rangle \\ &= \sum_n \langle \vec{x}_2,t_2|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\vec{x}_1,t_1\rangle \\ &= \sum_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(t_2-t_1)\right)\psi_n(\vec{x}_2)\overline{\psi}_n(\vec{x}_1). \end{aligned}$$

Pokud se formálně označí $t_2 - t_1 = -i\beta\hbar$, dostáváme matici hustoty Gibbsova rozdělení v x-reprezentaci

$$K(\vec{x}_2;\vec{x}_1;-i\beta\hbar) = \sum_n e^{-\beta E_n}\psi_n(\vec{x}_2)\overline{\psi}_n(\vec{x}_1) = \langle \vec{x}_2|e^{-\beta\hat{H}}|\vec{x}_1\rangle.$$

Metody výpočtu propagátoru tedy můžeme použít pro získání tohoto objektu.

Z nezávislosti stopy na volbě báze a jejích vzorců v energetické a v x-reprezentaci můžeme určit partiční funkci

$$Z(\beta) = \sum_n e^{-\beta E_n} = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\hat{H}}\right) = \int \mathrm{d}^3x K(\vec{x};\vec{x};-i\hbar\beta),$$

Úplně stejně jako ve statistické fyzice se nyní může odvodit, že střední hodnoty a další momenty se dají vyjádřit jako

$$\begin{aligned} \langle E\rangle_{\hat{\rho}} &= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z(\beta)), \\ \langle (E-\langle E\rangle)^2\rangle_{\hat{\rho}} &= \frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\ln(Z(\beta)), \\ &\vdots \end{aligned}$$

9.1 Použití k výpočtu středních hodnot pozorovatelných ve vakuovém stavu

Uvažujme pozorovatelnou $\hat{A}$ a stav $|0\rangle$ s minimální energií. Úloha určení střední hodnoty $\langle A\rangle_{|0\rangle}$ je obzvlášť důležitá v teorii pole, se kterou se setkáme v poslední kapitole, a kde je mnoho problémů možno převést na hledání **vakuových středních hodnot**.

Trik, který se použije k výpočtu takové střední hodnoty operátoru $\hat{A}$, závisejícího jen

na $A = A(\vec{x})$, je následující:

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{A}|0\rangle &= \lim_{T\to 0^+} \frac{\mathrm{Tr}\left(\hat{A}\hat{\rho}(T)\right)}{Z(\beta)} = \lim_{\beta\to+\infty} \frac{\mathrm{Tr}\left(\hat{A}\hat{\rho}(\beta)\right)}{Z(\beta)} \\ &= \lim_{\beta\to+\infty} \frac{\int \mathrm{d}^3x \sum_n e^{-\beta E_n}\psi_n(\vec{x})\overline{\psi}_n(\vec{x})A(\vec{x})}{Z(\beta)} \\ &= \lim_{\beta\to+\infty} \frac{\int \mathrm{d}^3x A(\vec{x})K(\vec{x};\vec{x};-i\beta\hbar)}{Z(\beta)}.\end{aligned} \tag{9.1}$$

Do (9.1) dosadíme za propagátor pomocí dráhového integrálu

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \lim_{\beta\to+\infty} \frac{1}{Z(\beta)} \int \mathscr{D}\vec{x}(\tau)A(\vec{x}(0)) \exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} L_{\text{Eukl.}}(\vec{x}(\tau),\dot{\vec{x}}(\tau),\tau)\mathrm{d}\tau\right),$$

kde se integruje přes všechny uzavřené trajektorie $\vec{x}(\tau) : \langle 0, \beta\hbar\rangle \to \mathbb{R}^3$, $\vec{x}(0) = \vec{x}(\beta\hbar)$ a $L_{\text{Eukl.}}$ získáme nahrazením:

$$t \to -i\tau, \tag{9.2}$$

$$\mathrm{d}t \to -i\mathrm{d}\tau, \tag{9.3}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \to i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}. \tag{9.4}$$

Toto nahrazení dává

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m\dot{\vec{x}}^2 - V(\vec{x}) \\ \to L_{\text{Eukl.}} &= -\frac{1}{2}m\dot{\vec{x}}^2 - V(\vec{x}),\end{aligned} \tag{9.5}$$

takže $L_{\text{Eukl.}} \leq 0$ pro kladné V. Abychom mohli pokračovat dál, musíme si definovat další pojem.

9.1.1 Funkcionální derivace

Bez soustředění se na matematickou korektnost se zde stručně seznámíme s **funkcionální derivací**. Je-li

$$F[\eta] = \int G(\eta, \dot{\eta}, \ddot{\eta}, \ldots, \eta^{(k)}, t)\mathrm{d}t, \tag{9.6}$$

kde $\eta : \langle a, b\rangle \to \mathbb{R}$ s příslušnými derivacemi, zavedeme funkcionální derivaci

$$\frac{\delta F}{\delta \eta(t)} \tag{9.7}$$

pomocí výpočtu variace F:

$$\delta F[\eta] = \int_a^b \frac{\delta F}{\delta \eta(t)}\delta\eta(t)\mathrm{d}t. \tag{9.8}$$

Příklad takového systému jsme už viděli v [4]

$$S[\eta] = \int_a^b L(\eta, \dot{\eta}, t)\mathrm{d}t, \tag{9.9}$$

kde $\frac{\delta S}{\delta \eta(t)}$ dává přesně levou stranu Euler–Lagrangeových rovnic. Při výpočtu tedy rozvineme funkci $G(\eta, \dot{\eta}, \ddot{\eta}, \ldots, \eta^{(k)}, t)$ do Taylorovy řady a ponecháme jen první řád.

Často lze psát

$$\frac{\delta F}{\delta \eta(t)} = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \frac{1}{\varepsilon} \left(F[\eta + \varepsilon\delta(t)] - F[\eta] \right), \tag{9.10}$$

podobně jako jsme to provedli při výpočtu propagátoru LHO dráhovým integrálem.

Vraťme se k výpočtu střední hodnoty pozorovatelné $\hat{A}$ ve stavu $|0\rangle$. Označíme si

$$Z[\beta, \vec{\eta}] = \int \mathscr{D}\vec{x}(\tau) \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \left\{ L_{\text{Eukl.}}(\vec{x}(\tau), \dot{\vec{x}}(\tau), \tau) + \vec{x}(\tau) \cdot \vec{\eta}(\tau) \right\} \mathrm{d}\tau \right), \tag{9.11}$$

kde dráhový integrál je opět přes všechny uzavřené trajektorie $\vec{x} : \langle 0, \hbar\beta \rangle \to \mathbb{R}^3$.

Zapišme $A(\vec{x})$ pomocí vytvořujícího funkcionálu (Taylorova rozvoje)

$$A(\vec{x}) = \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n}} x_1^{n_1} x_2^{n_2} x_3^{n_3} \equiv \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n}} \vec{x}^{\vec{n}}, \tag{9.12}$$

potom

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \lim_{\beta \to +\infty} \frac{1}{Z(\beta)} \int \mathscr{D}\vec{x}(\tau) \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n}} \vec{x}^{\vec{n}}(0) \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \left\{ L_{\text{Eukl.}} + \vec{x}\vec{\eta} \right\} \mathrm{d}\tau \right) \Bigg|_{\vec{\eta}=0},$$

kde každé $x_i^k(0)$ rozepíšeme pomocí funkcionální derivace jako $\left(\frac{\hbar\delta}{\delta\eta_i(0)} \right)^k$ díky exponenciále, která za nimi následuje. Obdržíme tak výsledek ve velmi kompaktní formě, zapsaný pomocí zavedeného označení

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \lim_{\beta \to +\infty} \frac{1}{Z(\beta)} A\left(\frac{\hbar\delta}{\delta\eta_1(0)}, \frac{\hbar\delta}{\delta\eta_2(0)}, \frac{\hbar\delta}{\delta\eta_3(0)} \right) Z[\beta, \vec{\eta}] \Big|_{\vec{\eta}(\tau) \equiv 0}. \tag{9.13}$$

To je mimořádně užitečný vztah pro zájemce o QFT. Zápisem funkcionálních derivací v závorce máme na mysli dosazení za příslušné složky $\vec{x}$ do vytvořujícího funkcionálu pro $A(\vec{x})$.

10 Reprezentace vícečásticových systémů

Nechť Hilbertův prostor jedné částice je nějaký separabilní $\mathscr{H}$, na němž zvolíme konečnou nebo spočetnou bázi $(|1\rangle, |2\rangle, \ldots) = (|i\rangle)_{i\in\mathscr{I}}$.

Uvažujme n částic stejného typu, t.j. nerozlišitelných; jak vypadá báze příslušného Hilbertova prostoru

$$\mathscr{H}_n = \begin{cases} \mathscr{S}\big(\underbrace{\mathscr{H}\otimes\mathscr{H}\ldots\mathscr{H}\otimes\mathscr{H}}_{n\text{-krát}}\big), \\ \mathscr{A}\big(\underbrace{\mathscr{H}\otimes\mathscr{H}\ldots\mathscr{H}\otimes\mathscr{H}}_{n\text{-krát}}\big), \end{cases} \tag{10.1}$$

kde $\mathscr{S}$ a $\mathscr{A}$ označuje symetrickou či antisymetrickou část? (Proč ty jsou pro nerozlišitelné částice nutné, jsme odvozovali v [5].)

Označme si m_k index vektoru v bázi k-tého Hilbertova prostoru v (10.1), dohromady tak dostaneme vektor přirozených čísel – multiindex $(m_1, \ldots, m_n) \in \mathbb{N}^n$. Ten parametrizuje bázi celkového Hilbertova prostoru, protože ta je tvořena normovanými vektory

$$\frac{\mathscr{S}/\mathscr{A}\left(|m_1\rangle\otimes|m_2\rangle\otimes\ldots\otimes|m_n\rangle\right)}{\|\ldots\|}, \tag{10.2}$$

kde $\mathscr{S}$, resp. $\mathscr{A}$ působící na vektor značí jeho ortogonální projekci na odpovídající stavový prostor. Takto bychom ovšem mnoho stavů započítali několikrát, při vyčíslování báze si tedy zavedeme podmínku $m_1 \le m_2 \le \ldots \le m_n$, což takovým kolizím zabrání. Pro fermiony je podmínku ještě potřeba posílit na $m_1 < m_2 < \ldots < m_n$, jinak by antisymetrizace v případech s rovností dávala nulové vektory.

10.1 Obsazovací čísla, Fockův prostor

Ukazuje se býti užitečným místo $(m_1, \ldots, m_n)$ parametrizovat bázi tzv. **obsazovacími čísly** $(n_1, n_2, \ldots)$, $n_i \in \mathbb{N}_0$ a $\sum_{i\in\mathscr{I}} n_i = n$, která se definují jako

$$n_i = \#\left\{k \in \hat{n} : m_k = i\right\},$$

kde $\hat{n} = \{1, 2, \ldots, n\}$. Obsazovací číslo n_i tedy představuje počet částic ve stavu $|i\rangle$. Pomocí obsazovacích čísel zapíšeme stav (10.2) jako

$$|n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots\rangle = \frac{\mathscr{S}/\mathscr{A}\big(\overbrace{|1\rangle\otimes\ldots\otimes|1\rangle}^{n_1\text{-krát}}\otimes\overbrace{|2\rangle\otimes\ldots\otimes|2\rangle}^{n_2\text{-krát}}\ldots\big)}{\|\ldots\|}. \tag{10.3}$$

Pro ferminony musíme vyžadovat $\forall i : n_i \in \{0, 1\}$.[33] Při překročení jednoho fermionu na bázový stav by antisymetrizace dala nulový vektor a normalizace by nebyla definovaná.

[33] To znamená, že v (10.3) budou hodnoty n_i značit přítomnost nebo nepřítomnost daného členu.

Naším cílem je formalizovat Hilbertův prostor pro libovolný počet částic, tj. prostor, který by obsahoval stavy se všemi možnými počty částic v různých stavech a jejich superpozice. Tento prostor se nazývá **Fockův prostor** a pro fermiony a bosony se definuje zvlášť. Označme

$$\mathscr{H}^{\otimes k} = \underbrace{\mathscr{H} \otimes \ldots \otimes \mathscr{H}}_{k\text{-krát}}, \tag{10.4}$$

kde $\mathscr{H}$ je stále Hilbertův prostor jedné částice, a kde dodefinujeme $\mathscr{H}^{\otimes 0} = \mathbb{C}$. S pomocí této notace např. pro bosony hned umíme napsat hledaný prostor jako direktní součet prostoru pro vakuum ($\mathbb{C}$), prostoru jedné částice, dvou, ...

$$\mathscr{F}_B(\mathscr{H}) = \mathbb{C} \oplus \mathscr{H} \oplus \mathscr{S}(\mathscr{H}^{\otimes 2}) \oplus \ldots = \sum_{k=0}^{+\infty} \mathscr{S}(\mathscr{H}^{\otimes k}), \tag{10.5}$$

a stejně tak pro fermiony

$$\mathscr{F}_F(\mathscr{H}) = \mathbb{C} \oplus \mathscr{H} \oplus \mathscr{A}(\mathscr{H}^{\otimes 2}) \oplus \ldots = \sum_{k=0}^{+\infty} \mathscr{A}(\mathscr{H}^{\otimes k}). \tag{10.6}$$

Je hned vidět, že pro $\dim \mathscr{H} < \infty$ tak dostáváme

$$\begin{aligned} \dim \mathscr{F}_B(\mathscr{H}) &= \infty, \\ \dim \mathscr{F}_F(\mathscr{H}) &= 2^{\dim \mathscr{H}}. \end{aligned}$$

Z konstrukce Fockova prostoru dále vyplývá, že pokud $\mathscr{H}$ je separabilní, $\mathscr{F}_B(\mathscr{H})$ i $\mathscr{F}_F(\mathscr{H})$ jsou separabilní Hilbertovy prostory, pokud dodefinujeme skalární součin pro $n_1 \neq n_2$, $|\psi\rangle \in \mathscr{H}^{\otimes n_1}$ a $|\varphi\rangle \in \mathscr{H}^{\otimes n_2}$ jako

$$\langle \psi | \varphi \rangle = 0 \tag{10.7}$$

a pro $n_1 = n_2 = n$ využijeme definice skalárního součinu na tenzorovém součinu prostorů – pro $|\psi_1\rangle \ldots |\psi_n\rangle$, $|\varphi_1\rangle \ldots |\varphi_n\rangle$ definujeme

$$(\langle \psi_1| \ldots \langle \psi_n|)\,(|\varphi_1\rangle \ldots |\varphi_n\rangle) = \langle \psi_1|\varphi_1\rangle \ldots \langle \psi_n|\varphi_n\rangle. \tag{10.8}$$

S pomocí těchto skalárních součinů už umíme spočítat skalární součin libovolných dvou vektorů z Fockova prostoru, obecný direktní součet by se rozložil na součet jednotlivých skalárních součinů, jak je zvykem.

10.2 Bosonové kreační a anihilační operátory

Zavádět Fockův prostor nemá mnoho významu bez operátorů, které by vyjadřovaly zobrazení mezi jednotlivými částmi direktního součtu, tj. měnily počet částic v systému. Zavedeme zde kreační a anihilační operátory, které mají velký význam pro druhou kvantizaci.[34]

[34] Jestliže vám připomínají formalizmus kolem harmonického oscilátoru ze zimy, jste na dobré cestě.

Prvně se soustřeďme na bosonové operátory v bosonovém Fockově prostoru. Budeme požadovat, aby **kreační operátor** $\hat{a}_i^\dagger$ přidával do systému jednu částici v i-tém stavu, tj. pro bázové vektory

$$\hat{a}_i^\dagger : \mathscr{F}_B(\mathscr{H}) \to \mathscr{F}_B(\mathscr{H}) : \hat{a}_i^\dagger \, |n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \beta_{n_i} |n_1, \ldots, n_i + 1, \ldots\rangle,$$

kde konstanta β_{n_i} prozatím zůstává neurčena. Když už budeme mít kreační operátor, odpovídající **anihilační operátor** definujeme pomocí hermitovského sdružení

$$\hat{a}_i = \left(\hat{a}_i^\dagger\right)^\dagger. \tag{10.9}$$

Abychom viděli, jaké konstanty β'_{n_i} zvolit u anihilačních operátorů, rozepíšeme si jejich působení ve skalárním součinu

$$\begin{aligned}
\langle m_1, \ldots, m_i, \ldots | \left(\hat{a}_i^\dagger\right)^\dagger | n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle &= \overline{\langle n_1, \ldots, n_i, \ldots | \, \hat{a}_i^\dagger \, | m_1, \ldots, m_i, \ldots\rangle} \\
&= \overline{\beta_{n_i} \langle n_1, \ldots, n_i, \ldots | m_1, \ldots, m_i + 1, \ldots\rangle} \\
&= \overline{\beta_{n_i}} \delta_{n_1, m_1} \ldots \delta_{n_i, m_i + 1} \ldots \\
&= \begin{cases} 0 & \text{pro } n_i = 0 \\ \ldots & \text{pro } n_i > 0 \end{cases} \\
&= \overline{\beta_{n_i - 1} \langle n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots | m_1, \ldots, m_i, \ldots\rangle} \\
&= \overline{\beta_{n_i - 1}} \langle m_1, \ldots, m_i, \ldots | n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots\rangle,
\end{aligned}$$

neboli vidíme, že

$$\hat{a}_i |n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \begin{cases} 0 & \text{pro } n_i = 0, \\ \overline{\beta_{n_i - 1}} |n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots\rangle & \text{pro } n_i > 0. \end{cases} \tag{10.10}$$

Vhodnou volbu konstant β_{n_i} najdeme z volby komutačních relací kreačního a anihilačního operátoru. Nejprve si ale připravíme $\left[\hat{a}_i, \hat{a}_j\right]$ pro $n_i, n_j > 0$

$$\begin{aligned}
\left[\hat{a}_i, \hat{a}_j\right] |n_1, \ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle &= \overline{\beta_{n_i - 1} \beta_{n_j - 1}} |n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots, n_j - 1, \ldots\rangle \\
&\quad - \overline{\beta_{n_j - 1} \beta_{n_i - 1}} |n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots, n_j - 1, \ldots\rangle \\
&= 0,
\end{aligned}$$

pro $n_i = 0 \vee n_j = 0$ nebo pro $i = j$ je výsledek stejný triviálně. Úplně stejně by se ukázalo, že kreační operátory vzájemně komutují. Zkusme nyní pro $i \neq j$

$$\begin{aligned}
\left[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\right] |n_1, \ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle &= \overline{\beta_{n_i - 1}} \beta_{n_j} |n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots, n_j + 1, \ldots\rangle \\
&\quad - \beta_{n_j} \overline{\beta_{n_i - 1}} |n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots, n_j + 1, \ldots\rangle \\
&= 0
\end{aligned}$$

a nakonec pro $i = j$

$$\left[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger\right] |n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \overline{\beta_{n_i}}\beta_{n_i}|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle - \beta_{n_i-1}\overline{\beta_{n_i-1}}|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle.$$

Poslední komutátor položíme roven jedničce, abychom se co nejvíce přiblížili lineárnímu harmonickému oscilátoru. Celkově tedy pokládáme

$$\left[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\right] = \delta_{ij}\mathbb{1}. \tag{10.11}$$

Ke splnění postačí volba $\beta_{n_i} = \sqrt{n_i + 1}$:

$$\overline{\beta_{n_i}}\beta_{n_i} - \beta_{n_i-1}\overline{\beta_{n_i-1}} = \sqrt{n_i+1}\sqrt{n_i+1} - \sqrt{n_i}\sqrt{n_i} = 1.$$

Shrnutí naší volby tedy je

$$\begin{aligned}\hat{a}_i|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle &= \sqrt{n_i}|n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots\rangle,\\ \hat{a}_i^\dagger\,|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle &= \sqrt{n_i + 1}|n_1, \ldots, n_i + 1, \ldots\rangle.\end{aligned}$$

Nyní stav s danými obsazovacími čísly můžeme zapsat výhodně jako

$$|n_1, n_2, \ldots\rangle = \frac{\hat{a}_1^{\dagger n_1}}{\sqrt{n_1!}}\frac{\hat{a}_2^{\dagger n_2}}{\sqrt{n_2!}}\ldots|0\rangle,$$

kde $|0\rangle$ je vakuový stav, který splňuje

$$\hat{a}_j|0\rangle = 0, \forall j \in \mathscr{I}, \tag{10.12}$$

a díky tomu lze Fockův prostor napsat jako

$$\mathscr{F}_B(\mathscr{H}) = \text{span}\left\{\left(\prod_{i\in\mathscr{I}}\frac{\hat{a}_i^{\dagger n_i}}{\sqrt{n_i!}}\right)|0\rangle \,\middle|\, \sum_{i\in\mathscr{I}} n_i < +\infty\right\}.$$

10.2.1 Operátory počtu částic

Pomocí kreačních a anihilačních operátorů lze zavést **operátor počtu částic v *i*-tém stavu**

$$\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger\,\hat{a}_i, \tag{10.13}$$

podívejme se, jak působí:

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger\,\hat{a}_i|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle &= \hat{a}_i^\dagger\,\hat{a}_i\left(\prod_{j\in\mathscr{I}}\frac{\hat{a}_j^{\dagger n_j}}{\sqrt{n_j!}}\right)|0\rangle\\ &= \underbrace{\prod_{j\in\mathscr{I}, j\neq i}\frac{\hat{a}_j^{\dagger n_j}}{\sqrt{n_j!}}\frac{\hat{a}_i^\dagger}{\sqrt{n_i!}}}_{=A}\left(\hat{a}_i\left(\hat{a}_i^\dagger\right)^{n_i}\right)|0\rangle = *,\end{aligned}$$

kde jsme využili toho, že operátory stejného druhu komutují a stejně tak komutují kreační a anihilační operátory s různými indexy, dále použijeme n_i-krát známý komutátor (10.11)

$$\begin{aligned}
* &= A \left(\underbrace{\left[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger\right]}_{1} \hat{a}_i^{\dagger n_i - 1} + \hat{a}_i^\dagger \, \hat{a}_i \, \hat{a}_i^{\dagger n_i - 1} \right) |0\rangle \\
&= |n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle + A \, \hat{a}_i^\dagger \, \hat{a}_i \, \hat{a}_i^{\dagger n_i - 1} \, |0\rangle \\
&= |n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle + A \, \hat{a}_i^\dagger \left(\hat{a}_i^\dagger \, \hat{a}_i \, \hat{a}_i^{\dagger n_i - 2} + \hat{a}_i^{\dagger n_i - 2} \right) |0\rangle \\
&= 2|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle + A \, \hat{a}_i^{\dagger 2} \, \hat{a}_i \, \hat{a}_i^{\dagger n_i - 2} \, |0\rangle \\
&\vdots \\
&= n_i |n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle,
\end{aligned}$$

a vidíme, že operátor $\hat{N}_i$ je věrný svému názvu.

Pomocí těchto operátorů lze dále definovat **operátor celkového počtu částic**

$$\hat{N} = \sum_{i \in \mathscr{I}} \hat{N}_i = \sum_{i \in \mathscr{I}} \hat{a}_i^\dagger \, \hat{a}_i. \tag{10.14}$$

Také si všimněme toho, že $\left\{\hat{N}_i\right\}_{i=1}^{+\infty}$ tvoří na $\mathscr{F}_B(\mathscr{H})$ úplný soubor komutujících operátorů se společnými vlastními vektory $|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle$.

10.2.2 Časový vývoj

Uvažujme nejprve soustavu n neinteragujících částic. Z hlediska operátoru časového vývoje se každá vyvíjí nezávisle na ostatních, tedy evoluci n částic jsme schopni zapsat pomocí jednočásticových operátorů časového vývoje jako

$$\hat{U}_n(t, t_0) = \hat{U}_1(t, t_0) \otimes \hat{U}_1(t, t_0) \otimes \ldots \otimes \hat{U}_1(t, t_0) =: \hat{U}_1(t, t_0)^{\otimes n}. \tag{10.15}$$

Hamiltonián celkového systému získáme časovou derivací (10.15). Podle Leibnizova pravidla, ohnutého pro tenzorový součin,

$$\hat{H} = \hat{H}_1 \otimes I \otimes \ldots \otimes I \; + \; I \otimes \hat{H}_1 \otimes I \otimes \ldots \otimes I \; + \; \ldots \; + \; I \otimes \ldots \otimes \hat{H}_1 =: \hat{H}_1^{\oplus n}.$$

Pokud $(|i\rangle)_{i \in \mathscr{I}}$ je báze vlastních stavů energie v $\mathscr{H}$, $\hat{H}_1 |i\rangle = E_i |i\rangle$, můžeme přepsat působení takového hamiltoniánu do formalizmu obsazovacích čísel jako

$$\hat{H} |n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \sum_{i \in \mathscr{I}} n_i E_i |n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle, \tag{10.16}$$

což je vzorec použitelný nejen pro pevný celkový počet částic n, ale i na Fockově prostoru. Odsud už je jen krok k přepisu pomocí operátorů počtu částic,

$$\hat{H} |n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \sum_{i \in \mathscr{I}} E_i \hat{N}_i |n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle. \tag{10.17}$$

Protože jsme tak rozepsali působení operátoru na každém bazickém vektoru, platí i operátorově

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{\infty} E_i \hat{N}_i = \sum_{i \in \mathscr{I}} E_i \, \hat{a}_i^\dagger \, \hat{a}_i, \tag{10.18}$$

pro neinteragující částice na $\mathscr{F}_B(\mathscr{H})$.

Pokud budeme chtít započítat interakci, musíme přidat další členy do hamiltoniánu, které také zapíšeme pomocí kreačních a anihilačních operátorů. Významnou třídu takových operátorů tvoří ty, pro které

$$\left[\hat{H}, \hat{N}\right] = 0, \tag{10.19}$$

které zachovávají celkový počet částic.

10.2.3 Spojité stupně volnosti

Formálně lze uvažovat popis interakce pomocí obsazovacích čísel příslušejících i operátorům se spojitým spektrem či kombinacím komutujících operátorů, obvykle hybnosti a spinu. Označme odpovídající kreační a anihilační operátory jako

$$\hat{a}^\dagger_{\vec{p},\xi}, \hat{a}_{\vec{p},\xi}, \tag{10.20}$$

kde $\vec{p}$ předepisuje tři složky hybnosti a ξ spin částice, kterou takový operátor vytvoří nebo anihiluje

$$\hat{a}^\dagger_{\vec{p},\xi} \left|0\right\rangle \longleftrightarrow \psi_{\vec{p},\xi}(\vec{x}). \tag{10.21}$$

Třeba

$$\hat{a}^\dagger_{\vec{p},\xi} \, \hat{a}^\dagger_{\vec{p}',\xi} \left|0\right\rangle, \tag{10.22}$$

odpovídá stavu se dvěma částicemi s daným spinem a hybnostmi $\vec{p}$ a $\vec{p}'$, neboli stavu popsaném vlnovou funkcí $\mathscr{S}\left(\psi_{\vec{p},\xi}(\vec{x})\psi_{\vec{p}',\xi}(\vec{y})\right)$.

Postulujeme komutační relace dle stejné logiky jako výše, ale s Diracovou funkcí místo Kroneckerovy delty u spojitých indexů:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{a}_{\vec{p},\xi}, \hat{a}_{\vec{p}',\xi'}\right] &= 0, \\
\left[\hat{a}^\dagger_{\vec{p},\xi}, \hat{a}^\dagger_{\vec{p}',\xi'}\right] &= 0, \\
\left[\hat{a}_{\vec{p},\xi}, \hat{a}^\dagger_{\vec{p}',\xi'}\right] &= \delta_{\xi,\xi'} \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}') \mathbb{1}.
\end{aligned}$$

Ve vyjádření pro obecný vektor z takového Fockova prostoru je pak potřeba sumu nahradit integrálem,

$$\left|\varphi\right\rangle = \sum_{k=0}^{+\infty} \left(\prod_{j=1}^{k} \int \mathrm{d}^3 p_j \sum_{\xi_j} \right) \alpha^{p_1,\ldots,p_k}_{\xi_1,\ldots,\xi_k} \prod_{j=1}^{k} \hat{a}^\dagger_{\vec{p}_j,\xi_j} \left|0\right\rangle, \tag{10.23}$$

kde v koeficientech $\alpha^{p_1,\ldots,p_k}_{\xi_1,\ldots,\xi_k}$ jsou schované informace o stavu.

10.3 Fermionové kreační a anihilační operátory

Podobně jako pro bosony zavedeme fermionový kreační operátor $\hat{b}_j^\dagger$. Rozepíšeme jeho působení na stav s obsazovacími čísly $(n_i)_{i\in\mathscr{I}}$ a budeme uvažovat, že konzistentně přidává j-tý stav *nalevo* od již existujících stavů.[35] To je důležité, protože antisymetrizace pak přidá správný znaménkový faktor:

$$\begin{aligned}
\hat{b}_j^\dagger \,|n_1,\ldots,n_j=0,\ldots\rangle &= \hat{b}_j^\dagger \,\frac{\mathscr{A}\left(|1\rangle^{\otimes n_1}\otimes|2\rangle^{\otimes n_2}\otimes\ldots\right)}{\|\ldots\|}\\
&= \frac{\mathscr{A}\left(|j\rangle\otimes|1\rangle^{\otimes n_1}\otimes|2\rangle^{\otimes n_2}\otimes\ldots\right)}{\|\ldots\|}\\
&= (-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} n_k}\,\frac{\mathscr{A}\left(|1\rangle^{\otimes n_1}\otimes|2\rangle^{\otimes n_2}\otimes\ldots\otimes|j\rangle\otimes\ldots\right)}{\|\ldots\|}\\
&= (-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} n_k}\,|n_1,n_2,\ldots,n_j'=1,\ldots\rangle.
\end{aligned}$$

Suma v předchozím výrazu počítá, kolik stavů před j–tým je obsazeno. Fermionový anihilační operátor je potom

$$\hat{b}_j|n_1,\ldots,n_j,\ldots\rangle = \begin{cases} 0 & \text{pro } n_j=0,\\ (-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} n_k}\,|n_1,\ldots,n_j'=0,\ldots\rangle & \text{pro } n_j=1.\end{cases}$$

Podívejme se, jaké relace naše operátory splňují. Bez újmy na obecnosti nechť $i<j$. Pokud n_i nebo n_j jsou 1, pak

$$\hat{b}_i^\dagger\,\hat{b}_j^\dagger\,|n_1,\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle = \hat{b}_j^\dagger\,\hat{b}_i^\dagger\,|n_1,\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots\rangle = 0,$$

jinak

$$\begin{aligned}
\hat{b}_i^\dagger\,\hat{b}_j^\dagger\,|n_1,\ldots,0,\ldots,0,\ldots\rangle &=\\
&= (-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} n_k}\,\hat{b}_i^\dagger\,|n_1,\ldots,0,\ldots,1,\ldots\rangle\\
&= (-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} n_k}(-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} n_k}|n_1,\ldots,1,\ldots,1,\ldots\rangle\\
&= (-1)^{\sum_{k=i}^{j-1} n_k}|n_1,\ldots,1,\ldots,1,\ldots\rangle,
\end{aligned}$$

podobně

$$\begin{aligned}
\hat{b}_j^\dagger\,\hat{b}_i^\dagger\,|n_1,\ldots,n_i=0,\ldots,n_j=0,\ldots\rangle &=\\
&= (-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} n_k}\,\hat{b}_j^\dagger\,|n_1,\ldots,1,\ldots,0,\ldots\rangle\\
&= (-1)^{\left(\sum_{k=1}^{j-1} n_k\right)+1}(-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} n_k}|n_1,\ldots,1,\ldots,1,\ldots\rangle\\
&= (-1)^{\left(\sum_{k=i}^{j-1} n_k\right)+1}|n_1,\ldots,1,\ldots,1,\ldots\rangle,
\end{aligned}$$

[35] Pochopitelně j-tý stav nesmí již být obsazen, proto uvažujeme $n_j=0$.

takže ve všech situacích

$$\hat{b}_i^\dagger \, \hat{b}_j^\dagger \, |n_1, \ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle = - \hat{b}_j^\dagger \, \hat{b}_i^\dagger \, |n_1, \ldots, n_i, \ldots, n_j, \ldots\rangle. \tag{10.24}$$

Z toho vidíme, oproti bosonovým operátorům, že kreační operátory fermionů antikomutují![36]

$$\left\{ \hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger \right\} = \hat{b}_i^\dagger \, \hat{b}_j^\dagger + \hat{b}_j^\dagger \, \hat{b}_i^\dagger = 0. \tag{10.25}$$

Podobně by se ukázalo

$$\left\{ \hat{b}_i, \hat{b}_j \right\} = 0,$$
$$\left\{ \hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger \right\} = \delta_{ij} \mathbb{1},$$

a díky tomu lze fermionový stav zapsat pomocí obsazovacích čísel jako

$$|n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \hat{b}_1^{\dagger n_1} \ldots \hat{b}_i^{\dagger n_i} \ldots |0\rangle. \tag{10.26}$$

(V tomto případě, na rozdíl od bosonů, na pořadí operátorů záleží!) Z antikomutačních relací je také hned vidět

$$\hat{b}_i^{\dagger 2} = \frac{1}{2} \left\{ \hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_i^\dagger \right\} = 0, \tag{10.27}$$

což je elegantně zapsaný Pauliho vylučovací princip.

10.3.1 Operátory počtu částic

Obdobně jako v případě bosonů lze zavést operátory počtu částic v j-tém stavu stejným vztahem i pro fermiony,

$$\hat{N}_j = \hat{b}_j^\dagger \, \hat{b}_j.$$

Ty navíc mají zajímavou vlastnost

$$\hat{N}_j^2 = \hat{b}_j^\dagger \, \hat{b}_j \, \hat{b}_j^\dagger \, \hat{b}_j = \hat{b}_j^\dagger \left(\left\{ \hat{b}_j, \hat{b}_j^\dagger \right\} - \hat{b}_j^\dagger \, \hat{b}_j \right) \hat{b}_j = \hat{b}_j^\dagger \, \hat{b}_j = \hat{N}_j,$$

která dává opět jinak zapsaný Pauliho vylučovací princip, neboť jediná nezáporná celá čísla, která splňují $n_j^2 = n_j$, a tedy mohou být ve spektru $\hat{N}_j$, jsou jednička a nula.

V naprosté analogii s bosony lze zavést operátor celkového počtu částic

$$\hat{N} = \sum_{j \in \mathscr{I}} \hat{N}_j = \sum_{j \in \mathscr{I}} \hat{b}_j^\dagger \, \hat{b}_j. \tag{10.28}$$

[36] Příští rok v QFT ukážete, že nějaké kreační a anihilační operátory komutují/antikomutují a z toho usoudíte, že jste popisovali bosony/fermiony.

10.3.2 Hamiltonián

Pro neinteragující částice můžeme opět zapsat hamiltonián soustavy fermionů

$$\hat{H} = \sum_{j\in\mathscr{I}} E_j \hat{N}_j = \sum_{j\in\mathscr{I}} E_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j,$$

pokud $(|j\rangle)_{j\in\mathscr{I}}$ je báze vlastních stavů jednočásticového hamiltoniánu.

Užitečná identita pro práci s fermiony je

$$[AB, C] = ABC + (ACB - ACB) - CAB = A\{B, C\} - \{A, C\} B,$$

kterou využijeme například v situacích

$$\left[\hat{H}, \hat{b}_i^\dagger\right] = E_j \left[\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j, \hat{b}_i^\dagger\right] = E_j\Big(\hat{b}_j^\dagger \underbrace{\left\{\hat{b}_j, \hat{b}_i^\dagger\right\}}_{\delta_{ij}} - \underbrace{\left\{\hat{b}_j^\dagger, \hat{b}_i^\dagger\right\}}_{0} \hat{b}_j\Big) = E_i \hat{b}_i^\dagger,$$

$$\left[\hat{H}, \hat{b}_i\right] = -E_i \hat{b}_i$$

pro neinteragující část hamiltoniánů.

10.3.3 Více druhů částic

Pokud potřebujeme teorii popisující více druhů částic, je odpovídající Fockův prostor tenzorovým součinem Fockových prostorů jednotlivých druhů částic

$$\mathscr{F} = \mathscr{F}_B(\mathscr{H}^1) \otimes \ldots \otimes \mathscr{F}_B(\mathscr{H}^\Lambda) \otimes \mathscr{F}_F(\tilde{\mathscr{H}}^1) \otimes \ldots \otimes \mathscr{F}_F(\tilde{\mathscr{H}}^\Sigma), \tag{10.29}$$

kde Λ je počet druhů bosonů a Σ je počet druhů fermionů. Je konvence označit $\hat{a}^\dagger_{\lambda,\vec{p},\xi}$ bosonový kreační operátor λ-té částice s danou hybností a spinem $\{-s_\lambda, -s_\lambda + 1, \ldots, s_\lambda\}$ a obdobně pro fermiony $\hat{b}^\dagger_{\sigma,\vec{p},\xi}$. Dále je obvyklé platnost komutačních relací uvedených výše rozšířit i na různé druhy částic,

$$\begin{aligned}
\left[\hat{a}_{\lambda,\vec{p},\xi}, \hat{a}^\dagger_{\lambda',\vec{p}',\xi'}\right] &= \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\xi\xi'}\delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}'),\\
\left\{\hat{b}_{\sigma,\vec{p},\xi}, \hat{b}_{\sigma',\vec{p}',\xi'}\right\} &= 0 = \left\{\hat{b}^\dagger_{\sigma,\vec{p},\xi}, \hat{b}^\dagger_{\sigma',\vec{p}',\xi'}\right\}\\
\left\{\hat{b}_{\sigma,\vec{p},\xi}, \hat{b}^\dagger_{\sigma',\vec{p}',\xi'}\right\} &= \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{\xi\xi'}\delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}'),
\end{aligned}$$

a nechat všechny možné kombinace různých (fermionových vs. bosonových) operátorů komutovat,[37]

$$\left[\hat{a}, \hat{b}\right] = 0. \tag{10.30}$$

Lze ještě napsat obecný vektor pro tento systém, ale je to jen komplikovanější, zobecněná analogie vztahu (10.23).

[37] O této volbě bude ještě mluvit vyučující QFT příští rok.

11 Kvantování klasických polí

Tato, poslední, kapitola poznámek si klade za cíl stručné shrnutí látky z přednášky, ale je na místě poznamenat, že kvantováním polí se bude příští rok zabývat dvousemestrální předmět a tudíž zde není ani zdaleka možné projít všechny aspekty látky. Berte kapitolu jako přípravu na další rok. Z historických důvodů se tomuto postupu někdy říká *druhé kvantování*, kvantování polí je ale název věrnější.

11.1 Připomenutí: klasická teorie pole

Začneme stručným zopakováním základních vzorců a pouček klasické teorie pole v Lagrangeově a Hamiltonově formalismu.

Hustota lagrangiánu

Centrální význam lagrangiánu $L(q^1, \dots, q^s, \dot{q}^1, \dots, \dot{q}^s, t)$ v teorii pole přebírá *hustota lagrangiánu*

$$\mathscr{L}(\varphi^1, \dots, \varphi^s, \varphi^1_{,\mu}, \dots, \varphi^s_{,\mu}, x^\mu), \tag{11.1}$$

z níž můžeme určit $L = \int \mathscr{L} \mathrm{d}V$. V takto utvořeném lagrangiánu na místě obecných souřadnic vystupují *pole* $\varphi^i(x^\mu)$, typicky závisející na souřadnicích a čase, kompaktně dohromady zapsaných jako čtveřice prostoročasových souřadnic. V hustotě lagrangiánu se kromě obecných rychlostí $\dot{\varphi}^i := \varphi^i_{,t} := \partial_t \varphi^i$ může vyskytovat závislost i na derivacích φ^i podle x, y, z. Tomuto musejí být uzpůsobeny Euler-Lagrangeovy rovnice, které získávají tvar

$$\sum_\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi^i_{,\mu}} - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi^i} = 0. \tag{11.2}$$

Derivace zcela vlevo se rozumí počítaná v soustavě souřadnic (x^μ), tedy φ^i apod. se v ní již neuvažují jako nezávislé proměnné lagrangiánu, ale jako funkce souřadnic a času. V soustavě jedné proměnné by se takto chovala úplná časová derivace.

Hustota hamiltoniánu

Teorii pole můžeme formulovat i v Hamiltonově formalismu. Na rozdíl od předchozího případu, nezávislého na volbě vztažné soustavy, v Hamiltonově formalismu získává časová souřadnice výhradní roli oproti prostorovým. Volíme tedy obecné hybnosti jako derivace podle časové změny φ^i,

$$\Pi_i = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi^i_{,t}} = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\varphi}^i}, \tag{11.3}$$

a Legendreovu transformaci provedeme též pouze v záměně $\dot{\varphi}^i \leftrightarrow \Pi_i$. Výsledkem je hamiltonián, který lze psát opět jako integrál $H = \int \mathscr{H} \mathrm{d}V$ z *hustoty hamiltoniánu*

$$\mathscr{H} = \Pi_i \dot{\varphi}^i - \mathscr{L} = \mathscr{H}(\varphi^1, \ldots, \varphi^s, \varphi^1_{,k}, \ldots, \varphi^s_{,k}, \Pi_1, \ldots, \Pi_s, x^i, t) \tag{11.4}$$

Věnujte pozornost nezávislým proměnným: obecná rychlost $\dot{\varphi}^i$ se nahradila obecnou hybností Π_i, ale ostatní (prostorové) derivace φ^i zůstávají! To má vliv na mnoho aspektů teorie. Zejména pohybové rovnice je třeba psát pomocí funkcionálních (či variačních) derivací[38]

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}^i(\vec{x}, t) &= \frac{\delta H}{\delta \Pi_i(\vec{x}, t)} = \frac{\partial \mathscr{H}(\vec{x}, t)}{\partial \Pi_i}, \\ \dot{\Pi}_i(\vec{x}, t) &= -\frac{\delta H}{\delta \varphi^i(\vec{x}, t)} = -\frac{\partial \mathscr{H}(\vec{x}, t)}{\partial \varphi^i} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x^k} \frac{\partial \mathscr{H}(\vec{x}, t)}{\partial \varphi^i_{,k}}, \end{aligned} \tag{11.5}$$

které berou ohled na možnost výskytu nezávislé polní proměnné i jejích derivací.

Poissonovy závorky

Podobným způsobem jako pohybové rovnice je potřeba upravit Poissonovy závorky. V každý okamžik můžeme vyhodnotit Poissonovu závorku dvou stavových funkcí jako

$$\{F, G\} = \int \mathrm{d}^3 x \sum_{i=1}^{s} \left(\frac{\delta F}{\delta \varphi^i(\vec{x}, t)} \frac{\delta G}{\delta \Pi_i(\vec{x}, t)} - \frac{\delta F}{\delta \Pi_i(\vec{x}, t)} \frac{\delta G}{\delta \varphi^i(\vec{x}, t)} \right). \tag{11.6}$$

Pohyb soustavy pak můžeme tradičně psát jako Poissonovu závorku s hamiltoniánem (ne hustotou). Poněkud je ale třeba upravit kanonické Poissonovy závorky: zejména nemůžeme používat samotné φ^i, Π_i, protože se nejedná o stavové funkce. Na skutečné trajektorii soustavy budou jak φ^i tak Π_i funkcemi souřadnic a času, a o stavových funkcích tak můžeme mluvit pouze po vyhodnocení těchto veličin v nějakých souřadnicích (ale stejném čase). Jejich Poissonova závorka vede na zobecněné funkce:

$$\{\varphi^i(\vec{x}, t), \Pi_j(\vec{y}, t)\} = \delta_{ij} \delta^3(\vec{x} - \vec{y}). \tag{11.7}$$

11.2 Jak kvantovat klasická pole

Kvantování se standardně provádí podle návodu:

1. Uvažujte klasickou volnou (neinteragující) polní teorii danou hustotou lagrangiánu. (Interakce začleníme později.)

2. Nalezněte řešení pohybových rovnic z Lagrangeova formalismu ve formě superpozice rovinných vln.

[38] Jak jsme je zavedli v kapitole 9.1.1.

3. Vyjádřete amplitudy rovinných vln $a^i(\vec{k})$ a jejich komplexní sdružení pomocí polí a jejich kanonických hybností (11.3), pro které klasicky postulujeme Poissonovy závorky (11.7).

4. Přeškálujte veličiny $a^i(\vec{k})$, aby platilo

$$i\hbar\{a^i(\vec{k}), \overline{a}^j(\vec{k}')\} = \delta_{ij}\delta^3(\vec{k}-\vec{k}'). \tag{11.8}$$

5. Zaveďte $\mathscr{H} = \Pi_i\dot{\varphi}^i - \mathscr{L}$, z něj spočítejte $H = \int \mathrm{d}^3x\mathscr{H}$ a ověřte, že

$$H = \sum_i \int \mathrm{d}^3k E(i,\vec{k})\overline{a}^i(\vec{k})a^i(\vec{k}) \tag{11.9}$$

   je součtem energií uvažované superpozice rovinných vln.

6. Kvantujte použitím principu korespondence

$$\begin{aligned} \{F,G\} &\mapsto \frac{1}{i\hbar}[\hat{F},\hat{G}], \\ \varphi^i(\vec{x},t), \Pi_i(\vec{x},t) &\mapsto \hat{\varphi}_i(\vec{x},t), \hat{\Pi}_i(\vec{x},t) \\ a^i(\vec{k}), \overline{a}^i(\vec{k}) &\mapsto \hat{a}_{i,\vec{k}}, \hat{a}^\dagger_{i,\vec{k}'} \\ H &\mapsto \hat{H} = \sum_i \int \mathrm{d}^3k E(i,\vec{k})\hat{a}^\dagger_{i,\vec{k}}\hat{a}_{i,\vec{k}}. \end{aligned} \tag{11.10}$$

   Odsud okamžitě plyne $[\hat{a}_{i,\vec{k}}, \hat{a}^\dagger_{j,\vec{k}'}] = \delta_{ij}\delta^3(\vec{k}-\vec{k}')$, jak má platit pro spojité bosonové kreační a anihilační operátory. Všimněte si, že hamiltonián se přepisuje v „normálním uspořádání“. Počítat jej přímo náhradou φ, Π za operátory ve vzorci pro $\mathscr{H}$ by vedlo k zákeřným nekonečnům, která se pak musejí složitě odstraňovat.

7. Postulujte existenci a jedinečnost normalizovaného stavu s nejnižší energií, *vakua* $|0\rangle$, splňujícího (10.12). Fockův prostor pak generujeme působením operátorů $\hat{a}^\dagger_\alpha$ na $|0\rangle$. Takto získané stavy $(\hat{a}^\dagger_{\alpha_1}\ldots\hat{a}^\dagger_{\alpha_n}|0\rangle)$ interpretujeme jako stavy obsahující n kvant pole φ. Tyto stavy pak mají energii/hybnost danou jako součet energií/hybností stavů $\hat{a}^\dagger_{\alpha_k}|0\rangle$, proto stav $\hat{a}^\dagger_\alpha|0\rangle$ interpretujeme jako částici pole φ, např. foton, ve stavu $|\alpha\rangle$ a obecně stav $\hat{a}^\dagger_{\alpha_1}\ldots\hat{a}^\dagger_{\alpha_n}|0\rangle$ jako n-částicový stav.

8. Interakční členy v klasickém $\mathscr{L}$ vyjádřete také pomocí $\hat{a}_{i,\vec{k}}, \hat{a}^\dagger_{i,\vec{k}}$ a započítejte je poruchově.

11.2.1 Volné reálné Klein-Gordonovo pole ($c = 1, \hbar = 1$)

Příklad uvedeme na tzv. reálném skalárním poli,[39] daném lorentzovsky invariantní hustotou lagrangiánu

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu\varphi\partial^\mu\varphi - \frac{1}{2}m^2\varphi^2 = \frac{1}{2}\eta^{\mu\nu}\varphi_{,\mu}\varphi_{,\nu} - \frac{1}{2}m^2\varphi^2, \tag{11.11}$$

kde $(x^\mu) = (t, x, y, z)$. Napíšeme pohybové rovnice

$$\begin{aligned} \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{,\kappa}} &= \frac{1}{2}\eta^{\mu\nu}\delta^\kappa_\mu\varphi_{,\nu} + \frac{1}{2}\eta^{\mu\nu}\varphi_{,\mu}\delta^\kappa_\nu = \eta^{\kappa\nu}\varphi_{,\nu}, \\ 0 = \partial_\kappa\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{,\kappa}} - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi} &= \partial_\kappa(\eta^{\kappa\nu}\varphi_{,\nu}) + m^2\varphi = \eta^{\mu\nu}\varphi_{,\nu\mu} + m^2\varphi = \Box\varphi + m^2\varphi, \end{aligned} \tag{11.12}$$

kde jsme použili d'Alembertova operátoru $\Box$. Než rovnice začneme řešit, připravíme si ještě rovnou obecnou hybnost volbou $\kappa = 0$ v první z rovnic:

$$\Pi = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{,0}} = \eta^{0\nu}\varphi_{,\nu} = \dot{\varphi}. \tag{11.13}$$

Rovnice (11.12), známá jako rovnice Klein–Gordonova, má nekonečně mnoho řešení tvaru rovinné vlny

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) = e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega(\vec{k})t\right)}. \tag{11.14}$$

Dosazení do (11.12) dá podmínku

$$\omega(\vec{k})^2 = \vec{k}^2 + m^2. \tag{11.15}$$

Obecné řešení pohybových rovnic s požadavkem na reálnost φ tedy je

$$\varphi(\vec{x}, t) = \int \mathrm{d}^3k \left(a(\vec{k})e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} + \overline{a}(\vec{k})e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)}\right), \tag{11.16}$$

kde

$$\omega(\vec{k}) = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}. \tag{11.17}$$

Řešení rovnic dosadíme do připravené obecné hybnosti

$$\Pi(\vec{x}) = \dot{\varphi} = -i\int \mathrm{d}^3k\omega(\vec{k})\left(a(\vec{k})e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} - \overline{a}(\vec{k})e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)}\right). \tag{11.18}$$

Při hledání vyjádření $a, \overline{a}$ pomocí φ, Π zkusíme zpětnou Fourierovu transformaci

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3x e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)}\varphi(\vec{x}, t) = \ldots = a(\vec{k}) + \overline{a}(-\vec{k})e^{2i\omega(-\vec{k})t}. \tag{11.19}$$

[39] Takový popis se přiřazuje Higgsovu bosonu.

Nadbytečného výrazu s $\overline{a}$ se zbavíme transformací Π, kde vystoupí tytéž dva členy se vzájemně opačnými znaménky:

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3x e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}\Pi(\vec{x},t) = \ldots = -i\omega(\vec{k})a(\vec{k}) + i\omega(-\vec{k})\overline{a}(-\vec{k})e^{2i\omega(-\vec{k})t}. \quad (11.20)$$

Celkově tedy

$$a(\vec{k}) = \frac{1}{2(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3x \left(\varphi(\vec{x},t) + \frac{i}{\omega(\vec{k})}\Pi(\vec{x},t)\right) e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega(\vec{k})t)} \quad (11.21)$$

a jeho komplexní sdružení

$$\overline{a}(\vec{k}) = \frac{1}{2(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3x \left(\varphi(\vec{x},t) - \frac{i}{\omega(\vec{k})}\Pi(\vec{x},t)\right) e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}. \quad (11.22)$$

S touto volbou škály by vycházelo

$$\begin{aligned}
\{a(\vec{k}),\overline{a}(\vec{k}')\} &= \frac{1}{4(2\pi)^6}\int \mathrm{d}^3x \int \mathrm{d}^3y e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega(\vec{k})t)} e^{i(\vec{k}'\vec{y}-\omega(\vec{k}')t)} \times \\
&\quad \times \left\{\varphi(\vec{x},t) + \frac{i}{\omega(\vec{k})}\Pi(\vec{x},t), \varphi(\vec{y},t) - \frac{i}{\omega(\vec{k}')}\Pi(\vec{y},t)\right\} = \\
&= \frac{1}{4(2\pi)^6}\int \mathrm{d}^3x \int \mathrm{d}^3y e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega(\vec{k})t)} e^{i(\vec{k}'\vec{y}-\omega(\vec{k}')t)} \times \\
&\quad \times \left(-\frac{i}{\omega(\vec{k}')} - \frac{i}{\omega(\vec{k})}\right)\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y}) = \\
&= \frac{-i}{2(2\pi)^3\omega(\vec{k})}\delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}')
\end{aligned} \quad (11.23)$$

namísto požadovaného $-i\delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}')$, upravíme proto definice $a(\vec{k})$ a $\overline{a}(\vec{k})$ opravným faktorem $\sqrt{2(2\pi)^3\omega(\vec{k})}$ na

$$\begin{aligned}
\tilde{a}(\vec{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2(2\pi)^3\omega(\vec{k})}}\int \mathrm{d}^3\, x e^{-i\left(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t\right)}\left[\omega(\vec{k})\varphi(\vec{x},t) + i\Pi(\vec{x},t)\right], \\
\overline{\tilde{a}}(\vec{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2(2\pi)^3\omega(\vec{k})}}\int \mathrm{d}^3x\, e^{+i\left(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega(\vec{k})t\right)}\left[\omega(\vec{k})\varphi(\vec{x},t) - i\Pi(\vec{x},t)\right], \\
\varphi(\vec{x},t) &= \frac{1}{\sqrt{2(2\pi)^3\omega(\vec{k})}}\int \mathrm{d}^3k \left(\tilde{a}(\vec{k})e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega(\vec{k})t)} + \overline{\tilde{a}}(\vec{k})e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}\right), \\
\Pi(\vec{x}) &= \frac{-i\sqrt{\omega(\vec{k})}}{\sqrt{2(2\pi)^3}}\int \mathrm{d}^3k \left(\tilde{a}(\vec{k})e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega(\vec{k})t)} - \overline{\tilde{a}}(\vec{k})e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega(\vec{k})t)}\right).
\end{aligned} \quad (11.24)$$

Kvantujme!

$$\begin{aligned}\left[\hat{\varphi}(\vec{x},t),\hat{\Pi}(\vec{x},t)\right] &= i\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y}), &(11.25)\\ \left[\hat{\varphi}(\vec{x},t),\hat{\varphi}(\vec{x},t)\right] &= 0, &(11.26)\\ \left[\hat{\Pi}(\vec{x},t),\hat{\Pi}(\vec{x},t)\right] &= 0. &(11.27)\end{aligned}$$

Přímým dosazením a použitím postulovaných komutačních relací pro $\hat{\Pi}$ a $\hat{\varphi}$ by se ukázalo, že pak skutečně také

$$\begin{aligned}\left[\hat{a}_{\vec{k}},\hat{a}^\dagger_{\vec{l}}\right] &= \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{l}),\\ \left[\hat{a}_{\vec{k}},\hat{a}_{\vec{l}}\right] &= 0, &(11.28)\\ \left[\hat{a}^\dagger_{\vec{k}},\hat{a}^\dagger_{\vec{l}}\right] &= 0,\end{aligned}$$

jak má být.

Pokusme se nyní sestavit hamiltonián volného Klein–Gordonova pole přímým výpočtem s „ostříškovanými“ členy:[40]

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int \mathscr{H}\,\mathrm{d}^3x = \int \left(\hat{\Pi}\dot{\hat{\varphi}} - \mathscr{L}\right)\mathrm{d}^3x\\
&= \frac{1}{2}\int \left(\hat{\Pi}^2 + (\operatorname{grad}\hat{\varphi})^2 + m^2\hat{\varphi}^2\right)\mathrm{d}^3x\\
&= \frac{1}{4(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3x \int \mathrm{d}^3k \int \mathrm{d}^3k' \frac{1}{\sqrt{\omega\omega'}}\times\\
&\quad\Big(-\omega\omega'\left(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}'}e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{x}-i(\omega+\omega')t} - \hat{a}_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{x}+i(\omega-\omega')t} - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}_{\vec{k}'}e^{\cdots} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,e^{\cdots}\right)\\
&\quad - \vec{k}\cdot\vec{k}'\left(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}'}e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{x}-i(\omega+\omega')t} - \hat{a}_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{x}+i(\omega-\omega')t} - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}_{\vec{k}'}e^{\cdots} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,e^{\cdots}\right)\\
&\quad + m^2\left(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}'}e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{x}-i(\omega+\omega')t} + \hat{a}_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{x}+i(\omega-\omega')t} - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}_{\vec{k}'}e^{\cdots} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,e^{\cdots}\right)\Big)\\
&= \int \mathrm{d}^3k \int \mathrm{d}^3k' \frac{1}{4\sqrt{\omega\omega'}}\times\\
&\quad\Big(-\omega\omega'\left(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}'}\delta^{(3)}(\vec{k}+\vec{k}') - \hat{a}_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,\delta^{(3)}(\vec{k}'-\vec{k}) - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}_{\vec{k}'}\delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}') + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,\delta^{(3)}(\vec{k}+\vec{k}')\right)\\
&\quad - \vec{k}\cdot\vec{k}'\left(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}'}\delta^{(3)}(\vec{k}+\vec{k}') - \hat{a}_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,\delta^{(3)}(\vec{k}'-\vec{k}) - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}_{\vec{k}'}\delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}') + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,\delta^{(3)}(\vec{k}+\vec{k}')\right)\\
&\quad + m^2\left(\hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}'}\delta^{(3)}(\vec{k}+\vec{k}') + \hat{a}_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,\delta^{(3)}(\vec{k}'-\vec{k}) - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}_{\vec{k}'}\delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}') + \hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\,\delta^{(3)}(\vec{k}+\vec{k}')\right)\Big)\\
&= \int \mathrm{d}^3k \frac{1}{4\omega}\left(\underbrace{\left(-\omega^2+|\vec{k}|^2+m^2\right)}_{0}\left(\hat{a}^2_{\vec{k}} + (\hat{a}^\dagger_{\vec{k}})^2\right) + \underbrace{\left(\omega^2+|\vec{k}|^2+m^2\right)}_{2\omega^2}\left(\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}_{\vec{k}} + \hat{a}_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\right)\right)\\
&= \int \mathrm{d}^3k\,\omega(\vec{k})\frac{\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}_{\vec{k}} + \hat{a}_{\vec{k}}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}}{2}\end{aligned} \qquad (11.29)$$

[40] Pro stručnost $\omega' := \omega(\vec{k}')$.

Vzorec vyšel ve smíšeném uspořádání kreačních a anihilačních operátorů. Pokus převést jej na normální uspořádání $\hat{a}^\dagger\,\hat{a}$ padne na skutečnosti, že bychom potřebovali komutátor $\hat{a}^\dagger$ a $\hat{a}$ se *stejným* $\vec{k}$, který je podle (11.28) úměrný $\delta(0)$! Protože tento člen v teorii harmonického oscilátoru udává hladinu nulové energie, naše pole by mělo nekonečnou energii už ve vakuovém stavu.

Budeme se proto držet naší kuchařky a hamiltonián sestavíme s vynuceným normálním uspořádáním

$$\hat{H} = \int \mathrm{d}^3k\,\omega(\vec{k})\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}_{\vec{k}}. \tag{11.30}$$

Tento postup dává dobré výsledky.

Podobně by se odvodil vztah pro hybnost $\hat{\vec{P}}$

$$\hat{\vec{P}} = \int \mathrm{d}^3k\,\vec{k}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\,\hat{a}_{\vec{k}}. \tag{11.31}$$

11.3 Kvantování elektromagnetického pole

Analogií ukázaného postupu zkusíme nakvantovat elektromagnetické pole, jehož jednotlivé excitace jsou fotony. Spočítáme také v nejhrubší aproximaci jeho interakci s elektronem.

Budeme se opět držet kuchařky, ovšem el.-mag. pole má tu nevýhodu na výpočet, že je kalibračně invariantní, jeho invariance vzhledem k volbě kalibrace se nesmí objevit jako nezávislé pole s hybnostmi ve výsledku.[41] Tahle obtíž se dá řešit různě, my zvolíme kalibraci fixně a potom budeme kvantovat. Tento postup je jednoduchý a funguje dobře, je však nevhodný pro práci v teorii elementárních částic, kvantové chromodynamice apod.

Připomeneme, že hustota lagrangiánu elektromagnetického pole je

$$\mathscr{L} = -\frac{1}{4\mu_0}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}, \tag{11.32}$$

kde[42]

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu, \tag{11.33}$$

a dává pro pole A_μ pohybové rovnice

$$\partial_\mu\partial^\mu A_\nu - \partial_\nu\left(\partial^\mu A_\mu\right) = 0. \tag{11.34}$$

Obecné hybnosti jsou (až na konstantní faktor) složky elektrické intenzity:

$$\begin{aligned}\Pi_i = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial A_{i,t}} = \frac{1}{c}\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial A_{i,0}} = \frac{1}{c\mu_0}(A_{i,0} - A_{0,i}) = \frac{1}{\mu_0 c}(-\frac{1}{c}A^i_{,t} - A^0_{,i}) = \\ = \frac{1}{\mu_0 c^2}\left(-\frac{\partial A^i}{\partial t} - \frac{\partial\varphi}{\partial x^i}\right) = \varepsilon_0 E^i.\end{aligned} \tag{11.35}$$

[41] Kalibrační invariance například to znemožňuje přechod k hamiltonovské formulaci, protože obecné hybnosti ve „směrech“ odpovídajících těmto stupňům volnosti by vyšly nulové.

[42] $A_\mu = (\frac{\varphi}{c}, -\vec{A})$

Fixní kalibraci zvolíme Coulombovu, danou vzorci

$$\varphi = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0. \tag{11.36}$$

Je třeba zdůraznit, že tyto rovnice nejsou invariantní vůči Lorentzově transformaci: závisí na volbě směru časové osy. Dá se postupovat i volbou (slabší) Lorentzovy kalibrace, ale ta problém řeší jen částečně a je pak potřeba dalších kroků.

V rovnici (11.34) tak zmizí druhý člen a zbude rovnice pro netriviální složky (tří)-vektoru $\vec{A}$:

$$\Box \vec{A} = 0. \tag{11.37}$$

Řešení v podobě *polarizovaných* rovinných vln

$$\vec{A}_{\vec{k}}(\vec{x}, t) = \vec{\epsilon} e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)}, \tag{11.38}$$

musí splňovat

$$\begin{aligned} \omega^2(\vec{k}) - |\vec{k}|^2 &= 0, \\ \omega(\vec{k}) &= |\vec{k}| \end{aligned}$$

a vazbu na směr polarizace $\vec{\epsilon}$ udává kalibrační podmínka

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{k} \cdot \vec{\epsilon} = 0. \tag{11.39}$$

To má pro každé nenulové $\vec{k}$ dvě lineárně nezávislá řešení.

Obecné (reálné) řešení v podobě kombinace rovinných vln se dvěma možnými polarizacemi tak vypadá[43]

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{\lambda=1}^{2} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \left(a(\vec{k}, \lambda) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} + \overline{a(\vec{k}, \lambda)} e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right), \tag{11.40}$$

kde stále

$$\begin{aligned} \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda') &= \delta_{\lambda\lambda'} \\ \vec{k} \cdot \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) &= 0, \end{aligned} \tag{11.41}$$

a obecná hybnost

$$\begin{aligned} \vec{\Pi}(\vec{x}, t) = \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \sum_{\lambda=1}^{2} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{\hbar\varepsilon_0}{2\omega(\vec{k})}} \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \times \\ \times \left(-i\omega(\vec{k}) a(\vec{k}, \lambda) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} + i\omega(\vec{k}) \overline{a(\vec{k}, \lambda)} e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right), \end{aligned} \tag{11.42}$$

[43] Zahrnuli jsme již správný faktor k amplitudě a.

Hustota hamiltoniánu pak vyjádřená pomocí a vychází

$$\begin{aligned}\mathscr{H} &= \Pi^i A_{i,t} - \mathscr{L} = \frac{1}{2\varepsilon_0}(\Pi^i)^2 + \frac{1}{4\mu_0}(A_{i,j} - A_{j,i})^2 \qquad \left(= \frac{\varepsilon_0}{2}|\vec{E}|^2 + \frac{1}{2\mu_0}|\vec{B}|^2\right) \\ &= \ldots = \sum_{\lambda=1}^{2} \int \mathrm{d}^3k\, \hbar\omega(\vec{k}) a(\vec{k},\lambda)\overline{a(\vec{k},\lambda)}.\end{aligned} \tag{11.43}$$

Kvantování kalibračně invariantní teorie přináší dvě další překvapení: dokud nemáme Hamiltonův formalizmus, nemáme ani Poissonovy závorky. Fixní kalibrace, pokud je dostupná, tento problém řeší, ale naopak se může stát, že kalibrační vzorce jsou ve formě holonomních vazeb (jak je tomu v případě Coulombovy kalibrace) a musíme pak zavádět obecné souřadnice.[44]

My se tedy vydáme cestou nejmenšího odporu a místo komutátorů souřadnic a hybností postulujeme rovnou komutátory kreačních a anihilačních operátorů

$$\left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}\right] = \delta_{\lambda\lambda'}\delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}'). \tag{11.44}$$

Složky souřadnic $\vec{A}(\vec{x},t)$ a hybností $\vec{\Pi}(\vec{x},t)$ vyjádřených pomocí těchto operátorů pak komutují jako

$$\begin{aligned}&\left[A_i(\vec{x},t), \Pi_j(\vec{y},t)\right] = \\ &= \sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{\lambda'=1}^{2} \int \mathrm{d}^3k \int \mathrm{d}^3k' \frac{-i\hbar\omega(\vec{k}')}{2(2\pi)^3\sqrt{\omega(\vec{k})\omega(\vec{k}')}} \epsilon_i(\vec{k},\lambda)\epsilon_j(\vec{k}',\lambda') \times \\ &\quad \times \left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda} e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda}\, e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega(\vec{k})t)}, \hat{a}_{\vec{k}',\lambda'} e^{i(\vec{k}'\vec{y} - \omega(\vec{k}')t)} - \hat{a}^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}\, e^{-i(\vec{k}'\vec{y} - \omega(\vec{k}')t)}\right] \\ &= \sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{\lambda'=1}^{2} \int \mathrm{d}^3k \int \mathrm{d}^3k' \frac{-i\hbar\omega(\vec{k}')}{2(2\pi)^3\sqrt{\omega(\vec{k})\omega(\vec{k}')}} \epsilon_i(\vec{k},\lambda)\epsilon_j(\vec{k}',\lambda') \times \\ &\quad \times \left(-e^{i\vec{k}\vec{x} - i\vec{k}'\vec{y} - i(\omega(\vec{k}) - \omega(\vec{k}'))t}\delta_{\lambda\lambda'}\delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}') - e^{-i\vec{k}\vec{x} + i\vec{k}'\vec{y} + i(\omega(\vec{k}) - \omega(\vec{k}'))t}\delta_{\lambda\lambda'}\delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}')\right) \\ &= \sum_{\lambda=1}^{2} \int \mathrm{d}^3k \frac{i\hbar}{2(2\pi)^3} \underbrace{\epsilon_i(\vec{k},\lambda)\epsilon_j(\vec{k},\lambda)}_{P_{ij}(\vec{k})} \left(e^{i\vec{k}(\vec{x} - \vec{y})} + e^{i\vec{k}(\vec{y} - \vec{x})}\right)\end{aligned} \tag{11.45}$$

Pokud by nyní na místě $P_{ij}(\vec{k})$ vystupovalo δ_{ij} (jak by se stalo, kdyby pro dané $\vec{k}$ vektory $\vec{e}(\vec{k},\lambda)$ byly tři a tvořily ON bázi), výraz by se zjednodušil na kanonický komutátor $i\hbar\delta_{ij}\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y})$. Projektoru $P(\vec{k})$ ale „chybí“ vektor ve směru $\vec{k}$, platí pro něj

$$P_{ij}(\vec{k}) = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{|k|^2} \tag{11.46}$$

[44] V nich pak je možno vyjádřit Poissonovy závorky *původních* souřadnic a hybností jakožto stavových funkcí.

a jeho Fourierův obraz je namísto delta funkce takzvaná *transverzální* delta funkce

$$\delta^{\mathrm{tr}}_{ij}(\vec{x}-\vec{y}) = \delta_{ij}\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y}) + \partial_i\partial_j \frac{1}{4\pi\,|\vec{x}-\vec{y}|}. \tag{11.47}$$

S tímto označením platí

$$\left[A_i(\vec{x},t), \Pi_j(\vec{y},t)\right] = i\hbar\delta^{\mathrm{tr}}_{ij}(\vec{x}-\vec{y}). \tag{11.48}$$

Jedná se o důsledek vazby, kterou jsme mezi souřadnice zavedli volbou Coulombovy kalibrace.[45]

11.3.1 Interakce elektromagnetického pole s látkou

Nyní už máme všechno připraveno na poslední krok kuchařky, výpočet interakce fotonů s částicemi. Hamiltonián nabité částice v el.-mag. poli jsme samozřejmě uměli sestavit již dávno, tam ale potenciál vystupoval jako externí proměnná a nemohli jsme tak zachytit reakci pole na pohyb částice, jen jednosměrnou akci Lorentzovy síly. Nový popis nám tak umožní kvantově popsat vztah mezi urychlováním nabitých částic v poli a pohlcováním či vyzařováním energie ve formě fotonů. Budeme uvažovat elektron, tedy $q = -e$.

Hilbertův prostor našeho systému bude dán tenzorovým součinem Hilbertova prostoru volného hmotného bodu a Fockova prostoru elektromagnetického pole. Celkový hamiltonián pak napíšeme do formalismu předchozích kapitol jako součet tří členů

$$\begin{aligned} \hat{H} = {} & \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m} && (\hat{H}_{\text{částice}}) \\ & + \frac{e}{2m}\{\hat{\vec{P}}, \hat{\vec{A}}\} + \frac{e^2}{2m}\hat{\vec{A}}\hat{\vec{A}} - e\hat{\varphi} && (\hat{H}_{\text{int}}) \\ & + \sum_{\lambda=1}^{2} \int \mathrm{d}^3k\, \hbar\omega(\vec{k})\, \hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda}\, \hat{a}_{\vec{k},\lambda} && (\hat{H}_{\text{pole}}) \end{aligned} \tag{11.49}$$

kde za $\hat{A}_i$ je ještě potřeba dosadit z (11.40), v operátorové verzi a s polohou vyjádřenou $\hat{\vec{X}}$. Tento hamiltonián jsme dostali přímo roznásobením známého

$$H = \frac{(\vec{P}-q\vec{A})^2}{2m} + q\varphi + \int \mathrm{d}^3x \left(\frac{\varepsilon_0}{2}\vec{E}^2(\vec{x}) + \frac{1}{2\mu_0}\vec{B}^2(\vec{x})\right) \tag{11.50}$$

a dosazením kvantových verzí všech zúčastněných veličin. (Ve Schrödingerově obraze volíme $t = 0$, tedy

$$\hat{\vec{A}}(\hat{\vec{X}}) = \sum_{\lambda=1}^{2} \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\vec{k})\varepsilon_0}}\, \vec{\epsilon}(\vec{k},\lambda) \left(\hat{a}_{\vec{k},\lambda} e^{i\vec{k}\hat{\vec{X}}} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda}\, e^{-i\vec{k}\hat{\vec{X}}}\right), \tag{11.51}$$

[45] Výsledek (11.48) lze získat i zcela klasicky ve formě Poissonových závorek a odsud pak odvodit (11.44). Potřebujete k tomu však teorii, kterou jste neprobírali.

o správnou hodnotu v čase t by se postaral vývoj operátoru podle (3.24).)

Hamiltonián $\hat{H}_{\text{částice}}$ popisuje pohyb volné částice a $\hat{H}_{\text{pole}}$ nerušený časový vývoj pole, oba umíme dobře počítat. Dohromady je označíme $\hat{H}_0$ a zbývající člen $\hat{H}_{\text{int}}$ budeme uvažovat jako poruchu tohoto volného hamiltoniánu. To je oprávněné, pokud $|eA| \ll |P|$. V prvním řádu pak můžeme zahodit druhý člen $\hat{H}_{\text{int}}$ a rovněž rovnou škrtneme třetí, protože ve zvolené kalibraci je φ nulové. Za parametr poruchy pro poruchový rozvoj můžeme vzít kupříkladu e.

Z nestacionární poruchové teorie pro časově nezávislou poruchu známe vztah (5.50). Pro naše účely uvažujme, stejně jako při jeho odvození, počáteční i koncový stav jako vlastní stavy $\hat{H}_0$, nechť ovšem navíc jsou tenzorovými součiny nějakých vlastních stavů $\hat{H}_{\text{částice}}$ a $\hat{H}_{\text{pole}}$. Pro pravděpodobnost přechodu tedy platí

$$W_{|i_č,i_p\rangle\to|f_č,f_p\rangle}(T) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle f_č, f_p|\hat{H}_{\text{int}}|i_č, i_p\rangle\right|^2 I_T\left(\frac{E_f - E_i}{\hbar}\right), \tag{11.52}$$

kde

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{e}{2m}(\hat{\vec{P}}\hat{\vec{A}}(\hat{\vec{X}}) + \hat{\vec{A}}(\hat{\vec{X}})\hat{\vec{P}}). \tag{11.53}$$

a $E_{i,f}$ značí celkové energie (vlastní hodnoty $\hat{H}_0$) počátečního a koncového stavu. Funkce I_T, jak víme z páté kapitoly, je zodpovědná za potlačení pravděpodobnosti přechodu pro velké rozdíly energií, a popisuje tak (přibližné) zachování celkové energie při interakci. Pro delší časy T se energie zachovává přesněji. Věnujme se nyní hlavně skalárnímu součinu vystupujícímu před ní.

Následující odvození se provede nejsnadněji, nahradíme-li $\hat{\vec{A}}$ jeho diskrétní verzí, která umožňuje jen diskrétní hodnoty vektoru $\vec{k}$. Toho se dosáhne tak, uvažujeme-li místo prostoru $\mathbb{R}^3$ jen krychle o straně a (s periodickými okrajovými podmínkami). V takovém omezeném prostoru jsou rovinné postupné vlny umožněny jen s vektory

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{a}(n_1, n_2, n_3), \quad n_j \in \mathbb{Z}. \tag{11.54}$$

Kvantování pak dá namísto (11.51)[46]

$$\hat{\vec{A}}(\hat{\vec{X}}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{\vec{k}}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\vec{k})\varepsilon_0}}\vec{\epsilon}(\vec{k},\lambda)\left(\hat{a}_{\vec{k},\lambda}e^{i\vec{k}\hat{\vec{X}}} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda}e^{-i\vec{k}\hat{\vec{X}}}\right), \tag{11.55}$$

kde kreační a anihilační operátory nyní mají diskrétní stupně volnosti, tedy

$$\left[\hat{a}_{\vec{k}_j,\lambda}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}_l,\lambda'}\right] = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{jl} \tag{11.56}$$

a volný hamiltonián vychází

$$\hat{H} = \sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{\vec{k}}\hbar\omega(\vec{k})\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda}\,\hat{a}_{\vec{k},\lambda}. \tag{11.57}$$

[46] Zkuste si to!

Pro dostatečně velké a se stírají rozdíly mezi takto popsaným polem a původním, nediskretizovaným, elektromagnetickému poli. Detailům limitního přechodu se zde nebudeme věnovat, zaujatý čtenář je najde ve [2].

Toto přiblížení má výhodu, že v něm máme elegantní vyjádření vlastních stavů $\hat{H}_{\text{pole}}$ – přes obsazovací čísla jednotlivých kombinací $(\vec{k}, \lambda)$:

$$|i_{\text{pole}}\rangle = |n_1, n_2, \ldots\rangle =: \prod_j \frac{\left(\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_j,\lambda_j}\right)^{n_j}}{\sqrt{n_j!}}|vac\rangle \tag{11.58}$$

Provedeme ještě jedno přiblížení, takzvanou *dipólovou aproximaci*. Ta předpokládá, že typická vlnová délka pole je mnohem větší než měřítko polohy částice – jinými slovy, že uvažujeme vlny tak dlouhé, že pohyb částice, na kterou působí, je ve srovnání s jejich vlnovou délkou zanedbatelný. V tom případě můžeme přestat psát x-závislost vektorového potenciálu, což nepochybně všechny úvahy výrazně zjednoduší:

$$\hat{\vec{A}} \approx \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\lambda=1}^{2} \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda)(\hat{a}_{\vec{k},\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda}) \tag{11.59}$$

Přinejmenším v (11.53) poté operátory $\hat{\vec{P}}$ a $\hat{\vec{A}}$ komutují a navíc působí na různé části Hilbertova prostoru, takže

$$\begin{aligned} W_{|i_č,i_p\rangle\to|f_č,f_p\rangle}(T) &\approx \frac{1}{\hbar^2} I_T\left(\frac{E_f - E_i}{\hbar}\right) \left|\frac{e}{m}\langle f_č|\hat{\vec{P}}|i_č\rangle\langle f_p|\hat{\vec{A}}|i_p\rangle\right|^2 \\ &= \frac{e^2}{2m^2\hbar\varepsilon_0 V} I_T(\cdots) \left|\sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\omega(\vec{k})}}\langle f_č|(\vec{\epsilon}(\vec{k},\lambda)\cdot\hat{\vec{P}})|i_č\rangle\langle f_p|(\hat{a}_{\vec{k},\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda})|i_p\rangle\right|^2 \end{aligned} \tag{11.60}$$

Proč se aproximace nazývá dipólová, se dozvíme, využijeme-li následujícího triku:

$$\hat{\vec{P}} = \frac{m}{i\hbar}\left[\hat{\vec{X}}, \hat{H}_{\text{částice}}\right] \tag{11.61}$$

a vlastnost, že $|i_č\rangle$ a $|f_č\rangle$ jsou vlastní stavy volného částicového Hamiltoniánu s energiemi $E_i^{(č)}$, resp. $E_f^{(č)}$:

$$\langle f_č|\hat{\vec{P}}|i_č\rangle = \frac{m}{i\hbar}\langle f_č|(\hat{\vec{X}}\hat{H}_č - \hat{H}_č\hat{\vec{X}})|i_č\rangle = \frac{m}{i\hbar}(E_i^{(č)} - E_f^{(č)})\langle f_č|\hat{\vec{X}}|i_č\rangle. \tag{11.62}$$

Pak totiž lze psát

$$W_{|i_č,i_p\rangle\to|f_č,f_p\rangle}(T) \approx \frac{1}{2\hbar^3\varepsilon_0 V} I_T(\cdots) \left|\sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{\vec{k}} \frac{\Delta E^{(č)}}{\sqrt{\omega(\vec{k})}}\langle f_č|(\vec{\epsilon}(\vec{k},\lambda)\cdot\hat{\vec{D}})|i_č\rangle\langle f_p|(\hat{a}_{\vec{k},\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda})|i_p\rangle\right|^2, \tag{11.63}$$

kde $\hat{\vec{D}} = e\hat{\vec{X}}$ je operátor dipólového momentu částice.

Vidíme, že z hlediska pole jsou jediné povolené přechody (s nenulovou pravděpodobností v první řádu rozvoje) takové, kde $|f_{\mathrm{p}}\rangle$ má překryv buď s $\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}\,|i_{\mathrm{p}}\rangle$ nebo s $\hat{a}_{\vec{k},\lambda}|i_{\mathrm{p}}\rangle$. Tedy takové, ve kterých v jednom z módů vznikne nebo zanikne právě jeden foton. Navíc víme odpovídající skalární součiny,

$$\begin{aligned}\langle n_1, n_2, \ldots, n_j+1, \ldots |\, \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}_j,\lambda_j}\, |n_1, n_2, \ldots, n_j, \ldots\rangle &= \sqrt{n_j+1},\\ \langle n_1, n_2, \ldots, n_j+1, \ldots |\hat{a}_{\vec{k}_j,\lambda_j}|n_1, n_2, \ldots, n_j, \ldots\rangle &= \sqrt{n_j},\end{aligned} \tag{11.64}$$

ze kterých snadno dopočítáme pravděpodobnost *emise*

$$W_{\text{emise do } \vec{k}_j,\lambda_j}(T) \approx \frac{1}{2\hbar^2\varepsilon_0 V} I_T\left(\frac{\Delta E^{(\mathrm{celk})}}{\hbar}\right) \frac{(\Delta E^{(\check{\mathrm{c}})})^2}{\Delta E^{(\mathrm{p})}} \left|\langle f_{\check{\mathrm{c}}}|(\vec{\varepsilon}(\vec{k},\lambda)\cdot\hat{\vec{D}})|i_{\check{\mathrm{c}}}\rangle\right|^2 (n_j+1) \tag{11.65}$$

a pravděpodobnost *absorpce*

$$W_{\text{absorpce } \vec{k}_j,\lambda_j}(T) \approx \frac{1}{2\hbar^2\varepsilon_0 V} I_T\left(\frac{\Delta E^{(\mathrm{celk})}}{\hbar}\right) \frac{(\Delta E^{(\check{\mathrm{c}})})^2}{|\Delta E^{(\mathrm{p})}|} \left|\langle f_{\check{\mathrm{c}}}|(\vec{\varepsilon}(\vec{k},\lambda)\cdot\hat{\vec{D}})|i_{\check{\mathrm{c}}}\rangle\right|^2 n_j \tag{11.66}$$

Pěkný výsledek je, že pravděpodobnost emise se dá rozložit na pravděpodobnost *stimulované* emise, číselně rovnou pravděpodobnosti absorpce, která je přímo úměrná počtu fotonů v daném módu přítomných (a necitlivá k žádným ostatním fotonům), a pravděpodobnost *spontánní* emise, nezávislou na polních proměnných. Dále člen s $\hat{\vec{D}}$ zodpovídá za známé geometrické rozložení vyzařování dipólu. Tyto vlastnosti dobře popisují experimentálně ověřené fakty.

Pro velké (ale konečné) objemy se ještě hodí asymptotický vztah

$$\frac{I_T(\omega)}{T} \overset{t\to+\infty}{\longrightarrow} \pi\delta(\omega), \tag{11.67}$$

který pro velké hodnoty T zajišťuje zachování celkové energie

$$\Delta E^{(\mathrm{celk})} = 0, \quad \Delta E^{(\mathrm{p})} = -\Delta E^{(\check{\mathrm{c}})} \tag{11.68}$$

a navíc umožňuje psát výsledek ve formě pravděpodobností za jednotku času. Počet fotonů v módu $|\vec{k}_j,\lambda_j\rangle$ je pak možno brát jako hustotu počtu fotonů (v počátečním stavu) s danou hybností na prostorový úhel v jistém okolí $\vec{k}_j$ a s danou polarizací. Detaily opět viz [2].

Tento explicitní výpočet dává příklad obecné interpretace nejjednodušších členů interakčního hamiltoniánu. Obecně členy tvaru $\hat{O}\,\hat{a}^{\dagger}_i$ (doprovázené $\hat{O}^{\dagger}\hat{a}_i$ pro samosdruženost hamiltoniánu) odpovídají interakcím, při kterých je do pole vyzářena / z pole pohlcena jedna částice, za současné změny stavu druhého fyzikálního systému. Díky faktorům (11.64) je pravděpodobnost absorpce přímo úměrná počtu částic (excitací) pole,

které jsou v odpovídajícím módu k dispozici, a pravděpodobnost emise je navýšena o možnost spontánní emise. Členy kombinující $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ odpovídají volné oscilaci pole. Další členy vyšších řádů bychom interpretovali podobným způsobem:

1. $\hat{O}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{O}^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger$: rozptýlení částice pole na bodové částici za současné změny stavu částice,
2. $\hat{a}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{a}_i \hat{b}_j^\dagger$ (za přítomnosti dvou polí): změna druhu jedné polní částice na jiný,
3. $\hat{a}_i^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_k + \hat{a}_i \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k^\dagger$: rozpad částice jednoho pole na dvě částice jiného, syntéza jedné částice srážkou dvou částic druhého pole

a tak dále.

Obdobně jako u elektromagnetického pole se postupuje i ve fundamentálních teoriích elementárních částic, ale v této aplikaci je třeba zvážit i další problémy, např.

1. Fockův prostor stavů je konstruován pomocí řešení volných neinteragujících částic. Kanonická hybnost má jiný význam pro interagující částici, než pro volnou. Do jaké míry je oprávněné použití $\hat{H}_0$ pro interagující částice?
2. Problémy s kalibračními stupni volnosti se ještě zvětší při použití neabelovských kalibračních teorií (elektroslabé, silné interakce).
3. Poruchové rozvoje mají tendenci nekonvergovat. Jsou pak potřeba pokročilé techniky jako renormalizační teorie a podobně.

Tyto problémy už opravdu přenecháme kvantové teorii pole.

Reference

[1] L. Šnobl: *Kvantová mechanika 2.*, poznámky

[2] J. Formánek. *Úvod do kvantové teorie.* Academia, Praha, 1993.

[3] L. H. Ryder *Quantum Field Theory.* Cambridge University Press, Cambridge, 1996.

[4] I. Štoll, J. Tolar. *Teoretická fyzika. Skripta.* ČVUT, Praha, 1984.

[5] L. Hlavatý. *Slabikář kvantové mechaniky.* Wikiskriptum ČVUT FJFI.

[6] V. Pospíšil. *Zápisky z TSF.* Wikiskriptum ČVUT FJFI.