

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

„Den, kdy světlo světa spatřila první částice a vlna, bude proklínán studenty všech generací nadcházejících, blahoslaven generací objevitelské a nepochopen generacemi minulými.“

Quantum theory for theoretical and particle physicists

Jimmy Found

„Až se ze všech částic stanou vlny a ze všech vln částice, opustí lidstvo představu, že může světu porozumět. A až se fyzika popisem přiblíží přírodě nejvíce, jak to jde, přesně, chcete-li, tehdy fyzici skepticky praví, že není možné, aby se tak stalo.“

Kvantová teorie pro teoretické a částicové fyziky

Václav Bára

Ústav teoretické fyziky, Ústav částicové a jaderné fyziky
Praha 2014 - 2015

Obsah

I	Nerelativistická kvantová mechanika	5
1	Úvod do kvantové mechaniky	7
2	Matematické opakování	9
2.1	d	10
3	Formalismus kvantové mechaniky	11
3.1	Diracova notace	11
3.2	Základní formalismus kvantové teorie	13
3.3	Úvodní příklady kvantových systémů	16
3.3.1	Volná částice	16
3.3.2	Spin volné částice	18
3.4	Zavedení operátorů v QM	20
3.4.1	Projekční operátory	20
3.4.2	Operátory měřitelných veličin	24
3.5	Unitární operátory - různé báze \mathcal{H}	24
4	Aproximační metody	25
4.1	Stacionární poruchová teorie	25
4.1.1	Nedegenerované spektrum	26
4.2	Ritzův variační princip	29
4.2.1	Stacionární stavy	30
5	Moment hybnosti	31
5.1	Orbitální moment	32
5.1.1	Souřadnicová reprezentace a vlastní stavy	32
6	Rotace, grupy a tensorové operátory	35
6.1	Eulerovy úhly v CM a QM	36
6.2	Reprezentace grupy rotací	37
6.2.1	Ireducibilní reprezentace	38
6.3	Tenzorové operátory	39
6.3.1	Skalární operátory	39
6.3.2	Vektorové operátory	40
7	Časová evoluce v interakčním obraze	43
7.1	Dvoustavový systém - přesné analytické řešení	44
7.2	Časově závislá poruchová teorie	46

7.2.1	Skoková porucha	47
8	Systémy mnoha nerozlišitelných částic	49
8.1	Problém dvou částic a jejich nerozlišitelnosti	49
8.1.1	Dva elektrony v elektrickém poli	51
8.2	Nerozlišitelnost více částic	51
8.3	Nový přístup a Fockův prostor	54
8.3.1	Bosony	54
8.3.2	Fermiony	56
8.4	Hartree-Fockovy rovnice	56
9	Kvantování elektromagnetického pole	59
II	Statistická fyzika	61
10	Obecný popis statistické fyziky	63
10.1	Statistické pojmy teorie pravděpodobnosti	63
10.1.1	Popis jedné proměnné	63
10.1.2	Statistika více proměnných	65
10.1.3	Pravděpodobnost a její vlastnosti	65
10.1.4	Entropie za pomoci limitních vět	65
11	Obecný statistický popis kvantových stavů	67
11.1	Matice hustoty	67
12	Kvantové plyny	69
12.1	Odvození základních rozdělení	69
12.2	Klasická limita kanonického souboru	70
12.3	Bose–Einsteinova kondenzace	71
III	Relativistická kvantová mechanika a kvantová te- orie pole	73
13	Klasická teorie pole	75
13.1	Dynamika v polní teorii	75
13.2	Lorentzova invariance	77
13.3	Klein–Gordonovo pole	78
13.3.1	Invariance Klein–Gordonovy rovnice	78
13.3.2	Energie klasického Klein–Gordonova pole	79
14	Lorentzova grupa	81
14.1	Vlastnosti homogenní Lorentzovy grupy $O(1,3)$	84
14.2	Významné podgrupy $O(1,3)$	86
14.2.1	Grupa rotací	86
14.2.2	Boost ve směru	86

15 Poincarého algebra	89
15.1 Unitární reprezentace Lorentzovy grupy	91
15.1.1 Transformační vlastnosti generátorů	92
16 Reprezentace Lorentzovy grupy	95
16.1 Příklady ireducibilních reprezentací $D^{(j_L, j_R)}$	99
16.1.1 $D^{(0,0)}$ - „Skalární reprezentace“	99
16.1.2 $D^{(1/2,0)}, D^{(0,1/2)}$ - „Dvojnásobné reprezentace“	100
17 Kvantování polí	101
17.1 Klein–Gordonovo pole	101
 IV Pevné látky a kondenzovaný stav obecně	 103
18 Úvod do studia krystalů	105
18.1 Harmonická aproximace jaderného potenciálu	106
18.1.1 Pohybové rovnice a dynamická matice	107
18.1.2 Krystalová mřížka	108
 V Svazy, grupy a symetrie	 111

Část I

Nerelativistická kvantová mechanika

KAPITOLA 1

ÚVOD DO KVANTOVÉ MECHANIKY

Sem je třeba přidat text o tom, co to kvantová mechanika je, proč vznikla, jaké experimenty vedly k jejímu zavedení.

Text by bylo ideální sepsat po dopsání celé práce.

KAPITOLA 2

MATEMATICKÉ OPAKOVÁNÍ

Kvantová mechanika je jednou z nejkrásnějších teorií, kterou lze v lidské historii vůbec najít. Svou krásu skrývá především ve filosofické neuchopitelnosti pomocí selského rozumu právě díky silných základech, které jsou experimentálního původu.

S trochou nadsázky lze říci, že kvantová mechanika spolu s teorií relativity byly první z poznatků, které nám ukázaly, jak velké limity má selský rozum při popisu přírody.

Chceme-li se tedy věnovat kvantové mechanice trochu více, musíme se oprostít od selského rozumu a přijmout, že veškeré základy založíme na matematických metodách popisu přírody. Často se tyto metody opomíjí a automaticky se přechází k výuce kvantové mechaniky.

Témata Operátory coby funkcionály, samosdružené operátory, hermiteovské operátory, antihermiteovské operátory, symetrické operátory, unitární operátory.

Témata k dokázání pro další část Násobení integrálů typu

$$\left(\int_{\Omega} \langle j | |j\rangle dj \right) \left(\int_{\Omega} \langle k | |k\rangle dk \right) = \int_{\Omega} \delta(j - k) |j\rangle \langle k| dk dj.$$

2.1 d

Matematické teorie struktur

KAPITOLA 3

FORMALISMUS KVANTOVÉ MECHANIKY

3.1 Diracova notace

První věcí, kterou uděláme, je, že zavedeme tzv. Diracovu notaci. **Diracova notace** je speciální nástroj fyziky pro popis kvantové mechaniky.

V souladu s předchozí kapitolou máme vektorový prostor \mathcal{H} . Prvky v něm se nazývají vektory. My budeme nově nazývat vektor slovíčkem **ket**. Na místo obvyklého značení $v \in \mathcal{H}$ budeme kety zapisovat jako $|\psi\rangle$ a tedy

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

K vektorovému prostoru \mathcal{H} můžeme samozřejmě najít duální prostor forem, které působí na vektory z prostoru \mathcal{H} . Tento duální prostor značíme \mathcal{H}^* a prvky z něj nazýváme odteď na místo funkcionálu **bra**, značíme je $\langle\phi|$, tedy

$$\langle\phi| \in \mathcal{H}^*.$$

Výhoda této notace spočívá v zapisování skalárního součinu. Víme, že skalární součin $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ znamená ve skutečnosti $g_{ab}u^av^b$, kdy g_{ab} je metrika. My uvažujeme eukleidovskou metriku na plochem prostoru, tedy $g_{ab} = \delta_{ab}$, z čehož můžeme usoudit, že ve skutečnosti převedeme jeden z vektorů na formu, tím pádem užijeme formu a vektor, čímž dostáváme číslo. Označíme-li $g_{ab}u^a = u_b$, máme číslo u_bv^b .

Pokud tedy v Diracově notaci označíme $\langle\phi| = g(|\phi\rangle, \cdot)$, dostaneme skalární

součin ve tvaru nazvaném **bracket**

$$|\phi\rangle \cdot |\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle.$$

Skalární součin s metrikou δ_{ab} budeme využívat v celé části této knihy, neboť nezapočítáváme křivost prostoru. Budeme samozřejmě pracovat i s jinými souřadnicemi, než kterými jsou kartézské, takže budeme občas metriku nahrazovat např. metrikou sférických souřadnic

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix}.$$

Pokud takovou metriku budeme používat, upozorníme na to (alespoň ze začátku na to budeme upozorňovat).

Pro skalární součin uvažujeme pravidla zavedené v minulé kapitole pro komplexní vektory - ketu.

Jelikož je forma vzniklá duální transformací podle metriky speciální případ snížení indexu pomocí tensoru, budeme říkat, že $\langle\phi|$ je duální sdružení k $|\phi\rangle$ a budeme to značit $\langle\phi| = |\phi\rangle^\dagger$. V konečně dimenzionální lineární algebře toto odpovídá Hermiteovskému sdružení ketu $|\phi\rangle$.

Působíme-li nějakým lineárním zobrazením $f : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ (endomorfismem) na ket $|\psi\rangle$, dostaneme přiřazení $|\psi\rangle \mapsto f(|\psi\rangle) = |\varphi\rangle$. Lineární zobrazení na ketech můžeme zapisovat jako **lineární operátory** (v diskrétních případech matice). Operátory píšeme se stříškou a kapitálkami, tj. v našem případě $\hat{F}|\psi\rangle = |\varphi\rangle$.

Příklad Chceme ukázat skalární součin $\langle\psi|\phi\rangle$, kdy $|\phi\rangle = \hat{A}|\alpha\rangle$ a $|\psi\rangle = \hat{B}|\beta\rangle$. Dostáváme tedy následující vztah:

$$\langle\phi|\psi\rangle = (\langle\phi|)(|\psi\rangle) = (\hat{A}|\alpha\rangle)^\dagger(\hat{B}|\beta\rangle) = (\langle\alpha|\hat{A}^\dagger)(\hat{B}|\beta\rangle) = \langle\alpha|\hat{A}^\dagger\hat{B}|\beta\rangle.$$

Notace $(\langle\alpha|)(\hat{B}|\beta\rangle) = \langle\alpha|\hat{B}|\beta\rangle$ je vcelku intuitivní. Otázkou však je, co jsme to provedli s operátorem \hat{A} . Z klasické algebry víme, že pokud působí matice coby lineární zobrazení na vektor, máme

$$M \cdot v = u,$$

tj. další vektor. Pokud chceme tento vektor hermiteovsky sdružit, můžeme se ptát, jak vypadá situace vzhledem k původnímu vektoru v . Dostaneme výsledek $u^\dagger = v^\dagger M^\dagger$. Stejně tak tedy dostaneme v Diracově notaci

$$(\hat{A}|\alpha\rangle)^\dagger = \langle\alpha|\hat{A}^\dagger.$$

Dokonce obecně budeme využívat pravidlo pro lineární operátory $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$, jak jsme ukázali v matematickém úvodu a ještě jednou tam připomeneme při zavádění operátorů pro fyzikální veličiny.

Z Diracovy notace nám zbývá zavést poslední věc - momenty operátoru v nějakém ketu. Zavedení však provedeme později.

3.2 Základní formalismus kvantové teorie

Každý fyzikální systém se může nalézat v různých stavech. Stavem systému rozumíme nějakou z možných konfigurací všech parametrů, které dobře popisují, jak se systém chová a jak vypadá.

Pojmem *dobře popisují* máme na mysli několik různých věcí. V klasické fyzice se jedná pro N částic o $3N$ parametrů polohy a $3N$ parametrů hybnosti, tj. jedná se o $6N$ různých čísel, které tvoří $6N$ -dimenzionální **fázový prostor** o souřadnicích (q^i, p_i) . V kvantové fyzice je situace odlišná. Jak je odlišná uvidíme až při řešení komutátorů operátorů.

Musíme se tedy spokojit s tím, že stav daného kvantového systému je množina všech kompatibilních veličin, kterou nazveme Úplnou množinu pozorovatelných (ÚMP). Intuitivně nyní vyskakuje myšlenka: *Aha, takže v kvantové mechanice se některé veličiny nedají pozorovat.* To je tak trochu pravda - existují dvojice veličin, které nelze pozorovat současně s absolutní přesností.

Pokud veličiny (q^i, p_i) generovaly fázový prostor, který jest konfiguračním prostorem pro klasickou mechaniku, co budou generovat veličiny z ÚMP v kvantové mechanice?

Každému systému tedy přiřadíme stav, který nám dá informace o všech pozorovatelných veličinách z ÚMP. Tento stav leží v kvantovém konfiguračním prostoru. Nyní si musíme určit, jaké nároky na takový stav chceme.

Požadavek 1 Určitě chceme, aby prostor splňoval uzavřenost vůči sčítání a násobení číslem (obecně komplexním).

Chceme, aby prostor mohl být lineární kombinací různých stavů, neboť pokud máme dva stavy, v nichž se může systém nalézat, je slušným požadavkem na dobrou fyzikální teorii, aby i jejich lineární kombinace byl možný stav.

Požadavek 2 Chceme, aby na prostoru existoval skalární součin.

Skalární součin se během ověřování experimentů ukázal jako zásadní věc, při pravděpodobnostní interpretaci navíc hraje svojí důležitou roli coby amplituda pravděpodobnosti.

Požadavek 3 Chceme, aby byl prostor úplný vůči normě generované skalárním součinem.

Neúplnost prostoru by mohla způsobit, že nějaká posloupnost stavů systému by mohla konvergovat ke stavu, který neleží v našem prostoru.

Poznámka

Úplnost prostoru ve skutečnosti nepopisuje veškeré modelové situace. Proto budeme v budoucnu zavádět Gelfandův triplet.

Vektorový prostor s normou je ve skutečnosti metrický prostor, neboť norma může vždy generovat metriku $\rho(x, y) = \|x - y\|$. Úplný metrický prostor se nazývá Banachův. Pokud je prostor Banachův a navíc je metrika generovaná normou, která je generována skalárním součinem, říká se takovému metrickému prostoru Hilbertův.

Odtud můžeme formulovat první postulát kvantové mechaniky:

První postulát QM

Každému fyzikálnímu systému lze přiřadit Hilbertův prostor \mathcal{H} .

Jak uvidíme dále, tak pokud existuje libovolné komplexní číslo λ takové, že $|a\rangle = \lambda |b\rangle$, potom $|a\rangle, |b\rangle$ popisují jeden a tentýž stav. Stav v \mathcal{H} nejsou tedy vektory, nýbrž paprsky $\lambda |a\rangle : \lambda \in \mathbb{C}$. To nám dovoluje při získání $|a\rangle$ uvažovat jeho normalizaci $|e_a\rangle = |a\rangle / \| |a\rangle \|$.

Všimněme si, jak snadno se manipuluje s tím, co máme uvnitř $|\cdot\rangle$. Intuitivně plně chápeme, jak můžeme přepisovat jednotlivé normalizace atd..

Oted' tedy budeme používat skalární součin $\langle a|b\rangle \in \mathbb{C}$ prvků $|a\rangle, |b\rangle$ z Hilbertova prostoru \mathcal{H} . Jak ale interpretovat takovou věc? Nechť je systém dán ve stavu $|a\rangle$ a my se ptáme, s jakou pravděpodobností najdeme systém ve stavu $|b\rangle$. Stav v kvantové mechanice jsou totiž provázané a z toho důvodu existuje pravděpodobnost nálezu $|b\rangle$ ve stavu $|a\rangle$.

Samozeřejmě v prostoru můžeme zavést ortonormální bázi $|i\rangle$, pro kterou platí $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$. Pro takové stavy bude pravděpodobnost nálezu $|i\rangle$ v $|j\rangle$ nulová, naopak bude jistota nálezu $|i\rangle$ v $|i\rangle$. Takovou vlastnost má právě skalární součin a ten budeme z toho důvodu využívat. Pro správný fyzikální popis ale bude skalární součin $\langle a|b\rangle$ amplituda pravděpodobnosti, tj. pravděpodobnost výskytu $|a\rangle$ v $|b\rangle$ bude dána jako $p_a(b) = p(b|a) = |\langle b|a\rangle|^2$. Toto je tedy další věc, kterou můžeme postulovat.

Druhý postulát QM

Pravděpodobnost nalezení stavu systému $|\psi\rangle$ ve stavu $|\phi\rangle$ je dána formulí $p_\psi(\phi) = p(\phi|\psi) = |\langle\phi|\psi\rangle|^2$.

Dosud jsme se nezajímali o fyzikální veličiny, které chceme měřit. Nejprve zapomeňme na fakt, že bychom chtěli veličiny měřit, pouze předpokládejme, že daný systém má nějaké hodnoty fyzikálních veličin, které neznáme.

Jelikož jsme v Hilbertově prostoru \mathcal{H} , můžeme pro kety $|\psi\rangle$ najít různá lineární zobrazení $F : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ (endomorfismy), pro něž platí $F(|\psi\rangle) = |\phi\rangle \in \mathcal{H}$. Taková lineární zobrazení mohou mít různé vlastnosti. Tato zobrazení budeme nazývat lineárními operátory na \mathcal{H} . Používat budeme Diracovu notaci, tedy operátor A působící na ket $|a\rangle$ budeme značit $\hat{A}|a\rangle$.

Od fyzikálních veličin požadujeme, aby jejich hodnoty byla reálná čísla. Bez ohledu na kvantování, o němž už jste možná slyšeli, každé číslo, které je možné změřit na nějakém přístroji, je vždy reálné bez ohledu na to, jakou komplexní symboliku v teorii používáme. Z lineární algebry víme, že hermiteovské operátory (obecně samosdružené operátory) mají tu vlastnost, že jejich vlastní čísla jsou reálná, tj. pokud je \hat{A} hermiteovský, potom pro $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ je a nutně reálné číslo.

Ukazuje se, že toto není náhoda. S velkou přesností v praxi bylo ukázáno, že každé z měřitelných veličin A lze přiřadit samosdružený operátor \hat{A} , jehož vlastní čísla jsou možné hodnoty měřitelných veličin a jeho vlastní stavy tvoří bázi Hilbertova prostoru \mathcal{H} , který systému přiřazujeme. Na základě toho postulujeme další ze základních faktů o kvantové mechanice.

Třetí postulát QM

Nechť je dán systém s přiřazeným Hilbertovým prostorem \mathcal{H} . Každé měřitelné fyzikální veličině pro daný systém přiřadíme samosdružený lineární operátor, jehož vlastní čísla odpovídají možným naměřeným hodnotám a jehož vlastní stavy tvoří bázi \mathcal{H} .

Jak si ukážeme za několik okamžiků v kapitole o dvou-šterbinovém experimentu, je třeba uvažovat, že samotné měření mění stav systému. Tento fakt je občas označován za postulát *navíc*, který nemá svůj fyzikální smysl. Experimentálně je však tento fakt potvrzený a matematicky jej můžeme vyjádřit následujícím postulátem.

Čtvrtý postulát QM

Provedeme-li na systému v libovolném stavu měření veličiny A , dostaneme hodnotu a patřící do spektra operátoru \hat{A} a stav systému se změní na $|a\rangle$ - vlastní stav odpovídající hodnotě a . Je-li vlastní číslo a degenerované, převede se systém do jednoho ze stavů $|a_i\rangle$ odpovídající hodnotě a .

Více postulátů prozatím nebudeme v základním výkladu formalismu kvantové teorie říkat. Základní formalismus nám pomůže zorientovat se v kvantové mechanice a pochopit její význam.

3.3 Úvodní příklady kvantových systémů

Uvažujme nyní kvantový systém, kterému budeme chtít přiřadit Hilbertův prostor. V následujících příkladech si ukážeme některé se základních kvantových systémů.

3.3.1 Volná částice

Máme-li volnou částici (např. elektron e^-), tvrdíme, že neexistuje žádné vnější potenciálové ani jiné pole, které by na tuto částici působilo. Hamiltonián částice je v klasické mechanice tedy

$$H = T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}.$$

V tomto speciálním případě se Hamiltonián rovná Lagrangiánu $\mathcal{L} = H$ a vidíme, že $\partial_t \mathcal{L} = 0$, tudíž během pohybu částice se zachovává kinetická energie, neboť $H(t) = H(t_0)$ pro každé t .

V klasické mechanice by náš stavový prostor byl fázový prostor \mathcal{F} s dimenzí $\dim \mathcal{F} = 6 \longleftrightarrow \mathcal{F}[x^1, x^2, x^3, p_1, p_2, p_3]$ s bází $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \mathbf{f}^1, \mathbf{f}^2, \mathbf{f}^3$, tj. každý stav volné částice lze vyjádřit jako

$$\text{stav částice} = x^i \mathbf{e}_i + p_i \mathbf{f}^i.$$

Pro kvantovou mechaniku jsme si řekli, že takové volné částici přiřadíme prostor \mathcal{H} , o němž zatím více nevíme. Víme však, že kinetická energie T i celková energie H (v obecnosti i mimo volnou částici v systémech s pouze potenciálovými poli) působí jako operátory na tomto prostoru a jejich vlastní čísla jsou měřitelné hodnoty. Napišme si tedy energetickou rovnici

$$\hat{H} |E_i\rangle = E_i |E_i\rangle,$$

kdy operátor značíme stříškou \hat{H} a E_i označuje i . vlastní hodnotu tohoto operátoru. Operátor \hat{H} nyní můžeme vyjádřit pomocí vztahu $H = p^2/2m$, tj.

$$\hat{p}^2 |E_i\rangle = 2mE_i |E_i\rangle,$$

Jak vypadá operátor hybnosti?

Abychom zjistili, jak vypadá operátor hybnosti \hat{p} , musíme nejprve uvést několik dalších úvah.

Prvně je jasné, že Hilbertův prostor má pevně zvolenou ortonormální bázi $|i\rangle$, tj. $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$, kdy $\langle \cdot|\cdot\rangle$ je skalární součin vůči libovolným prvkům v \mathcal{H} , jak jsme ukázali na začátku v podkapitole 3.1. Poté může existovat jiná pevně daná ortonormální báze $|\alpha\rangle$, kdy opět $\langle \alpha|\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$.

Z lineární algebry víme, že existuje operátor takový, který převede celou bázi $|i\rangle$ na celou bázi $|\alpha\rangle$. Takový operátor nazveme unitární operátor (více probereme v kapitole 3.5).

To nám tedy říká, že pro každou měřitelnou veličinu A můžeme najít takovou bázi $|i_A\rangle$, pro kterou je operátor \hat{A} pouze vynásobení ketu číslem a_i , tj. $\hat{A} = a_i$. Všem operátorům vyjádřeným v této bázi říkáme operátory vyjádřené v A reprezentaci.

My se chceme pohybovat v souřadnicové (x) reprezentaci, tedy $\hat{x} = x$. Otázkou je, jak v takové reprezentaci vypadá operátor hybnosti \hat{p} , který hledáme pro naši energii volné částice.

Začneme tím, že ze stavu $|\mathbf{x}\rangle$ chceme dostat $|\mathbf{x} - \mathbf{a}\rangle$, tj. stav systému, který je posunutý v prostoru o \mathbf{a} . Víme následující

$$\hat{G}|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x} - \mathbf{a}\rangle,$$

kde \hat{G} je námi označený operátor přechodu z místa \mathbf{x} do místa $\mathbf{x} - \mathbf{a}$. Rozepíšeme si stav $\mathbf{x} - \mathbf{a}$ pomocí Taylorova rozvoje:

$$|\mathbf{x} - \mathbf{a}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\mathbf{a} \cdot \nabla)^n |\mathbf{x}\rangle = \exp(-\mathbf{a} \cdot \nabla) |\mathbf{x}\rangle,$$

z čehož tedy plyne, že $\hat{G} = \exp(-\mathbf{a} \cdot \nabla)$. Nyní víme, že platí $\hat{x}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle$ a $\hat{x}|\mathbf{x} - \mathbf{a}\rangle = (\mathbf{x} - \mathbf{a})|\mathbf{x} - \mathbf{a}\rangle$.

DODĚLAT TVAR OPERÁTORU HYBNOSTI

Když nyní známe tvar operátorů polohy $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}$ a hybnosti $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, můžeme znovu formulovat úlohu o vlastních číslech energie volné částice:

$$(-i\hbar\nabla)^2 |E_i\rangle = 2mE_i |E_i\rangle,$$

přičemž $(-i\hbar\nabla)(-i\hbar\nabla) = -\hbar^2\Delta$, tedy

$$\left(\Delta + \frac{2mE_i}{\hbar^2}\right) |E_i\rangle = 0.$$

Povšimněme si, že píšeme operátory bez působení na prvek v závorce a poté celou závorkou působíme na ket. Tohoto zápisu budeme v kvantové mechanice využívat často.

Předchozí rovnice vytvořená z hledání vlastních čísel se tedy stala parciální diferenciální rovnicí druhého řádu (neboť $\Delta \equiv \nabla_a \nabla^a$) pro stav $|E_i\rangle$. Velmi dobře známe řešení téhle rovnice, jelikož se jedná o obdobu Helmholtzovy rovnice, která popisuje šíření rovinných vln.

Pro volnou částici tedy platí, že její kvantový stav $|E_i\rangle$ je rovinná vlna o vlnovém vektoru $k^2 = 2mE_i/\hbar^2$. Pokud si uvědomíme, že $E = \frac{p^2}{2m}$, poté $p_i = 2mE_i$, tudíž $k^2\hbar^2 = p_i^2$. Tím jsme odvodili vztah mezi vlnovým a částicovým chováním vlny (spojili jsme vlnový vektor s hybností - tím jsme také kompletně odešli od představy, že něco má pouze vlnový nebo pouze částicový charakter, dokonce jsme úplně odešli od představ, že se něco musí být částice nebo vlna).

Pokud námi získanou rovnici vynásobíme vektorem ve směru šíření, dostaneme vztah odpovídající de Broglieho hypotéze

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}.$$

Jak vypadá explicitní tvar $|E_i\rangle$ se dozvíme, když do důsledku vyřešíme vlnovou rovnici s předpokladem $\mathbf{k}^2\hbar^2 = \mathbf{p}^2$. Řešení rovnice má tvar

$$|E_i\rangle = \mathcal{N} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})} = \mathcal{N} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right).$$

DODĚLAT NORMALIZACI VLNOVÉ FUNKCE

3.3.2 Spin volné částice

Máme opět volnou částici a už víme, že její Hilbertův prostor $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, tj. prostor všech kvadraticky integrabilních funkcí v prostoru \mathbb{R}^3 , který je parametrizovaný časem.

Pokud ale máme volnou částici, která má vnitřní strukturu, tj. navíc ji chceme popsat ještě dalším parametrem, je třeba přidat další informaci do našeho Hilbertova prostoru \mathcal{H} pro částici s parametrem. To uděláme pomocí tenzorového součinu $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathcal{H}$, kdy \mathcal{H} je Hilbertův prostor popisující samostatně vnitřní parametr. V případě spinu je $\mathcal{H} \equiv \mathbb{C}^2$.

Budeme nyní hledat vlastní hodnoty spinu, neboť vlastní hodnoty energie částice již máme z předchozího případu. Proč si můžeme nyní dovolit pracovat pouze na prostoru \mathbb{C}^2 bude zdůvodněno v následující kapitole o operátorech (3.4).

Operátor spinového momentu (zkráceně spinu) označíme jako $\hat{\mathbf{S}}$. S operátorem spinu jsou spojeny tzv. **Pauliho matice** $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, pro které platí $\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$. Tyto

matice se vyjádří jako

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Můžeme si ukázat, jak vypadá např. matice vytvořená jako $\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x$. Víme, že pro maticové násobení neplatí obecně komutativnost, tudíž je výraz různý od nuly. Označme pro teď $[\sigma_x, \sigma_y] \equiv \sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x$, potom dostaneme

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = 2i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 2i\sigma_z. \end{aligned}$$

V budoucnu si ukážeme, že platí obecný vztah, který nazveme komutační relace,

$$[\sigma_a, \sigma_b] = 2i\varepsilon^{abc}\sigma_c$$

a pro spin platí obdobné relace

$$[\hat{S}_a, \hat{S}_b] = i\hbar\varepsilon^{abc}\hat{S}_c.$$

Tyto relace jsou experimentálně ověřené a díky tomu, že jsou totožné s komutačními relacemi pro moment hybnosti, nazýváme spin vnitřním momentem hybnosti.

Pojďme však nyní konečně řešit vlastní čísla spinu. Budeme pro jednoduchost uvažovat pouze spinový moment ve směru z , tj.

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |s\rangle &= s |s\rangle, \\ \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} &= s \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Pokud si nyní šikovně napíšeme $s = \tilde{s}\hbar/2$, dostaneme

$$\begin{pmatrix} 1 - \tilde{s} & 0 \\ 0 & -1 - \tilde{s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

tj. řešíme podmínku řešitelnosti této soustavy lineárních rovnic pro neznámé a, b . Tato podmínka se dá zapsat jako $\det(\hat{S}_z - s\hat{I}) = 0$, což odpovídá determinantu poslední matice, tj.

$$-(1 - \tilde{s})(1 + \tilde{s}) = 0,$$

tedy vlastní čísla spinu jsou $s = \tilde{s}\hbar/2 = \pm\hbar/2$ a jim odpovídající vlastní stavy $(1\ 0)^T$ a $(0\ 1)^T$. Označme tyto stavy $|\uparrow\rangle = (1\ 0)^T$, $|\downarrow\rangle = (0\ 1)^T$, potom libovolný spinový stav dostaneme jako

$$|s\rangle = A|\uparrow\rangle + B|\downarrow\rangle,$$

přičemž $|s\rangle \in \mathbb{C}^2$, navíc požadujeme pro normalizaci $\langle s|s\rangle = 1$, tudíž

$$\langle s|s\rangle = \boxed{|A|^2 + |B|^2 = 1}.$$

Finální stav volné částice se spinem tedy můžeme zapsat jako tensorový součin $|\Psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |s\rangle \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$.

Poznámka: Volnou částici se spinem, kterou jsme uvažovali, jsme uvažovali pouze pro dvou-hladinový systém. O spinu a momentu hybnosti budeme více diskutovat v pozdějších kapitolách.

3.4 Zavedení operátorů v QM

V této kapitole budeme formálněji zavádět operátory na Hilbertových prostorech a obecně se zabývat Hilbertovými prostory.

3.4.1 Projekční operátory

Zavedme nyní projekční operátory, které budeme značit \hat{P}_i , zavedme podprostory \mathcal{H}_i Hilbertova prostoru \mathcal{H} takové, že

$$\mathcal{H}_i \equiv \{\hat{P}_i |a\rangle : |a\rangle \in \mathcal{H}\}.$$

Příklad projekčního operátoru v klasické 3D notaci Máme-li \mathbb{R}^3 , dostáváme několik možností projekce:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_x &= \{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x)\mathbf{e}_x : \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3\}, \\ \mathcal{H}_y &= \{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_y)\mathbf{e}_y : \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3\}, \\ \mathcal{H}_z &= \{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_z)\mathbf{e}_z : \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3\}, \\ \mathcal{H}_{xy} &= \{\mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_z)\mathbf{e}_z : \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3\}, \\ \mathcal{H}_{xz} &= \{\mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_y)\mathbf{e}_y : \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3\}, \\ \mathcal{H}_{yz} &= \{\mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_x)\mathbf{e}_x : \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3\}, \\ \mathcal{H}_{xyz} &= \{\mathbf{v} : \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3\} = \hat{I},\end{aligned}$$

a to jsme použili pouze projekce do základních os x, y, z a osových rovin (x, y) , (x, z) , (y, z) a poté identitu - projekci do celého prostoru. Mohli bychom samozřejmě zavést i projekci do přímky danou rovnicí $x = y$ pro $z = 0$. To je ideální k samostatnému procvičení základní algebry ve 3D. Jelikož chceme operátory, potom operátorem např. pro \mathcal{H}_x je $\hat{P}_x |v\rangle = \langle x|v\rangle |x\rangle$, tj. $\hat{P}_x = |x\rangle \langle x|$, pokud přejdeme do Diracovy notace, kde $\langle x|x\rangle = 1$.

Konec příkladu

Nyní tedy víme, že máme Hilbertův prostor \mathcal{H} , který je separabilní, tj. má spočetnou bázi, kterou označíme $|i\rangle$ pro $i \in \{1, \dots, n\}$, kdy n je dimenze \mathcal{H} . Alternativně bychom samozřejmě mohli zavést jinou bázi $|i'\rangle$ a hledat vztah mezi dvěma zadanými bázemi, tak budeme dělat v kapitole 3.5.

Uvažujme nyní libovolný podprostor \mathcal{H}_i dle definice uvedené výše. Ptáme se, jak bude vypadat projekční operátor na tento podprostor. Dle zavedené definice musíme vědět, jak projekční operátor \hat{P}_i vypadá, abychom vůbec mohli o \mathcal{H}_i mluvit. To je moderní přístup, který zadefinuje projekční operátory, a tím definuje i jim příslušné podprostory.

Intuitivní představa projekce Ještě než si ale projekční operátory zadefinujeme, podívejme se trochu intuitivněji na to, co chceme dělat. Představme si, že máme obyčejný vektorový prostor \mathbb{R}^3 a v něm vektor souřadnic (x, y, z) , který můžeme rozložit na rovinu $(x, y) \sim \mathbb{R}^2$ a výšku kolmou na tuto rovinu $z \sim \mathbb{R}$. Poté můžeme libovolný vektor rozložit na součet $\mathbf{v} = v^{xy}\mathbf{e}_{xy} + v^z\mathbf{e}_z$.

Projekce vektoru \mathbf{v} do roviny (x, y) je tedy hodnota $v^{xy}\mathbf{e}_{xy}$, projekce na osu z je hodnota $v^z\mathbf{e}_z$.

Jak je nám určitě jasné, tak $v^{xy}\mathbf{e}_{xy} = v^x\mathbf{e}_x + v^y\mathbf{e}_y$. Tudíž projekce do roviny (x, y) lze zapsat pomocí 3D i Diracovy notace jako

$$\begin{aligned} v^{xy}\mathbf{e}_{xy} &= (\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{v})\mathbf{e}_x + (\mathbf{e}_y \cdot \mathbf{v})\mathbf{e}_y, \\ v^{xy} |xy\rangle &= \langle x|v\rangle |x\rangle + \langle y|v\rangle |y\rangle. \end{aligned}$$

Vidíme, že potom se dá projekční operátor v Diracově notaci zapsat velice elegantně jako

$$\hat{P}_{xy} = |x\rangle \langle x| + |y\rangle \langle y|.$$

Konec příkladu

Definice projekčního operátoru Nechť je \mathcal{H} Hilbertův prostor přiřazený nějakému kvantovému systému. Nechť je M ortonormální báze \mathcal{H} . Potom defi-

nujeme projekční operátor \hat{P}_i předpisem

$$\hat{P}_i \equiv \sum_{j \in N_i \subseteq M} |j\rangle \langle j|,$$

kdy N_i je libovolná takto označená podmnožina báze M . Suma v této definici má pro diskrétní bázi význam sčítání a pro spojitou bázi význam integrálu.

Pokud po vzoru předchozí definice projekčního operátoru označíme $N_{xy} = \{|x\rangle, |y\rangle\}$, dostaneme projekční operátor \hat{P}_{xy} z předchozího příkladu. Obdobně si můžeme označit N_{xz} a dostat $\hat{P}_{xz} = |x\rangle \langle x| + |z\rangle \langle z|$.

Teorém Máme-li projekční operátor \hat{P}_i , potom $\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i$.

Důkaz Jelikož víme, že báze, pomocí které definujeme projekční operátor, je ortonormální, dostaneme

$$\hat{P}_i^2 = \left(\sum_{j \in N_i} |j\rangle \langle j| \right) \left(\sum_{k \in N_i} |k\rangle \langle k| \right) = \sum_{j \in N_i} \sum_{k \in N_i} |j\rangle \langle j|k\rangle \langle k| = \sum_{j \in N_i} |j\rangle \langle j|,$$

neboť $\langle j|k\rangle = \delta_{jk}$. Proč toto lze udělat pro konečný součet je jasné, proč to lze i pro integraci lze najít v příslušných matematických učebnicích nebo v kapitole . Také je třeba zmínit, že pro spojitě kety $|x\rangle$ je $\langle x|y\rangle = \delta_x(y) = \delta(x - y) = \delta_{xy}$ ve smyslu předchozího značení pro zobecněnou sumu.

□

Máme tedy zavedené projekční operátory působící na Hilbertově prostor \mathcal{H} s notací \hat{P}_i , kdy index i značí libovolně (avšak vhodně a přehledně) podprostor, na které chceme projektovat. Intuitivně také chápeme, že $\hat{P}^2 = \hat{P}$, neboť při projekci do nějakého podprostoru se vynulují všechny složky vektory, které *čouhají pryč* z tohoto podprostoru, ostatní složky se zachovávají. Při druhé aplikaci logiky děláme to samé, tj. vektor se už nezmění. Navíc pokud děláme projekci z prostoru \mathcal{H} do celého prostoru \mathcal{H} , tj. naše N_i z definice je přímo báze prostoru \mathcal{H} , dostaneme identitu. Operátor identity tedy můžeme napsat jako

$$\hat{I} = \sum_i |i\rangle \langle i|.$$

Rovnost můžeme dokázat jednoduše tak, že pokud zapůsobíme takovým operátorem na libovolný prvek báze $|j\rangle$, dostaneme

$$\sum_i |i\rangle \langle i|j\rangle = \sum_i |i\rangle \delta_{ij} = |j\rangle,$$

tedy $\hat{I}|j\rangle = |j\rangle$ je skutečně identita pro prvky báze. Díky linearitě projektoru je tedy jasné, že se jedná o identitu pro libovolný vektor;

$$\hat{I}|\psi\rangle = \hat{I}(\psi^i |i\rangle) = \psi^i \hat{I}|i\rangle = \psi^i |i\rangle = |\psi\rangle,$$

přičemž uvažujeme $\psi^i |i\rangle$ jako součet přes i .

Linearita projekčního operátoru Měli bychom si také ukázat, že linearita projekčního operátoru je skutečně splněna. Ukažme tedy nejprve diskrétní (který je vidět ihned), poté spojitý případ;

$$\begin{aligned}\hat{P}(\alpha |A\rangle + |B\rangle) &= (|1\rangle \langle 1| + \cdots + |n\rangle \langle n|) (\alpha |A\rangle + |B\rangle) = \alpha \hat{P} |A\rangle + \hat{P} |B\rangle, \\ \hat{P}(\alpha |A\rangle + |B\rangle) &= \int_{\Omega} |i\rangle \langle i| (\alpha |A\rangle + |B\rangle) di = \alpha \hat{P} |A\rangle + \hat{P} |B\rangle,\end{aligned}$$

což platí, neboť integrál je lineární zobrazení (dokazuje se v základní analýze - v teorii Lebesgueova integrálu).

□

Samosdruženost projekčního operátoru Projektor \hat{P}_i na podprostory \mathcal{H}_i navíc splňují, že jsou samosdružené. Obecně lze zapsat projektor pomocí jeho diskrétní a spojitě části

$$\hat{P}_i = \sum_{j \in N_i} |j\rangle \langle j| + \int_{\Omega_i} dj |j\rangle \langle j|$$

a je jasné, že $(|i\rangle \langle j|)^{\dagger} = |j\rangle \langle i|$, potom

$$\hat{P}_i^{\dagger} = \sum_{j \in N_i} |j\rangle \langle j| + \int_{\Omega_i} dj |j\rangle \langle j| = \hat{P}_i,$$

tudíž projekční operátor je samosdružený.

□

Vlastní čísla projektoru To tedy znamená, že vlastní čísla projektoru jsou reálná, pojďme se podívat na to, jak vypadají.

$$\begin{aligned}\hat{P}_i |n\rangle &= \sum_{j \in N_i} |j\rangle \langle j|n\rangle + \int_{\Omega_i} dj |j\rangle \langle j|n\rangle = n |n\rangle, \\ \hat{P}_i |n\rangle &= \sum_{j \in N_i} p_n(j) |j\rangle + \int_{\Omega_i} p_n(j) dj.\end{aligned}$$

Vidíme tedy, že se jedná o sčítání pravděpodobností přechodu. Ukažme si, že pokud uvažujeme existenci pouze diskrétních hodnot, tj. integrál je nulový, potom pro $|n\rangle$ patřící do ortonormální báze, přes kterou se sčítá, je vlastní číslo 1:

$$\hat{P}_i |n\rangle = \sum_{j \in N_i} |j\rangle \langle j|n\rangle = \sum_{j \in N_i} \delta_{jn} |j\rangle = |n\rangle.$$

Pokud nyní položíme $|n\rangle = |a\rangle + |b\rangle$, kdy $|a\rangle, |b\rangle$ patří do ortonormální báze, přes kterou sčítáme, dostaneme

$$\hat{P}_i |n\rangle = \sum_{j \in N_i} |j\rangle (\delta_{aj} + \delta_{bj}) = |n\rangle.$$

Obecně bychom mohli dojít pro obecnou lineární kombinaci $|n\rangle$ prvků ortonormální báze, přes kterou sčítáme, k tomu, že vlastní čísla projektoru jsou

$$\text{vlastní číslo projektoru} = \begin{cases} 1, & |n\rangle \in \mathcal{H}_i \\ 0, & |n\rangle \notin \mathcal{H}_i \\ p_n(\mathcal{H}_i) & |n\rangle \text{ obecné} \end{cases}$$

přičemž poslední případ je obecný zápis pro *pravděpodobnost nalezení stavu $|n\rangle$ v prostoru \mathcal{H}_i* , tj.

$$p_n(\mathcal{H}_i) \equiv \sup_{|m\rangle \in \mathcal{H}_i} p_n(m) = \sup_{|m\rangle \in \mathcal{H}_i} |\langle m|n\rangle|^2.$$

Z toho také např. plyne, že vlastní čísla operátoru identity jsou vždy 1, což je přesně to, co bychom od takového operátoru očekávali.

Konec hledání vlastních čísel projektoru

3.4.2 Operátory měřitelných veličin

Máme-li daný systém a popíšeme jej pomocí Hilbertova prostoru \mathcal{H} tak, že se systém nachází ve stavu $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, zbývá nám ještě říci, jak na takovém systému měřit veličiny.

Náš postulát nám říká, že každé měřitelné veličině na systému přiřadíme operátor. Pro měřitelnou veličinu A tedy máme operátor \hat{A} , který mapuje \mathcal{H} sám do sebe, jedná se tedy o endomorfní zobrazení. Zároveň požadujeme, aby byl takový operátor lineární a samosdružený (ve spočetných systémech hermiteovský).

Vlastnost lineárních samosdružených operátorů je, že jejich vlastní čísla (tedy měřitelné hodnoty veličin) jsou reálná, což je přesně to, co požadujeme od všech fyzikálních veličin.

3.5 Unitární operátory - různé báze \mathcal{H}

KAPITOLA 4

APROXIMAČNÍ METODY

Fyzikální modely rozebírané ve standardní kvantové mechanice jako potenciálová jáma nebo harmonický oscilátor jsou přesným řešením Schrödingerovy rovnice

$$(i\hbar\partial_t - \hat{H})|E\rangle = 0. \quad (4.1)$$

Hamiltonián \hat{H} může být ale obecně funkcí času $\hat{H}(t)$ - mohou se měnit např. vnější pole (např. magnetického charakteru).

4.1 Stacionární poruchová teorie

Uvažujme, že Hamiltonián systému lze zapsat ve tvaru

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t), \quad (4.2)$$

kde $\hat{H}'(t)$ je Hamiltonián doplňující časově nezávislou část Hamiltoniánu \hat{H}_0 . Schrödingerova rovnice, kdy uvažujeme $\partial_t \hat{H}_0 = 0$, má poté tvar

$$i\hbar|\dot{\psi}\rangle = \hat{H}_0|\psi\rangle + \hat{H}'(t)|\psi\rangle. \quad (4.3)$$

Dále známe řešení vlastních stavů stacionární Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}_0|E\rangle = E|E\rangle. \quad (4.4)$$

a uvažujeme pro lepší matematický background, že poruchový hamiltonián lze zapsat ve tvaru

$$H'(t) = \sum_{k=0}^N \lambda^k H_k(t), \quad (4.5)$$

kde N vyjadřuje řád poruchovosti. Pro účely stacionárních poruch tvrdíme, že lze Hamiltonián vždy zapsat takovým způsobem. Jedná se více o předpoklad, než o tvrzení, které není tak snadné dokázat¹.

Formálně můžeme zapsat do řady také řešení Schrödingerovy rovnice

$$E = E^0 + \sum_{k=0}^N \lambda^k E^{(k)}, \quad (4.6)$$

$$|E\rangle = |E_0\rangle + \sum_{k=0}^N \lambda^k |E\rangle^{(k)}. \quad (4.7)$$

4.1.1 Nedegenerované spektrum

Uvažujme nyní, že $\hat{H} \sim \lambda$, tj. řád poruchy je 1. Hledá hlavních čísel energie se nám zjednoduší na

$$E |E\rangle = \hat{H}_0 |E\rangle + \lambda \hat{H}_1 |E\rangle, \quad (4.8)$$

kde

$$E = E^0 + \lambda E^1, \quad (4.9)$$

$$|E\rangle = |E^0\rangle + \lambda |E^1\rangle, \quad (4.10)$$

odkud můžeme napsat řešení pro stacionární stav $|E^0\rangle$

$$|E^0\rangle = \int d\epsilon |\epsilon\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t}, \quad (4.11)$$

přičemž zavádíme stacionární stav a vlastní hodnotu ϵ coby řešení rovnice

$$\hat{H}_0 |\epsilon\rangle = \epsilon |\epsilon\rangle, \quad (4.12)$$

které nám popisuje systém pro $\hat{H}_1 = 0\hat{I}$ i při časovém vývoji

$$i\hbar\partial_t |E^0\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \int d\epsilon |\epsilon\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t} = \int d\epsilon \epsilon |\epsilon\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t} = \hat{H}_0 |E^0\rangle. \quad (4.13)$$

Formální prohození derivace a integrálu nám zajišťuje také např. fakt, že $\epsilon > 0$ vždy, a tedy integrand $|\epsilon\rangle e^{f(\epsilon)}$ je omezená a spojitá funkce t , zároveň předpoklady QM říkají, že i spojitá po částech v ϵ . Pokud bychom měli diskrétní spektrum, potom bychom řešili záměnu sumy a derivace, což plyne z linearit diskrétních součtů.

Poznámkou zmiňme, že $\int d\epsilon$ zde má roli jak sumy, tak integrálu v závislosti na diskrétní a spojitě části spektra časově nezávislého hamiltoniánu \hat{H}_0 .

¹alespoň myslím

Hledejme nyní vlastní čísla energie našeho systému

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle, \quad (4.14)$$

kdy pro přehlednost vkládáme index n , který ovšem může mít jak diskrétní, tak spojitý význam. Nyní si rozepíšeme rovnici pomocí rozvoje vlastních čísel a vlastních vektorů

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) [|E_n^0\rangle + \lambda |E_n^1\rangle] = [E_n^0 + \lambda E_n^1] [|E_n^0\rangle + \lambda |E_n^1\rangle], \quad (4.15)$$

ze které dostaneme

$$[\hat{H}_0 - E_n^0 \hat{I}] |E_n^0\rangle = 0, \quad (4.16)$$

$$[\hat{H}_0 - E_n^0 \hat{I}] |E_n^1\rangle = E_n^1 \hat{I} |E_n^0\rangle \quad (4.17)$$

a další rovnice pro nulovost členů u $\lambda^{n>1}$ bychom získali analogicky. Řešíme totiž rovnici $p(\lambda) = 0$, což znamená, že chceme koeficient u každé mocniny λ nulový nezávisle na λ . Obecně pak dostáváme rovnice až do řádu S , kdy S je stupeň polynomu $p(\lambda)$, následující set rovnic pro $s \in \{1, 2, \dots, S\}$

$$\boxed{[\hat{H}_0 - E_n^0 \hat{I}] |E_n^s\rangle = [E_n^1 \hat{I} - \hat{H}_1] |E_n^{s-1}\rangle + \sum_{k=2}^s E_n^k \hat{I} |E_n^{s-k}\rangle} \quad (4.18)$$

Navíc samozřejmě uvažujeme, že libovolný stavový vektor $|E_n\rangle = |E_n^0\rangle + \lambda |E_n^1\rangle$ lze normalizovat a přiřknout mu libovolnou fázi $e^{i\varphi}$, protože pokud tak učiníme konzistentně $e^{i\varphi} \mathcal{N} |E_n\rangle$, nezmění se charakter odvozených rovnic. *Nelze však násobit pouze $|E_n^0\rangle$ nebo $|E_n^1\rangle$.*

Normalizaci budeme požadovat poněkud nezvyklým způsobem. Rozepíšeme skalární součin $\langle \epsilon_n | E_n \rangle$;

$$\langle \epsilon_n | E_n \rangle = \langle \epsilon_n | E_n^0 + \lambda E_n^1 \rangle = \langle \epsilon_n | E_n^0 \rangle + \lambda \langle \epsilon_n | E_n^1 \rangle. \quad (4.19)$$

Jelikož $|\epsilon_n\rangle = |E_n^0\rangle$, které chceme normalizované, je přirozené nyní zvolit podmínku $\langle \epsilon_n | E_n^1 \rangle$, neboť při slabých poruchách chceme zároveň uvažovat přibližnou platnost $\langle \epsilon_n | E_n \rangle \approx 1$, kterou tedy formálně označíme jako normovací podmínku

$$\langle \epsilon_n | E_n^s \rangle = \delta^{0s}. \quad (4.20)$$

Podarí se nám ale najít taková řešení, že skutečně platí výše napsaná normalizační podmínka (4.20)? Uvažme tedy, jak vypadá situace pro $\langle \epsilon_n | (4.18) \rangle$;

$$\langle \epsilon_n | [\hat{H}_0 - E_n^0 \hat{I}] |E_n^s\rangle = \langle \epsilon_n | [E_n^1 \hat{I} - \hat{H}_1] |E_n^{s-1}\rangle + \sum_{k=2}^s E_n^k \langle \epsilon_n | E_n^{s-k} \rangle \quad (4.21)$$

Za předpokladu normalizační podmínky (4.20) dostáváme pravou stranu

$$\text{R.H.S.} = -\langle \epsilon_n | \hat{H}_1 |E_n^{s-1}\rangle + E_n^s \langle \epsilon_n | E_n^0 \rangle = -\langle \epsilon_n | \hat{H}_1 |E_n^{s-1}\rangle + E_n^s. \quad (4.22)$$

Na levé straně dostáváme

$$\text{L.H.S.} = \langle \epsilon_n | \hat{H}_0 | E_n^s \rangle - E_n^0 \langle \epsilon_n | E_n^s \rangle = 0, \quad (4.23)$$

kde využíváme $\langle \epsilon_n | \hat{H}_0 = (\hat{H}_0 | \epsilon_n \rangle)^\dagger = \epsilon_n \langle \epsilon_n |$ a samozřejmě $\epsilon_n = E_n^0$. Finálně tedy dostáváme obecně pro E_n^s vztah

$$\boxed{E_n^s = \langle \epsilon_n | \hat{H}_1 | E_n^{s-1} \rangle}, \quad (4.24)$$

a tudíž nám stačí znát k E_n^s stav $|E_n^{s-1}\rangle$.

Poruchy prvního řádu

Uvažujme poruchy pouze prvního řádu, tj stupeň polynomu $S = 1$, dostáváme tedy pouze dvě rovnice

$$\hat{H}_0 | \epsilon_n \rangle = \epsilon_n | \epsilon_n \rangle, \quad (4.25)$$

$$[\hat{H}_0 - \epsilon_n] | E_n^1 \rangle = [(\epsilon_n^1) \hat{I} - \hat{H}_1] | \epsilon_n \rangle. \quad (4.26)$$

První z rovnic nám nedává žádnou novou informaci. Použijme ale na druhou z rovnic $\langle \epsilon_n |$, potom

$$E_n^1 = \langle \epsilon_n | \hat{H}_1 | \epsilon_n \rangle, \quad (4.27)$$

a pokud použijeme $\langle \epsilon_m |$ pro $m \neq n$, dostaneme zase

$$(\epsilon_m - \epsilon_n) \langle \epsilon_m | E_n^1 \rangle = -\langle \epsilon_m | \hat{H}_1 | \epsilon_n \rangle, \quad (4.28)$$

$$\langle \epsilon_m | E_n^1 \rangle = -\frac{\langle \epsilon_m | \hat{H}_1 | \epsilon_n \rangle}{\epsilon_m - \epsilon_n} \quad (4.29)$$

a odtud získáváme stav

$$|E_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \epsilon_m | \hat{H}_1 | \epsilon_n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} | \epsilon_m \rangle. \quad (4.30)$$

Dostáváme tedy finálně vlastní čísla a stavy perturbovaného hamiltoniánu

$$\boxed{E_n = \epsilon_n + \langle \epsilon_n | \hat{H}_1 | \epsilon_n \rangle} \quad (4.31)$$

$$\boxed{|E_n\rangle = | \epsilon_n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \epsilon_m | \hat{H}_1 | \epsilon_n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} | \epsilon_m \rangle} \quad (4.32)$$

Poruchy druhého řádu

Postup naprosto analogický jako u poruch prvního řádu, máme však ještě navíc další rovnici, z níž určíme

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \epsilon_n | \hat{H}_1 | \epsilon_m \rangle \langle \epsilon_m | \hat{H}_1 | \epsilon_n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m}. \quad (4.33)$$

4.2 Ritzův variační princip

Uvažujme stav systému $|n\rangle$, který není prozatím normovaný, potom střední hodnota energie systému lze napsat obecně jako

$$E[n] = \langle \hat{H} \rangle_n = \frac{\langle n | \hat{H} | n \rangle}{\langle n | n \rangle}. \quad (4.34)$$

Při variačním principu hledáme logicky variaci nějaké veličiny - v klasické fyzice se jedná o klasickou akci S , kdy poté pokládáme $\delta S = 0$. V Ritzově variačním principu se díváme na chování variace energie ve stavu $|n\rangle$, což nám formálně dává

$$\delta E[n] = E[n + \delta n] - E[n] = \quad (4.35)$$

$$= \frac{\langle n | \hat{H} | n \rangle + \langle \delta n | \hat{H} | n \rangle + \langle n | \hat{H} | \delta n \rangle + \langle \delta n | \hat{H} | \delta n \rangle}{\langle n | n \rangle + \langle \delta n | n \rangle + \langle n | \delta n \rangle + \langle \delta n | \delta n \rangle} - E \approx \quad (4.36)$$

$$\approx \frac{\langle n | \hat{H} | n \rangle + \langle \delta n | \hat{H} | n \rangle + \langle n | \hat{H} | \delta n \rangle}{\langle n | n \rangle + \langle \delta n | n \rangle + \langle n | \delta n \rangle} - E = \quad (4.37)$$

$$= \frac{\langle \delta n | \hat{H} - E \hat{I} | n \rangle + \langle n | \hat{H} - E \hat{I} | \delta n \rangle}{\langle n | n \rangle + \langle \delta n | n \rangle + \langle n | \delta n \rangle} \quad (4.38)$$

Stacionární hodnoty funkcionálu $E[n]$ jsou potom dle Ritzova variačního principu dány podmínkou $\delta E[n] = 0$ a tedy

$$\langle \delta n | \hat{H} - E \hat{I} | n \rangle + \langle n | \hat{H} - E \hat{I} | \delta n \rangle = 0 \quad (4.39)$$

pro každé $|\delta n\rangle$. Finálně tedy z předpokladu, že rovnice v rámečku platí pro libovolné vychýlení stavu, dostáváme podmínku

$$\langle \delta n | \hat{H} - E \hat{I} | n \rangle = \langle n | \hat{H} - E \hat{I} | \delta n \rangle = 0. \quad (4.40)$$

Nyní se podívejme, jak vypadá člen $\langle \delta n | \hat{H} | n \rangle$ při volně $|n\rangle = \psi = \psi(\mathbf{x}, t)$. Uvažujme Hamiltonián ve tvaru $H = E + V(\mathbf{x})$, tj. časově nezávislý potenciál.

Potom dostáváme

$$\langle \delta\psi | (\hat{T} + V(\hat{\mathbf{x}})) | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \delta\psi^*(\mathbf{x}, t) \Delta\psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} + W(t) \stackrel{*}{=} \quad (4.41)$$

$$\stackrel{*}{=} -\frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla\delta\psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla\psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} + W(t). \quad (4.42)$$

kde jsme označili

$$W(t) = \int \delta\psi^*(\mathbf{x}, t) V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x}, \quad (4.43)$$

kdy samozřejmě všude integrujeme přes definiční obor $\psi(\mathbf{x}, t)$ vůči proměnné \mathbf{x} (např. pro kartézské souřadnice \mathbb{R}^2). Rovnost $\stackrel{*}{=}$ plyne z integrace per partes s okrajovou podmínkou [ZJISTIT PODMÍNKU!](#)

4.2.1 Stacionární stavy

Tvrdíme, že funkcionál $E[\psi]$ nabývá stacionární hodnotu pro $|\psi_n\rangle$ coby řešení stacionární Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle. \quad (4.44)$$

KAPITOLA 5

MOMENT HYBNOSTI

V této kapitole se podíváme na moment hybnosti pro jednu částici a poté na částice dvě. Pod momentem hybnosti budeme rozumět libovolnou fyzikální veličinu, jejíž složky komutují dle vztahu

$$[\hat{F}_i, \hat{F}_j] = iC\varepsilon_{ij}^{k} \hat{F}_k, \quad (5.1)$$

kde C je libovolná nenulová reálná konstanta.

Tyto komutační relace jsou ve fyzice velmi časté, dokonce natolik, že vyšetřování jejich vlastností je fundamentálním prvkem celé kvantové fyziky. Díky symetriím Levi-Civitova pseudotenzoru vidíme, že sčítání přes index k skutečně dává pouze poslední ze složek F_k pro $k \notin \{i, j\}$.

Tyto komutační relace skutečně splňují veličiny, které nazýváme momenty hybnosti. Prvně je to *orbitální moment* a poté *spin*, či jak říkáme správně orbitální moment hybnosti a spinový (vnitřní) moment hybnosti.

Orbitální moment značíme $\hat{\mathbf{L}}$ a spin $\hat{\mathbf{S}}$. Celkový moment potom $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$. Jedná se samozřejmě o vektorové operátory. Spin nemá v klasické fyzice analogii, orbitální moment ale v klasické fyzice známe, a tak se na něj pojdme podívat trochu blíže.

5.1 Orbitální moment

Orbitální moment hybnosti v klasické fyzice označujeme prostě jako moment hybnost \mathbf{L} , jedná se o vektor, který dostaneme vektorovým součinem

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}, \quad (5.2)$$

kde \mathbf{x} odpovídá poloze a \mathbf{p} hybnosti. Jelikož víme, že $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{x}}$ pro systémy, kde $\partial_t m = dm/dt = 0$, dostáváme složky momentu hybnosti

$$L^i = m(\mathbf{x} \times \dot{\mathbf{x}})^i. \quad (5.3)$$

Zvolíme-li nyní kartézské souřadnice, dostaneme

$$L^x = m(y\dot{z} - z\dot{y}) = yp^z - zp^y, \quad (5.4)$$

$$L^y = m(z\dot{x} - x\dot{z}) = zp^x - xp^z, \quad (5.5)$$

$$L^z = m(x\dot{y} - y\dot{x}) = xp^y - yp^x. \quad (5.6)$$

Můžeme dokázat komutační relace pro orbitální moment hybnosti a pro spin.

5.1.1 Souřadnicová reprezentace a vlastní stavy

Pokud bychom se nyní pohybovali v souřadnicové reprezentaci, dostaneme

$$L^x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y), \quad (5.7)$$

$$L^y = -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z), \quad (5.8)$$

$$L^z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x). \quad (5.9)$$

Je vhodné přepsat tyto vztahy ve sférických souřadnicích r, θ, ϕ , neboť ty vystihují moment hybnosti už v klasické fyzice daleko lépe. Speciálním případem je pak $dr = 0$, k čemuž se také dostaneme. Nejsnazší volnou je z -ová složka momentu hybnosti

$$\hat{L}^z = -i\hbar\partial_\phi, \quad (5.10)$$

kterou aplikujeme na vlnovou funkci $\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$ v souřadnicové reprezentaci. Velice snadno řešením diferenciální rovnice pro kvadraticky integrabilní funkci na intervalu $(0, 2\pi)$ lze nahlédnout tvar vlastních čísel \mathfrak{L}_n – tj. různých hodnot momentu hybnosti v z . směru:

$$-i\hbar\partial_\phi\psi_n(r, \theta, \phi) = \mathfrak{L}_n\psi_n(r, \theta, \phi), \quad (5.11)$$

$$\left[\partial_\phi - \frac{i}{\hbar}\mathfrak{L}_n \right] \psi_n = 0. \quad (5.12)$$

Za pomoci charakteristického polynomu rovnice $\lambda - i\mathfrak{L}_n/\hbar$ získáme jednoznačné řešení v podobě exponenciály

$$\psi_n = \mathcal{N} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathfrak{L}_n \phi\right), \quad (5.13)$$

kde \mathcal{N} je normalizační faktor nezávislý na ϕ . V exponenciále se objevuje Planckova konstanta \hbar , již je ale lepší odstranit, neboť z podmínky periodicity v azimutálním směru musí platit $\mathfrak{L}_n/\hbar \in \mathbb{Z}$. Lépe je vzít tedy celé číslo $m = \mathcal{L}_n/\hbar$ a toto označit za číslo zodpovědné za kvantování momentu hybnosti. Vlastní čísla z -ové části momentu hybnosti jsou poté $\mathcal{L}_m = m\hbar$.

Dále se podíváme na celkový kvadrát momentu hybnosti \hat{L}^2 a pokusíme se najít vlastní čísla tohoto operátoru. Ve sférických souřadnicích nejprve přejdeme

KAPITOLA 6

ROTACE, GRUPY A TENSOROVÉ OPERÁTORY

Rotace mají ve fyzice naprosto fundamentální význam, už v klasické mechanice jsme rozkládali pohyby do translačních a rotačních. Pokud jsme mluvili o momentu hybnosti $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ jako o měřitelné veličině na nějakém systému, vždy jsme jej mohli doplnit ještě o vnitřní moment hybnosti \mathbf{S} součtem $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Nyní se pojďme podívat na trochu obecnější vlastnosti pohybu částic. Jak si ukážeme [o několik kapitol později](#), existuje *Poincarého grupa*, které se též říká *nehomogenní Lorentzova grupa*, za jejíž pomoci lze zkoumat rotační, translační a Lorentzovské transformace prostoročasu. Nyní se podíváme trochu podrobněji na grupu rotací ve 3D prostoru a na její reprezentace.

Nejprve se ale podívejme na to, co vlastně grupy jsou.

Definice 6.1 (Grupa). Nechť je G libovolná množina a \circ je binární operace zvaná grupové násobení. Dvojici $\mathcal{G} = (G, \circ)$ nazveme grupou, právě když platí všechny následující výroky

1. G je uzavřená vůči \circ .
2. G je asociativní vůči \circ .
3. Ke každému prvku G existuje jednotkový prvek vzhledem k \circ .
4. Ke každému prvku G existuje inverzní prvek vzhledem k \circ .

Na každé množině G může existovat více různých grup. Např. pro množinu $G = \{\text{Všechny transformace prostoročasu}\}$ existuje grupa pro všechny translace a jiná grupa pro všechny rotace.

Pojďme se tedy podívat na to, jak vypadá obecná rotace $R(\phi)$. Bez ohledu na to, jaký prostor budeme rotovat, vždy víme, že existuje jednotkový prvek a to rotace o 0 radiánů – definujeme tedy jednotkový (též neutrální) prvek $e \equiv R(0)$. Pokud provedeme rotaci o úhel α , je inverzní rotace ta o úhel $-\alpha$. Proto ke každému prvku $R(\phi)$ existuje inverzní prvek $R(-\phi)$, že platí

$$R(\phi) \circ R(-\phi) = e, \quad (6.1)$$

odkud definujeme $R^{-1}(\phi) \equiv R(-\phi)$. Operace \circ zde má nutně význam skládání rotací. Není těžké ukázat, že platí asociativita i komutativita, pokud jsme stále u rotace okolo jediné osy. Grupa ale pozbývá komutativity ve chvíli, kdy připustíme skládání rotací okolo více os.

Doposud jsme se ale bavili jen o rotacích okolo jedné osy v nějaké vybrané ploše. Než přejdeme k obecným rotacím okolo osy zadané jejím směrovým vektorem \mathbf{n} o úhel α , připomeneme si z klasické fyziky Eulerovy úhly.

6.1 Eulerovy úhly v CM a QM

V klasické fyzice (CM) jsme se dozvěděli, že je výhodné popisovat obecnou rotaci v prostoru za pomoci evolučního vývoje tří úhlů, které vyjadřují rotaci, nutaci a precesi. V lehkém připomenutí jsme zvolili úhly ψ, θ, ϕ a provedli jsme v kartézském systému nejprve rotaci okolo osy z o úhel ϕ (precesní úhel). Tím dostaneme novou kartézskou soustavu souřadnic $[x', y', z']$, v níž provedeme rotaci okolo osy x' o úhel θ (nutační úhel). Finálně provedeme rotaci okolo osy z'' o úhel ψ (rotační úhel). Tím dostaneme libovolnou rotaci, přičemž můžeme odvodit Eulerovy kinematické rovnice

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} \sin \theta \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ \sin \theta \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ \cos \theta & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\phi} \\ \dot{\theta} \\ \dot{\psi} \end{pmatrix}, \quad (6.2)$$

kde $\mathbf{\Omega}$ je úhlová rychlost závislá na čase. Celkovou rotaci můžeme ale také zapsat pomocí zobrazení $R_{\text{osa}}(\text{úhel})$ ve tvaru

$$\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\phi, \theta, \psi) = R_{z''}(\phi) R_{x'}(\theta) R_z(\psi), \quad (6.3)$$

přičemž chápeme toto zobrazení jako rotaci působící na nějaký vektor (např. polohový pro fyzikální účely).

V kvantové mechanice (QM) je situace obdobná. Můžeme vyjít z Eulerových úhlů a zapsat rotaci coby operátor působící na Hilbertově prostoru

$$\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{n}}(\phi, \theta, \psi) = \hat{R}_{z''}(\phi) \hat{R}_{x'}(\theta) \hat{R}_z(\psi). \quad (6.4)$$

My už víme, že operátor rotace lze zapsat za pomoci obecného operátoru momentu hybnosti $\hat{\mathbf{J}}$ a to v následujícím tvaru

$$\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{n}}(\phi, \theta, \psi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \psi \hat{J}_{z''}} e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \hat{J}_{x'}} e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \hat{J}_z}, \quad (6.5)$$

přičemž jednotlivé složky momentu hybnosti spolu nekomutují. Jelikož je moment hybnosti hermiteovský operátor, jsou rotace unitární transformace v QM. každá z rotací operuje v jiné bázi prostoru. Ukazuje se, že existuje možnost, jak přejít k rotacím pouze okolo základních os $[x, y, z]$;

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{R}}_n(\phi, \theta, \psi) &= \hat{R}_{z''}(\phi) \hat{R}_{x'}(\theta) \hat{R}_z(\psi) = \hat{R}_{z''}(\phi) [\hat{R}_z(\psi) \hat{R}_x(\theta) \hat{R}_z(-\psi)] \hat{R}_z(\psi) = (6.6) \\ &= \underbrace{[\hat{R}_{x'}(\theta) \hat{R}_z(\psi) \hat{R}_z(\phi) \hat{R}_z(-\psi) \hat{R}_{x'}(-\theta)]}_{(\xi_1)} \underbrace{[\hat{R}_z(\psi) \hat{R}_x(\theta) \hat{R}_z(-\psi)] \hat{R}_z(\psi)}_{(\xi_2)} = \\ (\xi_1) &= \hat{R}_z(\psi) \hat{R}_x(\theta) \hat{R}_z(-\psi) \hat{R}_z(\psi) \hat{R}_z(\phi) \hat{R}_z(-\psi) \hat{R}_z(\psi) \hat{R}_x(-\theta) \hat{R}_z(-\psi), \\ (\xi_2) &= \hat{R}_z(\psi) \hat{R}_x(\theta),\end{aligned}$$

$$\boxed{\hat{\mathbf{R}}_n(\phi, \theta, \psi) = \hat{R}_z(\psi) \hat{R}_x(\theta) \hat{R}_z(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \psi \hat{J}_z} e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \hat{J}_x} e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \hat{J}_z}.} \quad (6.7)$$

Ukázali jsme tedy, že libovolná rotace lze převést na unitární operátor, který je generovaný pouze dvěma složkami momentu hybnosti v původní soustavě. Jsme tedy schopni libovolnou rotaci v prostoru popsat třemi parametry – ψ, θ, ϕ . Jednotlivé složky spolu nekomutují, avšak pořád splňují asociativitu. Stejně tak k rotaci (ψ, θ, ϕ) lze zkonstruovat rotaci $(-\psi, -\theta, -\phi)$, kterou nazveme inverzním prvkem. Samozřejmě existuje jednotkový prvek $(0, 0, 0)$. Tato tvrzení však nejsou úplným důkazem tvrzení následujícího, ponecháme jej tedy bez důkazu;

Teorém 6.1 (Grupa rotací). *Všechny možné rotace 3D prostoru tvoří třídimenzionální grupu vůči skládání $\mathcal{R} = (R, \cdot)$, které má charakter multiplikace.*

6.2 Reprezentace grupy rotací

Nejprve připomeňme, co je to reprezentace grupy;

Definice 6.2 (Homomorfismus). Homomorfismus je zobrazení $\phi : A \rightarrow B$ takové, že pro operaci f platí

$$\phi(f(x_1, \dots, x_n)) = f(\phi(x_1), \dots, \phi(x_n)). \quad (6.8)$$

Definice 6.3 (Automorfismus). Nechť je V vektorový prostor. Automorfismem \mathcal{A} nazveme zobrazení $\mathcal{A} : V \rightarrow V$, které je izomorfní. Množinu všech automorfismů na V značíme $\text{Aut}(V)$. Stejně značíme i grupu automorfismů na V společně s operací skládání zobrazení.

Definice 6.4 (Reprezentace grupy). Nechť je $\mathcal{G} = (G, \circ)$ grupa a nechť V je vektorový prostor. Reprezentaci grupy \mathcal{G} na prostoru V potom označíme homomorfismus $R : G \rightarrow \text{Aut}(V)$.

Co to pro nás znamená? Máme-li grupu rotací, potom její reprezentace na Eukleidovském prostoru v CM je zobrazení, které provede reálnou rotaci vektoru okolo nějaké osy o daný úhel. V QM je potom reprezentace grupy rotací operátor $\hat{\mathbf{R}}$, který jsme si zavedli v předešlé sekci;

$$\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{n}}(\phi, \theta, \psi) |\psi\rangle = |\psi'\rangle. \quad (6.9)$$

Jelikož je tento operátor unitární, mluvíme o *unitární reprezentaci* rotací na Hilbertově prostoru.

Reprezentace lze také chápat jako zobrazení do matic. Toho využijeme nyní a z operátoru $\hat{\mathbf{R}}$ uděláme jeho maticové vyjádření (maticovou *reprezentaci*) při vlastních stavech momentu hybnosti

$$\hat{\mathbf{R}}_{jj'mm'}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle j'm' | \hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{n}}(\alpha, \beta, \gamma) | jm \rangle = \delta_{jj'} D_{m',m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma), \quad (6.10)$$

přičemž zavádíme tímto implicitním vztahem tzv. D -matice.

Než budeme pokračovat dále, ukážeme si, jaký je vztah mezi D -maticemi a sférickými harmonikami (pouze skalárními) $Y_l^m(\theta, \phi)$. Pro kratší zápis budeme používat jednotkový vektor ve sférických souřadnicích \mathbf{n} , který nám přesně zadá θ, ϕ , tudíž $Y_l^m(\mathbf{n})$.

Sférické harmoniky

$$Y_l^m(\mathbf{n}) = \mathcal{N} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (6.11)$$

splňují tu vlastnost, že pokud chceme přejít k novým θ', ϕ' tj. \mathbf{n}' stačí nám pouze rotace v prostoru $\hat{\mathbf{R}} : \mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}'$;

$$Y_l^m(\mathbf{n}') = \hat{\mathbf{R}}^{-1} Y_l^m(\mathbf{n}) = \sum_{lm'} Y_l^{m'}(\mathbf{n}) D_{m'm}^{(l)*}. \quad (6.12)$$

Že toto platí je patrné z následující sekce při souřadnicové reprezentaci.

6.2.1 Ireducibilní reprezentace

Použijme nyní rotaci na obecnou bázi pro částici s momentem hybnosti \mathbf{J} . Matice rotací jsou reprezentace grupy rotací na Hilbertově prostoru, avšak taková reprezentace nemusí být (a není) ireducibilní. Připomeňme tedy, co to ireducibilní reprezentace znamená;

Definice 6.5 (Reducibilní reprezentace). Reprezentace $\mathcal{R} = (\mathcal{G}, V)$ je reducibilní, právě když existuje rozklad grupy \mathcal{G} do dvou podgrup $\mathcal{G}_{1/2}$ taková, že restrikce reprezentace \mathcal{R} působí na každé podgrupě nezávisle. Matice takové reprezentace je tedy blokově diagonální maticí.

Definice 6.6 (Ireducibilní reprezentace). Ireducibilní reprezentace je taková, která není reducibilní.

Je tedy jasné, že pro snadné počítání chceme hledat ireducibilní reprezentace a nikoliv ty reducibilní. Podívejme se tedy, jak zapůsobí operátor rotace na báze ket:

$$\hat{\mathbf{R}} |jm\rangle = \sum_{m'} |jm'\rangle D_{m'm}^{(j)}. \quad (6.13)$$

Každou rotaci lze tedy zapsat jako maticová násobení D -matice a příslušného báze ketu. To znamená, že D -matice působí na prostoru dimenze $2j + 1$ na rozdíl od operátoru rotace, který operuje v celém Hilbertově prostoru o dimenzi $2j_{max} + 1$. Pomocí Clebsch-Gordanových koeficientů můžeme tedy rozložit prostor do ireducibilních reprezentací (resp. do částí, na nichž již operují pouze ireducibilní reprezentace).

6.3 Tenzorové operátory

Abychom porozuměli struktuře tenzorových operátorů na kvantovém konfiguračním prostoru, musíme začínat postupně od skalárů a vektorů. Již jsme si zadefinovali grupu rotací na vektorovém prostoru V , u něhož předpokládáme v CM charakter Eukleidovského prostoru a v QM Hilbertova prostoru. Libovolný ket tedy můžeme rotovat za pomoci nějaké reprezentace. Ukázali jsme si, že máme unitární reprezentaci, a tak odteď budeme značit operátor rotace $\hat{U}(R)$ pro nějakou rotaci R z námi zkonstruované grupy;

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = \hat{U}(R) |\psi\rangle. \quad (6.14)$$

Jelikož se jedná o unitární operátory, které jsou zprostředkovateli rotací na Hilbertově prostoru, platí pro ně $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$, odkud vidíme, že

$$\langle\psi'|\hat{A}'|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \quad (6.15)$$

pro libovolný operátor \hat{A} , který se samozřejmě transformuje dle pravidla

$$\hat{A} \longrightarrow \hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger. \quad (6.16)$$

6.3.1 Skalární operátory

Skaláry jsou pod transformací invariantní, což plyne ze samotné podstaty skalárních veličin. Pokud máme např. energii E , potom při rotaci se tato energie nesmí

změnit (tím máme na mysli pootočení systému, nikoliv přidání rotačního pohybu). Proto tedy pro skalární operátor \hat{S} musí platit

$$\hat{U}\hat{S}\hat{U}^\dagger = \hat{S}, \quad (6.17)$$

odkud vychází formálnější vlastnost

$$[\hat{U}, \hat{S}] = 0. \quad (6.18)$$

Pokud komutuje skalární operátor s unitárním operátorem reprezentujícím rotaci, komutuje také s generátory grupy \hat{J}_i , tj. $[\hat{J}_i, \hat{S}] = 0$, což vidíme při infinitesimální rotaci

$$0 = [\hat{U}, \hat{S}] = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_i\right)\hat{S} - \hat{S}\left(1 - \frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_i\right) = \frac{i}{\hbar}\alpha[\hat{J}_i, \hat{S}] \quad (6.19)$$

Typickým příkladem skalárního operátoru je Hamiltonián pro uzavřený systém, tj. takový, v němž veškerá pole interakčního charakteru jsou generována jednotlivými podsystémy. Příkladem může být Hamiltonián atomu vodíku

$$H = \frac{\mathbf{p}_n^2}{2m_n} + \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e}, \quad (6.20)$$

kde veličiny \cdot_n odpovídají jádru a \cdot_e elektronu. Potom Hamiltonián komutuje s momentem hybnosti. To tedy znamená, že Hamiltonián je skalární operátor, co ale víc, že moment hybnosti se zachovává, neboť

$$\frac{d}{dt}\hat{A} = \mathcal{C}[\hat{A}, \hat{H}] = 0. \quad (6.21)$$

Odtud tedy vidíme obecnou vlastnost, která nám říká, že skalární operátory vždy komutují s Hamiltoniánem, tedy se zachovávají, neboť komutují s momentem hybnosti, který generuje rotaci. Skalární operátory jsou tedy invarianty pod rotací, což byl náš prvotní předpoklad.

6.3.2 Vektorové operátory

Analogicky ke CM zavádíme i vektorové operátory. Jako obecný vektorový operátor si zavedeme operátor $\hat{\mathbf{V}}$, který má více složek \hat{V}_i . V klasické fyzice jsou vektory takové sady čísel, pro něž platí transformační vztah

$$V^i(y) = \frac{\partial y^i}{\partial x^j} V^j(x), \quad (6.22)$$

tj. Jacobiho transformační vztah. Jacobiho matice je matice přechodu od báze $\{\mathbf{x}\}$ do báze $\{\mathbf{y}\}$, označíme ji proto R^i_j . Ve speciální relativitě např. je tato matice přechodu maticí Lorentzovy transformace Λ^μ_ν . Nyní se ale omezíme na 3D prostor.

Budeme důsledně značit indexy souřadnic vektorů nahoře a forem dole, abychom elegantně využili Einsteinovy sčítací konvence. Pro znalejšího autora lze problém nahlížet pomocí abstraktních indexů.

Rotace ketu zůstává stále stejná, rotace operátoru se však již trochu změní. Požadujeme, aby platilo

$$\langle \psi' | \hat{V}^i | \psi' \rangle = R_j^i \langle \psi | \hat{V}^j | \psi \rangle, \quad (6.23)$$

neboť střední hodnota i . složky vektoru musí mít vlastnosti transformace vektoru. Toto pravidlo souvisí s tím, že v kvantové mechanice je R_j^i konstanta, kterou lze vytknout před střední hodnotu a platí, že rotaci opět napíšeme pomocí unitárních operátorů

$$\hat{U} \hat{V}^i \hat{U}^\dagger = R_j^i V^j, \quad (6.24)$$

tj. zapsáno v maticovém formalismu

$$\hat{U} \hat{\mathbf{V}} \hat{U}^\dagger = \mathbf{R}^{-1} \hat{\mathbf{V}}. \quad (6.25)$$

Opět uvažujme, že pokud taková transformace platí pro libovolnou rotaci, musí platit i pro infinitezimální rotaci

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right) \hat{\mathbf{V}} \left(1 + \frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right) = \hat{\mathbf{V}} - \frac{i}{\hbar} \alpha [\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{V}}] + \frac{1}{\hbar^2} (\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}) \hat{\mathbf{V}} (\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}). \quad (6.26)$$

KAPITOLA 7

ČASOVÁ EVOLUCE V INTERAKČNÍM OBRAZE

Časový vývoj lze po vzoru kapitoly ?? provádět za pomoci několika obrazů, které přísluší velkým fyzikům 20. století. Přehledně ukazuje Schrödingerův a Heisenbergův přístup tabulka

V této kapitole bude ale probírán tzv. **Diracův interakční obraz**, který slouží pro zkoumání systémů, jejichž Hamiltonián se dá zapsat ve tvaru

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \quad (7.1)$$

kde \hat{H}_0 má známé řešení $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$. V tomto obraze se vyvíjí jak stav systému, tak operátor popisující danou veličinu. Transformace mají pak následující tvary

$$|\psi(t)\rangle_I = \exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_0\right) \overbrace{\exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right)}^{|\psi(t)\rangle_S} |\psi_0\rangle, \quad (7.2)$$

$$\hat{A}_I(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_0\right) \hat{A}_I(t_0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_0\right). \quad (7.3)$$

Tabulka 7.1: Schrödingerův a Heisenbergův obraz kvantového unitárního vývoje bez kolapsů vlnových funkcí.

Schrödinger	$ \psi(t)\rangle_S = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \psi\rangle$	$\hat{H} \psi(t)\rangle_S = i\hbar\partial_t \psi(t)\rangle_S$
Heisenberg	$\hat{A}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \hat{A}_0 \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right)$	

Evoluční rovnice v Diracově obraze pro stav systému má pak tvar

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle_I &= i\hbar\partial_t \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_0\right) |\psi(t)\rangle_S \right] = \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_0\right) \hat{V}(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_0\right) |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \end{aligned} \quad (7.4)$$

a časový vývoj operátoru lze popsat Heisenbergovým vývojem

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_I(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_I, \hat{H}_0]. \quad (7.5)$$

Projekce evoluční stavové rovnice při zavedení $V_{nm} = \langle n|\hat{V}(t)|m\rangle$ formou $\langle n|$ získává tvar

$$i\hbar \sum_m \underbrace{\langle n|m\rangle}_{\delta_{mn}} \frac{d}{dt}c_m(t) = \sum_m c_m(t) \langle n| \exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_0\right) \hat{V}(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_0\right) |m\rangle, \quad (7.6)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}c_n(t) = \sum_m c_m(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}t(E_n - E_m)\right) \langle n|\hat{V}(t)|m\rangle, \quad (7.7)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}c_n(t) = \sum_m V_{nm}c_m(t)e^{i\omega_{nm}t}. \quad (7.8)$$

kde byla uvažována obecná evoluce

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle. \quad (7.9)$$

Dohromady tedy z aplikace evolučního vývoje na Diracův interakční obraz plyne, že přesné koeficienty evoluce $c_n(t)$ splní rovnici

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt}c_n(t) = \sum_m V_{nm}c_m(t)e^{i\omega_{nm}t}.} \quad (7.10)$$

Řešení této soustavy ovšem není příliš často možné. Analytických řešení existuje pouze minimum, a proto se přechází k numerickým metodám, které určí, jak vypadá správný průběh.

7.1 Dvoustavový systém - přesné analytické řešení

Jedním z mála přesných řešení je dvoustavový systém podléhající harmonické poruše. Harmonickou poruchou máme na mysli tvar potenciálu ve tvaru

$$\hat{V}(t) = \gamma e^{i\omega t} |1\rangle \langle 2| + \gamma e^{-i\omega t} |2\rangle \langle 1|, \quad (7.11)$$

samozřejmě základní Hamiltonián má tvar $\hat{H}_0 = E_1 |1\rangle \langle 1| + E_2 |2\rangle \langle 2|$. Dosazením do rovnic (7.10) vyjde série rovnic

$$\dot{c}_1(t) = -\frac{i}{\hbar} \gamma e^{i\bar{\omega}t} c_2(t), \quad (7.12)$$

$$\dot{c}_2(t) = -\frac{i}{\hbar} \gamma e^{-i\bar{\omega}t} c_1(t), \quad (7.13)$$

kde $\bar{\omega} = \omega - \omega_{21}$. Rovnice se dají řešit analyticky, to je možno nechat na čtenáři, po vložení do počítače je však člověk mnohdy chytřejší. Řešením takové série rovnic jsou poté funkce

$$c_1(t) = \cos \left[\frac{\gamma}{\bar{\omega}} (1 - e^{-i\bar{\omega}t}) \right], \quad (7.14)$$

$$c_2(t) = \sinh \left[\frac{\gamma}{i\bar{\omega}} (1 - e^{-i\bar{\omega}t}) \right], \quad (7.15)$$

přičemž bylo třeba zadat okrajovou podmínku, že na počátku se systém nacházel ve stavu $|1\rangle$, tj. $c_1(t = t_0) = 1$ a $c_2(t = t_0) = 0$. Jelikož se systém na začátku nacházel ve stavu $|1\rangle$, lze po určitém čase spočítat pravděpodobnost jeho přechodu do stavu $|2\rangle$ coby $|c_2(t)|^2$;

$$|c_2(t)|^2 = \left| \sin \left[\frac{\gamma}{\bar{\omega}} (1 - e^{i\bar{\omega}t}) \right] \right|^2 \stackrel{*}{=} \frac{\frac{\gamma^2}{\hbar^2}}{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{\bar{\omega}^2}{4}} \sin^2 \left[t \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{\bar{\omega}^2}{4}} \right], \quad (7.16)$$

kde rovnost $\stackrel{*}{=}$ definuje tzv. **Rabiho formuli**, k níž lze dojít za pomoci vyřešení rovnic mechanickou cestou skrze hledání charakteristického polynomu. Časový vývoj je unitární, a tak musí samozřejmě platit $|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1$, co navíc, ukazuje se, že $|c_2(t)|^2 < 1$ pro každé t , tj. přeskok stavu do systému $|2\rangle$ nemá nikdy stoprocentní jistotu na úspěch.

Aplikace na fyzikální systém Odvozený formalismus pro dva stavy je důležitý i z toho důvodu, že s ním lze popsat stav částice v magnetickém poli. Nechť je onou částicí elektronem se spinem $s = 1/2$ a magnetické pole má tvar v kartézských souřadnicích $\mathbf{B} = (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, B_0)^T$. Pro elektron s magnetickým momentem $\boldsymbol{\mu}$ je poté Hamiltonián

$$\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} = \frac{\hbar e}{2m_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (7.17)$$

kde $\sigma_x = (|+\rangle \langle -| + |- \rangle \langle +|)$, $\sigma_y = i(|-\rangle \langle +| - |+\rangle \langle -|)$, $\sigma_z = (|+\rangle \langle +| - |- \rangle \langle -|)$. Dohromady tedy

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar e}{2m_e} B_0 [|+\rangle \langle +| + |- \rangle \langle -|], \quad (7.18)$$

$$\hat{V}(t) = \frac{\hbar e}{2m_e} B_1 [|+\rangle \langle -| e^{-i\omega t} + |- \rangle \langle +| e^{i\omega t}]. \quad (7.19)$$

7.2 Časově závislá poruchová teorie

Každé funkci lze přiřadit rozvoj v závislosti na tom, jak moc daná část přispívá k celkové hodnotě funkce. Konkrétně

$$c_n(t) = \sum_m \lambda^m c_m^{(n)}(t). \quad (7.20)$$

Pro matematickou korektnost nyní transformujeme $V(t) \rightarrow \lambda V(t)$ a nadále budeme používat λ coby koeficient vyjadřující řád problému. Vraťme se k evoluční interakční rovnici a pokusme se ji vyřešit dle následujícího postupu

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle = \lambda \hat{V}_I(t) \hat{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle, \quad (7.21)$$

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \lambda \int_0^t \hat{V}_I(t) \hat{U}(t, t_0) dt. \quad (7.22)$$

Identita se v rovnici objevila díky počáteční podmínce $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}$. Rovnici lze řešit iteračně a řešení se pak nazývá **Dysonova řada** nebo též Dysonův rozvoj

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{I} + \sum_N \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^N \int_{t_0}^{t_1} \cdots \int_{t_0}^{t_N} d^N t \lambda^N \hat{V}_I(t_1) \cdots \hat{V}_I(t_N). \quad (7.23)$$

Dysonovu řadu lze využít pro zjištění koeficientů $c_n(t)$, konkrétně pomocí identifikace $c_n(t)$ v rozvoji původního stavu $|i\rangle$

$$\hat{U}(t, t_0) |i\rangle = \sum_n \underbrace{\langle n | \hat{U}(t, t_0) | i \rangle}_{c_n(t)} |n\rangle. \quad (7.24)$$

Dosazením Dysonovy řady do $c_n(t) = \langle n | \hat{U}(t, t_0) | i \rangle$ lze získat řádová porovnání pro jednotlivé řády λ . V poruchové teorii budeme pokládat $\lambda^3 \approx 0$ vždy. Na konci této kapitoly se však zmíní korekce druhého řádu, kdy $\lambda^2 \not\approx 0$, pro teď tak však budeme uvažovat. Poruchová teorie tedy dává

$$c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}, \quad (7.25)$$

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt e^{i\omega_{ni}t} V_{ni}, \quad (7.26)$$

$$c_n^{(2+)}(t) \approx 0. \quad (7.27)$$

Celou dobu byla ale λ pouze náš pomocník pro určení řádů, proto nyní lze položit $\lambda = 1$. Matematicky je tedy špatné psát, že $\lambda^2 \approx 0$, správněji člen rozvoje $c_n^{(2+)} \approx 0$, λ jsme pak použili, abychom přišli na to, jak vypadají jednotlivé řády.

7.2.1 Skoková porucha

V této podsekcí se podíváme na to, jaké výsledky dostaneme z tvaru potenciálu $\hat{V}(t) = \Theta(t)\hat{V}$, kde $\Theta(t)$ je Heavisideova skoková funkce. Dysonův rozvoj koeficientů $c_n(t)$ říká pro libovolné $t_0 \leq 0$

$$c_n^{(0)} = \delta_{ni}, \quad (7.28)$$

$$\begin{aligned} c_n^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt e^{i\omega_{ni}t} V_{ni} = \frac{V_{ni}}{E_n - E_i} (1 - e^{i\omega_{ni}t}) = \\ &= -2i \frac{V_{ni}}{E_n - E_i} e^{\frac{i\omega_{ni}}{2}t} \sin\left(\frac{\omega_{ni}}{2}t\right) \end{aligned} \quad (7.29)$$

a odtud plyne

$$|c_n^{(1)}|^2 = \left| -i \frac{2V_{ni}}{E_n - E_i} e^{if(t)} \sin\left(\frac{E_n - E_i}{2\hbar}t\right) \right|^2 = \quad (7.30)$$

$$= \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2\left(\frac{E_n - E_i}{2\hbar}t\right). \quad (7.31)$$

Pro malé časy $t\omega_{ni} \ll 1$ je $\sin x \sim x$, a potom

$$|c_n^{(1)}|^2 \approx 2 \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} t^2 \sim t^2. \quad (7.32)$$

Velké časy $t\omega_{ni} \gg 1$ ovšem znamenají jisté Diracovské přiblížení. V limitě $\xi \gg 1$ platí $\frac{\sin^2 L\xi}{L\xi^2} \approx \pi\delta(\xi)$. Zde tedy ((DODĚLAT, TĚŽKO ŘÍCT, JAK TO S TÍM DIRACEM TEĎ JE))

$$|c_n^{(1)}|^2 \approx \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 t \delta(E_n - E_i) \sim \delta(E_n - E_i). \quad (7.33)$$

Přejdeme nyní do spojité části spektra. Funkce $p_{ni} = |c_n^{(1)}|^2$, která byla definována coby pravděpodobnost nalezení systému ve stavu n , pokud na začátku byl systém ve stavu $m \neq i$. Přejchod mezi diskrétními hladinami E_n a E_i odpovídá $\delta(E_n - E_i)$, což odpovídá zákonu zachování energie při relaxacích systému.

Spojité spektrum charakterizované hodnotou E definuje funkci $p(n)$, která je distribuční funkcí, pro níž platí

$$p(n)dn = \frac{dn}{dE} p(E)dE, \quad \rho(E) = \frac{dn}{dE}, \quad (7.34)$$

kde $\rho(E)$ je obecně Jacobiho matice přechodu, fyzikálně se jedná o energetickou distribuci napříč stavy, tj. energetickou hustotu stavů. Nalezení systému v intervalu stavů $|n_1\rangle$ až $|n_2\rangle$ je poté dána coby

$$P(n_1, n_2) = \int_{n_1}^{n_2} p(n)dn. \quad (7.35)$$

KAPITOLA 8

SYSTÉMY MNOHA NEROZLIŠITELNÝCH ČÁSTIC

Často se ve fyzice setkáváme s mnoha částicemi. Už z klasické fyziky víme, že pokud se na svět díváme očima statistických fyziků, vidíme všude mnoho částic, které nedokážeme rozlišit, protože kvalitativně má každá stejné vlastnosti, pouze dohromady tvoří celek, jehož popis chápeme jako jakousi termodynamickou limitu.

Zde se nebudeme zabývat kvantovou statistickou fyzikou, k tomu se dostaneme až v následující kapitole. Už ale systém o dvou částicích se stává v kvantové mechanice zajímavým objektem ke studiu. V této kapitole se postupně podíváme na systémy dvou částic a N částic, které jsou kvalitativně nerozlišitelné — např. dva elektrony nemůžu efektivně nijak rozlišit. V klasické fyzice bychom je mohli rozlišit polohou a na jeden z nich si napsat 1 a na druhý 2. Problém ovšem nastává v tom, že pokud bychom prohodili elektron 2 a 1, dostali bychom naprosto stejnou situaci a prohozením elektronů z pohledu klasické fyziky ve skutečnosti nijak nezměnili situaci. Už to je motivace, proč tvrdit, že dvě kvalitativně stejné částice, nelze považovat za rozlišitelné. Pokud bychom měli proton a elektron, už by se jednalo o částice rozlišitelné.

8.1 Problém dvou částic a jejich nerozlišitelnosti

V kvantové mechanice přiřadíme dvěma částicím obecně Hilbertův prostor \mathcal{H} , který spojíme jako $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, kde \mathcal{H}_i je Hilbertův prostor odpovídající částici i (A nebo B).

Dobrý kvalitativní postup, kterým rozlišit, zda se jedná o nerozlišitelné částice, je proměření všech na systému měřitelných veličin, výměna částic a opětovné proměření. Pokud si budou všechny tyto veličiny rovny, je jasné, že není možné částice od sebe rozeznat, a proto musí být nerozlišitelné. Pokud jsou nerozlišitelné, říkáme, že systém má tzv. *výměnnou symetrii*.

Pokud je částice A ve stavu $|A\rangle$ a částice B ve stavu $|B\rangle$, je celkový stav systému

$$|AB\rangle = |A\rangle |B\rangle. \quad (8.1)$$

Definice 8.1 (Permutační operátor). Permutační či též výměnný operátor $\hat{\mathcal{P}}$ definujeme předpisem

$$\hat{\mathcal{P}} |A\rangle |B\rangle = e^{i\phi} |B\rangle |A\rangle, \quad (8.2)$$

kde ϕ je libovolná fáze a operátor $\hat{\mathcal{P}}$ lze taktéž zapsat jako $\hat{\mathcal{P}}_{A\leftrightarrow B}$.

Význam fáze ϕ si ukážeme později. Nyní se zaměříme na to, že částice budou nerozlišitelné, právě když střední hodnota libovolné měřitelné fyzikální veličiny bude stejná i po prohozu, tj.

$$\langle O \rangle_{AB} = \langle AB | \hat{O} | AB \rangle = \langle BA | \hat{O} | BA \rangle = \langle O \rangle_{BA}. \quad (8.3)$$

To bude samozřejmě platit pouze tehdy, když $|A\rangle |B\rangle$ bude vlastní stav výměnného operátoru a číslo $e^{i\phi}$ bude vlastní číslo operátoru. Určeme tedy tato vlastní čísla před definicí nerozlišitelnosti částic. Víme, že pokud použijeme operátor permutace dvakrát, dostaneme

$$\hat{\mathcal{P}}^2 |A\rangle |B\rangle = |A\rangle |B\rangle, \quad (8.4)$$

odkud plyne velice jednoznačně, že $\phi \in \{0, \pi\}$, a tudíž vlastní čísla jsou ± 1 .

Definice 8.2 (Nerozlišitelnost částic). Řekneme, že systém podléhá výměnné symetrii, právě když platí

$$\hat{\mathcal{P}}_{A\leftrightarrow B} |A\rangle |B\rangle = \hat{\mathcal{P}} |A\rangle |B\rangle = \pm |A\rangle |B\rangle, \quad (8.5)$$

a částice A, B jsou tudíž nerozlišitelné bez ohledu na znaménko.

Definovali jsme tedy, kdy jsou částice A, B nerozlišitelné a podložili jsme si to výpočtem vlastních čísel operátoru permutace. Co to znamená pro náš Hilbertův prostor? Jednoduše to, že $\mathcal{H}_A \equiv \mathcal{H}_B \equiv \mathcal{H}^{(1)}$ je Hilbertův prostor pro jednu částici a tenzorově poté $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(1)}$.

Pokud platí při nerozlišitelných částicích, že se zachová střední hodnota libovolné veličiny, musí nutně platit, že se nezmění Hamiltonián při transformaci $\hat{\mathcal{P}} \hat{H} \hat{\mathcal{P}}^{-1} = \hat{H}$, tedy platí komutační relace

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{H}] = 0, \quad (8.6)$$

odkud také ihned zjistíme, že tvar Hamiltoniánu pro nerozlišitelné částice musí mít tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_A^2 + \hat{\mathbf{p}}_B^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{x}_A) + \hat{V}(\mathbf{x}_B) + \hat{U}(\|\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_B\|), \quad (8.7)$$

kde V má význam vnějšího potenciálového pole a U vnitřního.

8.1.1 Dva elektrony v elektrickém poli

Předpokládejme, že Hamiltonián komutuje s operátorem celkového spinu $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$. Separované vlastní stavy Hamiltoniánu mají tvar $|\phi, \kappa\rangle = |\phi\rangle |\kappa\rangle$, kde $|\phi\rangle$ značí prostorovou část a $|\kappa\rangle$ spinovou, přičemž $|\kappa\rangle$ lze najít coby vlastní stav \hat{S}^2 nebo vlastní stav \hat{S}_z .

Dimenze prostoru, kde $S = 0$ je 1 a její vlastní stav je

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle], \quad (8.8)$$

oproti tomu dimenze pro $S = 1$ je $(2S + 1) = 3$ a báze vektory

$$|++\rangle, \quad |--\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle]. \quad (8.9)$$

Permutační operátor faktorizujeme $\hat{\mathcal{P}}_{1\leftrightarrow 2} = \hat{\mathcal{P}}_{1\leftrightarrow 2}^{(x)} \hat{\mathcal{P}}_{1\leftrightarrow 2}^{(S)}$

8.2 Nerozlišitelnost více částic

Pro dvě částice existuje jednoduchý popis, neboť permutační operátor komutuje s Hamiltoniánem, jehož tvar je výměně/permutačně symetrický. Stejně jako u rotací ovšem platí, že výměny částic mezi sebou nekomutují. Nejsnadněji lze toto nahlédnout na problému tří částic

$$\hat{\mathcal{P}}_{1\leftrightarrow 2} \hat{\mathcal{P}}_{1\leftrightarrow 3} |ABC\rangle = \hat{\mathcal{P}}_{1\leftrightarrow 2} |CBA\rangle = |BCA\rangle, \quad (8.10)$$

$$\hat{\mathcal{P}}_{1\leftrightarrow 3} \hat{\mathcal{P}}_{1\leftrightarrow 2} |ABC\rangle = \hat{\mathcal{P}}_{1\leftrightarrow 3} |BAC\rangle = |CAB\rangle. \quad (8.11)$$

přičemž značení $|ABC\rangle = |A\rangle |B\rangle |C\rangle$ je zde použito pro zjednodušení zápisu stejně jako budeme uvažovat i ve zbytku tohoto textu.

Není překvapení, že lze Hilbertův prostor rozsekat na podprostory. Každý Hilbertův prostor má svou bázi, již lze transformovat do nové, lepší báze za pomoci unitárních operátorů $|i'\rangle = \hat{U}_{i\rightarrow i'} |i\rangle$ pro každé i , kde $|i\rangle$ tvoří bázi prostoru. Původní báze prostoru má faktorizovaný tvar

$$\{|ABC\rangle, |ACB\rangle, |BAC\rangle, |BCA\rangle, |CAB\rangle, |CBA\rangle\} \quad (8.12)$$

a lze ji převést na bázi obsahující

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} [|ABC\rangle + |CAB\rangle + |BCA\rangle + |CBA\rangle + |ACB\rangle + |BAC\rangle], \quad (8.13)$$

$$|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} [|ABC\rangle + |CAB\rangle + |BCA\rangle - |CBA\rangle - |ACB\rangle - |BAC\rangle] \quad (8.14)$$

a další čtyři nezajímavé vektory. Kety $|S\rangle, |A\rangle$ podléhají určité (anti)symetrii, díky níž lze z experimentálních pozorování kvantovou mechaniku obohatit o tzv. symetrizační postulát, k němuž celá teorie permutací částic směřuje.

Ket $|S\rangle$ se nazývá totálně symetrickým. Důvod lze ukázat použitím výměnných operátorů

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}_{1\leftrightarrow 2} |S\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} [|BAC\rangle + |ACB\rangle + |CBA\rangle + |BCA\rangle + |CAB\rangle + |ABC\rangle] = |S\rangle, \\ \hat{\mathcal{P}}_{1\leftrightarrow 3} |S\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} [|CBA\rangle + |BAC\rangle + |ABC\rangle + |ACB\rangle + |BCA\rangle + |CAB\rangle] = |S\rangle, \\ \hat{\mathcal{P}}_{2\leftrightarrow 3} |S\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} [|ACB\rangle + |CBA\rangle + |BAC\rangle + |CAB\rangle + |ABC\rangle + |BCA\rangle] = |S\rangle. \end{aligned}$$

Stejně tak ket $|A\rangle$ splní $\hat{\mathcal{P}}_{i\leftrightarrow j} |A\rangle = -|A\rangle$ pro libovolné i, j , a proto je nazýváme totálně antisymetrickým bázevým vektorem.

Hilbertův prostor \mathcal{H} lze tedy rozložit na šest různých částí, z nichž jedna je totálně symetrická a jedna totálně antisymetrická. Tak lze provést pro obecně N částic.

Fakt, že všech N částic je nerozlišitelných, popisuje opět měření veličin a to tak, že pro každé i, j musí být splněno

$$\langle \psi | \hat{\mathcal{P}}_{i\leftrightarrow j} \hat{O} \hat{\mathcal{P}}_{i\leftrightarrow j}^{-1} | \psi \rangle = \langle O \rangle_\psi, \quad (8.15)$$

a tedy každý operátor včetně Hamiltoniánu musí komutovat s libovolným permutačním operátorem, mají-li být všechny částice nerozlišitelné. Finálně lze formulovat symetrizační postulát, který plyne z experimentálního pozorování mnoha částic;

Symetrizační postulát QM

V přírodě nastává pouze jedna z následujících možností:

1. Částice má celočíselný spin a její mnohočásticové stavy jsou totálně symetrické. Takové částice poté nazýváme Bosony.
2. Částice má poločíselný spin a její mnohočásticové stavy jsou totálně antisymetrické. Tato třída částic se nazývá Fermiony.

Nyní je již jasné rozumět tomu, proč nás nezajímaly další čtyři kety tvořící bázi \mathcal{H} . Statistická fyzika, která popisuje Bosony, pracuje s Bose–Einsteinovou pravděpodobnostní distribucí. Fermiony lze pak popisovat pomocí Fermi–Diracova rozdělení.

Na jeden odstavec se nyní sluší zmínit vlastnost fermionů plynoucí přímo z postulátu. Pokud má platit symetrizační postulát, potom pro dva různé fermiony platí $|AB\rangle = 2^{-1/2}(|A\rangle|B\rangle - |B\rangle|A\rangle)$. Amplituda pravděpodobnosti nalezení stavu $|AB\rangle$ ve stavu $|AB\rangle$ je proto

$$\langle AB|AB\rangle = \frac{1}{2}[(\langle B|\langle A| - \langle A|\langle B|)(|A\rangle|B\rangle - |B\rangle|A\rangle)] = \quad (8.16)$$

$$= \frac{1}{2}[2 - \langle B|\langle A|B\rangle|A\rangle - \langle A|\langle B|A\rangle|B\rangle] = \quad (8.17)$$

$$= 1 - \langle A|B\rangle\langle B|A\rangle = 1 - p_A(B) = 1, \quad (8.18)$$

odkud jasné plyne, že $\langle A|B\rangle = \langle B|A\rangle = 0$, tedy dva různé fermiony nesmí být ve stejném stavu. Důkaz by šel provést i pro obecně N částic. Zároveň lze říci, že pokud by $|A\rangle = |B\rangle$, potom by $|AB\rangle = |BA\rangle = 0$, což je samozřejmě hloupost.

Pauliho vylučovací princip

Je-li zadaný systém obsahující N fermionů a M bosonů, potom žádné dva fermiony nejsou ve stejném stavu bez ohledu na celkový počet fermionů či bosonů.

Symetrizační postulát nám říká, že $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_A$ je správný prostor pro popis systému, nikoliv náš původní prostor, který byl tvořený bází, v níž se objevily navíc ještě další čtyři prvky. To samozřejmě platí pouze pro nerozlišitelné částice. Na podprostory $\mathcal{H}_S, \mathcal{H}_A$ lze vytvořit projektory za pomoci permutací

$$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \hat{P}_{\sigma}, \quad (8.19)$$

$$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} (-1)^{|\sigma|} \hat{P}_{\sigma}, \quad (8.20)$$

kde pro bosony/fermiony platí $\hat{P}_{\sigma} = \pm 1$ pro liché a $\hat{P}_{\sigma} = 1$ pro sudé permutace σ , přičemž $|\sigma|$ je stupeň permutace a $(-1)^{|\sigma|}$ je znaménko permutace, taktéž v literatuře značené jako $\text{sign } \sigma$.

Hodilo by se zde dokázat, že \hat{S}, \hat{A} jsou skutečně projektory - hermiteovské a $S^2 = S, A^2 = A$

Příkladem projekce je např. již zmíněný systém tří částic;

$$\hat{S}|ABC\rangle = \frac{1}{6} [|ABC\rangle + |ACB\rangle + \dots \text{jak už jsme viděli}] \quad (8.21)$$

8.3 Nový přístup a Fockův prostor

Vezměme si nyní N bosonů resp. fermionů. Společný prostor, na němž budeme popisovat těchto N částic bude *Fockův prostor*

$$\mathcal{H}_F = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_S^{(n)} \quad \text{resp.} \quad \mathcal{H}_F = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_A^{(n)}, \quad (8.22)$$

přičemž $\mathcal{H}_S^{(N)}$ resp. $\mathcal{H}_A^{(N)}$ odpovídá prostoru s N bosony resp. N fermiony. Popis pomocí Fockova prostoru popíšeme zvlášť pro bosony a zvlášť pro fermiony.

Bázi prostoru $\mathcal{H}_i^{(N)}$ zavedeme coby množinu totálně (anti)symetrických vektorů $|N_1, N_2, \dots\rangle$, kde N_i vyjadřuje počet částic ve stavu $|i\rangle$, kde samozřejmě platí $N_1 + N_2 + \dots = N$.

8.3.1 Bosony

Při popisu nerozlišitelných částic se využívá jejich vytváření a destrukce. Struktura Fockova prostoru nám říká, že vytvoření částice v nějakém stavu je jen zobrazení Fockova prostoru sama na sebe, vnitřně potom $\mathcal{H}^{(N)} \rightarrow \mathcal{H}^{(N+1)}$ a stejně tak destrukce částice je zobrazení $\mathcal{H}^{(N)} \rightarrow \mathcal{H}^{(N-1)}$. Pro bosony se zavádí konkrétně

$$\hat{a}_m^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_m, \dots\rangle = \sqrt{N_m + 1} |N_1, N_2, \dots, N_m + 1, \dots\rangle, \quad (8.23)$$

$$\hat{a}_m |N_1, N_2, \dots, N_m, \dots\rangle = \sqrt{N_m} |N_1, N_2, \dots, N_m - 1, \dots\rangle \quad (8.24)$$

a pokud je $\hat{a}_m |N_1, N_2, \dots, 1_m, \dots\rangle = \hat{a}_m |N_1, N_2, \dots, 0_m, \dots\rangle = |0\rangle$, kde $|0\rangle$ je báze prostoru, který neobsahuje žádné částice — vakua. Jednoduše se lze přesvědčit o tom, že kreační a anihilační operátor jsou svázané hermiteovským přechodem;

$$\langle N_1, N_2, \dots | \hat{a}_m^\dagger | M_1, M_2, \dots \rangle = \langle M_1, M_2, \dots | \hat{a}_m | N_1, N_2, \dots \rangle^*. \quad (8.25)$$

Jelikož každý kreační operátor vytvoří částici ve stavu $|i\rangle$, můžeme jednoduše zapsat

$$|N_1, N_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1! N_2! \dots}} (\hat{a}_1^\dagger)^{N_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{N_2} \dots |0\rangle, \quad (8.26)$$

kde mimo jiné využíváme komutativity pro bezproblémovou interpretaci

$$[\hat{a}_m^\dagger, \hat{a}_n^\dagger] = 0. \quad (8.27)$$

Stejná komutační relace samozřejmě platí i pro anihilační operátory $[\hat{a}_m, \hat{a}_n] = 0$ a navíc platí

$$[\hat{a}_m^\dagger, \hat{a}_n] = \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n - \hat{a}_n \hat{a}_m^\dagger = [(N_m + 1) - N_m] \delta_{mn} = \delta_{mn}. \quad (8.28)$$

V posledním komutátoru je vidět, že má smysl řešit komutace pouze při rovnosti $m = n$. Naším dalším cílem je definovat operátor počtu částic, tj. takový vektor, jehož vlastní čísla vyjadřují počet částic ve stavu $|n\rangle$, tj. jeho vlastní čísla jsou N_n . Jednoduše lze dojít, jak bylo vidět už při počítání komutátoru, k závěru, že

$$\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n |N_1, \dots, N_n, \dots\rangle = \sqrt{N_n} \hat{a}_n^\dagger |\dots, N_n - 1, \dots\rangle = N_n |\dots, N_n, \dots\rangle, \quad (8.29)$$

odkud vidíme, že operátor počtu částic ve stavu $|n\rangle$ lze napsat jako $\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n$. Formulujeme tuto skutečnost v definici.

Definice 8.3 (Operátor počtu částic). Necht' jsou dána sada kreačních a anihilačních operátorů \hat{a}_n^\dagger a \hat{a}_n . Operátor počtu částic ve stavu $|n\rangle$ definujeme coby operátor

$$\hat{N}_n = \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \quad (8.30)$$

a operátor celkového počtu částic

$$\hat{N} = \sum_n \hat{N}_n. \quad (8.31)$$

Samozřejmě lze přejít od báze $|\alpha : n\rangle$ k jiné bázi $|\beta, n\rangle$, kde definujeme ekvivalence

$$|\alpha : n\rangle \equiv \hat{a}_n^\dagger(\alpha) |0\rangle, \quad |\beta : n\rangle \equiv \hat{a}_n^\dagger(\beta) |0\rangle, \quad (8.32)$$

kde bázi vytvoříme samozřejmě probíháním (multi)indexů n . Přechod od jedné bázi k druhé je poté dán díky rozepsání identity

$$|\beta : n\rangle = \sum_m \langle\alpha : m|\beta : n\rangle |\alpha : m\rangle. \quad (8.33)$$

Kreační a anihilační operátory se při přepisu do jiné báze chovají podle vzorce

$$\hat{a}_n^{(\dagger)}(\beta) = \sum_m \langle\alpha : m|\beta : n\rangle \hat{a}_m^{(\dagger)}(\alpha), \quad (8.34)$$

odkud je zřejmá invariance výše odvozených komutátorů.

Je-li báze spojitá, defintoricky pokládáme $|x\rangle = \hat{\psi}^\dagger(x) |0\rangle$, odkud poté plyne

$$\hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_n \phi_n^*(x) \hat{a}_n^\dagger \quad \text{a} \quad \hat{\psi}(x) = \sum_n \phi_n(x) \hat{a}_n, \quad (8.35)$$

kde číslo (vlnová funkce v x reprezentaci — ať už je x poloha či něco jiného) $\phi_n(x) = \langle x|n\rangle$ vyjadřuje koeficienty přechodu od báze původní ke zkoumané spojitě bázi. Operátory $\hat{\psi}^{(\dagger)}(x)$ můžeme chápat jako polní operátory, leč x zde nemusí nutně znamenat polohu.

Vezmeme-li si obecný operátor \hat{R} příslušející nějaké fyzikální veličině, potom jej můžeme aplikovat na jednu částici tehdy, když máme celý systém složený

pouze z jedné částice. Nyní je ale dán systém N bosonů a operátor \hat{R} musí být napsán jako

$$\hat{R} = \sum_n \hat{R}_{(n)}, \quad (8.36)$$

kde $\hat{R}_{(n)}$ je operátor působící na jednu částici, konkrétně pak má vliv na n . prvek ve vlnové funkci $|\dots, N_n, \dots\rangle$. Zapůsobíme-li tedy tímto operátorem na vlnovou funkci, dostaneme

$$\hat{R} |N_1, \dots\rangle = (c_1 N_1 + c_2 N_2 + \dots) |N_1, \dots\rangle = \sum_i (c_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) |N_1, \dots\rangle, \quad (8.37)$$

$$\Rightarrow \hat{R} = \sum_i c_i \hat{N}_i, \quad (8.38)$$

$$\hat{R} = \sum_i c_i \hat{N}_i = \sum_{nn'} \sum_i \underbrace{\langle b : n | c : i \rangle c_i \langle c : i | b : n' \rangle}_{\text{maticový element}} \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'} = \quad (8.39)$$

$$= \sum_{nn'} R_{nn'} \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'}. \quad (8.40)$$

8.3.2 Fermiony

Na rozdíl od bosonů platí u fermionů tzv Pauliho vylučovací princip, který byl definován výše. Jedná se o důsledek symetrizačního postulátu QM, který říká, že pravděpodobnost nalezení dvou částic ve stejném stavu je nulová. Toho využijeme pro lepší přístup.

Definujme opět Fockův prostor, tentokrát pro fermiony, jako

$$\mathcal{H}_F = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_A^{(N)}, \quad (8.41)$$

kde $\mathcal{H}_A^{(N)}$ odpovídá podprostoru pro N částic, který obsahuje pouze totálně antisymetrické vlnové funkce pro popis těchto částic. Takové částice potom nazýváme fermiony. Opět lze definovat kreační a anihilační operátory, tentokrát však kreační operátor \hat{b}_n^\dagger pouze na stav, kde je $N_n = 0$. Anihilační operátor \hat{b}_n potom smí působit na stavy, že $N_n = 1$.

Nyní budeme na místo komutátorů $[A, B] = AB - BA$ používat tzv. anti-komutátory $\{A, B\} = AB + BA$. Lze jednoduše ukázat následující identity

$$\{\hat{b}_n^\dagger, \hat{b}_m^\dagger\} = 0, \quad \{\hat{b}_n, \hat{b}_m\} = 0, \quad \{\hat{b}_n, \hat{b}_m^\dagger\} = \delta_{mn}. \quad (8.42)$$

8.4 Hartree-Fockovy rovnice

Nechť je dán systém N nerozlišitelných fermionů s Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \sum_{nm} h_{mn} \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_m + \frac{1}{2} \sum_{klmn} v_{kl,mn} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_n \hat{b}_m. \quad (8.43)$$

Úkolem je nyní najít nejlépe popisující vlnovou funkci $|\psi\rangle = \hat{b}_1^\dagger \cdots \hat{b}_N^\dagger |0\rangle$, která popisuje co nejpřesněji chování systému. Využijeme tedy Ritzův variační princip.

Nejprve je třeba najít funkcionál energie

$$E[\psi] = \langle \psi | \hat{H}_1 | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H}_2 | \psi \rangle, \quad (8.44)$$

$$\langle \psi | \hat{H}_1 | \psi \rangle = \langle 0 | \hat{b}_1 \cdots \hat{b}_N \left(\sum_{mn} h_{mn} \hat{b}_m^\dagger \hat{b}_n \right) \hat{b}_1^\dagger \cdots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle = \quad (8.45)$$

$$= \langle 0 | \sum_{mn} \hat{b}_m \hat{h}_{mn} \hat{b}_m^\dagger \hat{b}_n | 0 \rangle = \sum_n h_{nn} \langle 0 | \hat{b}_n \hat{N}_n \hat{b}_n^\dagger | 0 \rangle = \sum_n h_{nn} n = \quad (8.46)$$

$$= \sum_n \langle \phi_n | \hat{h} | \phi_n \rangle = \text{Tr } \hat{h}. \quad (8.47)$$

KAPITOLA 9

KVANTOVÁNÍ ELEKTROMAGNETICKÉHO POLE

Elektromagnetická interakce mezi částicemi je jednou z nejdůležitějších interakcí v klasické kvantové mechanice. Gravitační interakce je oproti ní zanedbatelná, a tak ji v průběhu zanedbáme. Situace je nejsnadněji popsána za pomoci Lagrangeova formalismu.

Potenciální energie se skládá z gravitačního a z elektromagnetického příspěvku, tj. $V(\mathbf{x}, t) = V_G(\mathbf{x}, t) + V_{EM}(\mathbf{x}, t)$, dohromady tedy pro částici s nábojem q a hmotností m je Lagrangián

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - V_G(\mathbf{x}, t) - V_{EM}(\mathbf{x}, t), \quad (9.1)$$

kde gravitační potenciál je řešením rovnice

$$\Delta V_G = 4\pi G\rho, \quad (9.2)$$

a elektromagnetický potenciál je tvořen skalárním a vektorovým potenciálem skrze rychlost \mathbf{v}

$$V_{EM} = q(\phi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}), \quad (9.3)$$

analogicky řešení rovnice pro gravitační pole je $V_G = m\Phi$, kde Φ je gravitační potenciál. Kanonickou hybnost pak definujeme skrze Lagrangián

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}^i} = m\dot{x}^i + qA^i, \quad (9.4)$$

odkud tedy $\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}$. Hamiltonián je potom

$$\mathcal{H} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - \mathcal{L} = m\mathbf{v}^2 + q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} - \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - m\Phi - q\phi + q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} = \quad (9.5)$$

$$= \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - m\Phi - q\phi = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 - m\Phi - q\phi. \quad (9.6)$$

Pohybové rovnice systému jsou potom

$$\dot{x}^i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial p_i} (p_j p^j - 2qp_j A^j) = \frac{p^i}{m} - \frac{q}{m} A^i, \quad (9.7)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x^i} = -\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{1}{2m} [q^2 \mathbf{A}^2 - 2q\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}] - m\Phi - q\phi \right) = \quad (9.8)$$

$$= \frac{q}{m} p_j \frac{\partial A^j}{\partial x^i} - \frac{q^2}{m} A^j \frac{\partial A_j}{\partial x^i} + m \frac{\partial \Phi}{\partial x^i} + q \frac{\partial \phi}{\partial x^i} \quad (9.9)$$

a vektorově zapsáno

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{1}{m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A}), \quad (9.10)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{q}{m} \mathbf{p} \cdot \nabla \mathbf{A} - \frac{q^2}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{A} + m \nabla \Phi + q \nabla \phi, \quad (9.11)$$

přičemž skalární součin vektoru s tenzorem bereme pes jeho první index

$$\mathbf{X} \cdot \nabla \mathbf{A} = X_i \nabla A^i = X_i T^{ij} = \mathbf{X} \cdot \mathbb{T}. \quad (9.12)$$

Část II

Statistická fyzika

KAPITOLA 10

OBEČNÝ POPIS STATISTICKÉ FYZIKY

Statistická fyzika je vědní obor zkoumající kolektivní chování velkého množství částic. Správný přístup k této teorii je kvantový, neboť chování částic je kvantové, a proto patří do této knihy. Nejdříve je potřeba vyložit statistické pojmy, poté začít řešit kvantový popis.

10.1 Statistické pojmy teorie pravděpodobnosti

10.1.1 Popis jedné proměnné

Při popisu statistiky se vychází z teorie míry, která předpokládá existenci nějaké σ -algebry, tj. existenci měřitelných množin, v rámci nějaké velké třídy prvků.

Definice 10.1. Nechť je X obyčejná množina a \mathfrak{X} je její σ -algebra, potom pro (X, \mathfrak{X}, p) měřitelný prostor je p pravděpodobnost právě tehdy, je-li $p(X) = 1$.

Definice 10.2. Nechť je Ω množina a ξ je zobrazení definované na Ω , potom řekneme, že ξ je *náhodná* (též *stochastická*) proměnná, pokud přiřazuje každé podmnožině Ω interval hodnot $[a, b]$ nebo (a, b) .

Definice 10.3. Pravděpodobnostní distribuční funkce $F(x)$ je právě tehdy, pokud

$$F(x) = p(X \leq x) = \int_{-\infty}^x F(y) dy, \quad (10.1)$$

přičemž platí $F(\infty-) = 1$ a zároveň $F(-\infty+) = 0$.

Ve statistické fyzice tak musíme rozlišovat dva druhy distribucí pravděpodobnosti. Jednou z nich je distribuční funkce, která určuje pravděpodobnost, že daný jev nabude hodnoty x nebo menší. Druhým typem je distribuce pravděpodobnosti coby skutečné rozdělení pravděpodobnosti – také můžeme říci hustota pravděpodobnosti.

Definice 10.4. Nechť je p pravděpodobnost na daném systému Ω , potom definujeme m . statistický moment náhodné veličiny X jako

$$\langle X^m \rangle = \int_{\Omega} dp(x) x^m, \quad (10.2)$$

kde velkým písmenem X značíme náhodnou proměnnou a malým x její hodnotu.

Definice 10.5. Nechť $p(x)$ je pravděpodobnost, potom hustotu pravděpodobnosti $f(x)$ definujeme předpisem

$$dp(x) = f(x)dx. \quad (10.3)$$

Za pomoci hustoty pravděpodobnosti $f(x)$ lze vyjádřit momenty ve tvaru

$$\langle X^m \rangle = \int dx x^m f(x). \quad (10.4)$$

Je-li rozdělení diskrétní, tj. veličina smí nabývat pouze vybraných hodnot, potom platí

$$\langle X^m \rangle = \int dx x^m \sum_l p_l \delta(x - x_l) = \sum_l x_l^m p_l. \quad (10.5)$$

Definice 10.6. Charakteristickou funkcí rozdělení $f(x)$ nazveme funkci

$$\phi(k) = \mathcal{F}[f](k) = \langle e^{ikX} \rangle = \int dx e^{ikx} f(x), \quad (10.6)$$

tedy se jedná se o Fourierovu transformaci hustoty pravděpodobnosti.

Charakteristickou funkce lze rozepsat za pomoci rozvoje exponenciály

$$\phi(k) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \langle X^n \rangle = \exp \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} C_n \right), \quad (10.7)$$

kde C_n je tzv. *n. kumulant*. Provedme substituci $t = ik$, potom dostaneme

$$\frac{\partial}{\partial t} \ln \langle e^{tX} \rangle = \frac{1}{\langle e^{tX} \rangle} \langle X e^{tX} \rangle. \quad (10.8)$$

Jelikož platí, že $\int f(x)dx = 1$, je tedy $\langle 1 \rangle = 1$, pro $t = 0$ se tedy předchozí výraz blíží ke střední hodnotě X . Pokud bychom provedli druhou derivaci podle t a opět položili $t = 0$, získáme dost zřejmě $\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$. Na základě těchto poznatků lze definovat kumulanty

Definice 10.7. Definujeme n . kumulant vzorcem

$$C_n = \frac{\partial^n}{\partial (ik)^n} \ln \langle e^{ikX} \rangle \Big|_{k=0}. \quad (10.9)$$

Kumulanty také často označujeme n . centrální statistické momenty.

10.1.2 Statistika více proměnných

Definice 10.8. Pro veličiny X, Y definujeme jejich vzájemný rozptyl (kovarianci)

$$\text{Cov}(X, Y) = \langle XY \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle \quad (10.10)$$

a rozptyl (varianci) veličiny X poté definujeme skrze

$$\text{Var}(X) = \text{Cov}(X, X). \quad (10.11)$$

10.1.3 Pravděpodobnost a její vlastnosti

10.1.4 Entropie za pomoci limitních vět

Centrální limitní věty jsou mocná věc, pomocí níž lze odvodit pojmy jako redukovaná statistická entropie. Tento pojem definujeme ještě v příští kapitole za pomoci míry získávané informace.

KAPITOLA 11

OBEČNÝ STATISTICKÝ POPIS KVANTOVÝCH STAVŮ

Kvantová mechanika přináší nový pohled na jednotlivé částice, nicméně třeba je zobecnit i statistické teorie popisující systémy mnoha částic. Boltzmannova statistická fyzika prodělala díky teorii informace a díky kvantové mechanice velké změny, které vedli k hlubšímu pochopení skutečné podstaty kolektivního chování částic.

Ze začátku této kapitoly shrneme poznatky z předchozí části knihy, kde jsme se bavili o kvantovém popisu obecného systému. Poté definujeme za pomoci tzv. *symetrizačního postulátu* fermiony a bosony, specifikujeme, jak vypadá statistická kvantová mechanika právě pro ně.

11.1 Matice hustoty

Nechť je dán systém, jemuž byl přiřazen Hilbertův prostor \mathcal{H} . Lze zvolit různé báze, vybereme tedy jednu obecnou $\{|n\rangle\}$, potom lze každý stav systému zapsat za pomoci lineární kombinace

$$|\Psi\rangle = \sum_n \Psi_n |n\rangle, \quad (11.1)$$

kde $\Psi_n = \langle n|\Psi\rangle$. Bázi volíme tak, aby byla ortogonální a v předchozím vzorci má jak diskrétní, tak spojitý charakter, tj. exaktně zapsáno je

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^N \langle n|\Psi\rangle |n\rangle + \int dn \langle n|\Psi\rangle |n\rangle. \quad (11.2)$$

Hodnoty Ψ_n jsou potom časovými funkcemi, které lze určit ze Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \sum_n \partial_t \Psi_n(t) |n\rangle = \sum_n \Psi_n(t) \hat{H} |n\rangle, \quad (11.3)$$

což v energetické bázi, kdy $\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$ dává jednoduchou rovnici

$$i\hbar \partial_t \Psi(t) = E_n \Psi_n(t) \quad (11.4)$$

jejíž řešením je známá exponenciála $\exp(Et/(i\hbar))$.

Představme si nyní, že nemáme pevně daný stav Ψ , ale množinu stavů $|\phi_n\rangle$, které nejsou blíže určeny, ale jsou dány pravděpodobnostmi naměření jejich vlastních čísel, tj. jsou známy pravděpodobnostní hodnoty p_m ke každému stavu $|\phi_m\rangle$. Ptáme-li se poté, s jakou pravděpodobností naměříme hodnotu ϕ_m , definujeme $p_{a \rightarrow m}$ jako *pravděpodobnost, že v a. stavu nalezneme m. stav*. Dohromady je tedy pravděpodobnost nalezení systému ve stavu $|\phi_m\rangle$ dána součtem

$$\mathfrak{p}_m = \sum_a p_a p_{a \rightarrow m} \quad (11.5)$$

a střední hodnota libovolné veličiny A je

$$\langle A \rangle = \sum_m p_m \langle \phi_m | \hat{A} | \phi_m \rangle = \sum_m |\phi_n\rangle p_m \langle \phi_m | \hat{A} | \phi_m \rangle \langle \phi_n | \quad (11.6)$$

KAPITOLA 12

KVANTOVÉ PLYNY

Pracujeme na Fockově prostoru s mnoha identickými – nerozlišitelnými – částicemi, jak jsme je zavedli v kapitole 8. V klasické fyzice není důvod rozlišovat částice podle typu jejich parity, kvantová mechanika nicméně dává pro fermiony a bosony rozlišné předpovědi. V této kapitole tak ukážeme právě tento popis i jeho klasickou limitu.

12.1 Odvození základních rozdělání

Z pohledu Fockova formalismu pro nerozlišitelné částice je možné vyjádřit každý operátor v reprezentaci obsazovacích čísel za pomoci *krečních* a *anihilačních* operátorů \hat{a}^\dagger a \hat{a} . Operátor počtu částic je pouhý součet operátorů počtu částic v jednotlivých stavech;

$$\hat{N} = \sum_i \hat{N}_i = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i. \quad (12.1)$$

Hamiltonián systému je poté nejlepší vyjádřit za pomoci energetických hodnot jednotlivých stavů. Přisudíme každému stavu energii ϵ_i , potom celkový Hamiltonián je dán vzorcem

$$\hat{H}_N = \sum_{i=1}^N \epsilon_i \hat{N}_i. \quad (12.2)$$

Jelikož je Fockův prostor obecně znám tím, že na něm lze beztréstně ničit částice nebo dávat jejich vzniku, není celkový počet částic znám. Indicie tedy

směřuje k řešení za pomoci grandkanonického souboru kvantového rozdělení;

$$Z_G(T; V, \mu) = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\{n_i\}} e^{-\beta \sum_i n_i (\epsilon_i - \mu)} \stackrel{*}{=} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots e^{-\beta \sum_i n_i (\epsilon_i - \mu)} \stackrel{\circ}{=} \quad (12.3)$$

$$\stackrel{\circ}{=} \prod_i \sum_{n_i} e^{-\beta \sum_i n_i (\epsilon_i - \mu)} \quad (12.4)$$

přičemž $N = 0$ neuvažujeme, energii vakua můžeme nastavit díky škálování tak, aby neměla žádný vliv na partiční sumu. Rovnost $\stackrel{*}{=}$ platí díky podmínce kladené na n_i , kdy tvrdíme $\sum_i n_i = N$, tj. celkový počet částic musí být součet částic ve všech stavech. Jelikož ale sčítáme přes všechna možná N , tak se tato podmínka opomine a sčítá se přes všechny stavy od 1 do ∞ . Druhá rovnost $\stackrel{\circ}{=}$ platí díky faktorizaci předchozího vztahu.

Chemický potenciál splní Gibbs-Duhemovu relaci

$$d\mu = -\frac{S}{N}dT + \frac{V}{N}dp, \quad (12.5)$$

odkud je vidět, že je pokud je $dT = 0$ a $dp = 0$, potom je chemický potenciál konstantní. Celkově potom μ odpovídá energii jedné částice při daném tlaku a teplotě. Proto musí vždy platit, že $\epsilon_i \geq \mu$, díky tomu lze sumu (12.3) sečíst coby geometrickou řadu

Je třeba nějak udělat tuhle kapitolu. Nedává to smysl.

12.2 Klasická limita kanonického souboru

Na ideálním plynu lze jednoduše demonstrovat klasickou limitu díky absenci interakčních členů v Hamiltoniánu. V klasickém kvantovém projektování platí $\langle m|n \rangle = n(m)$, např. známé $\langle \mathbf{q}|\phi_m \rangle = \phi_m(\mathbf{q})$. Relace úplnosti

$$\int d^{3N} \{\mathbf{q}_i\} \left(|\{\mathbf{q}_i\}\rangle \langle \{\mathbf{q}_i\}| \right) = \int d^3 \mathbf{q}_1 d^3 \mathbf{q}_2 \dots d^3 \mathbf{q}_N |\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 \dots\rangle \langle \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 \dots| = \hat{I}$$

dávají pro stopu v partiční funkci při ϕ_n vlastní stavech odpovídajícím vlastním číslům E_n

$$Z = \sum_n \langle \phi_n | e^{-\beta \hat{H}} | \phi_n \rangle = \sum_n \int d^{3N} \{\mathbf{q}_n\} \langle \phi_n | \{\mathbf{q}_n\} \rangle e^{-\beta E_n} \langle \{\mathbf{q}_n\} | \phi_n \rangle = \quad (12.6)$$

$$= \sum_n \int d^{3N} \{\mathbf{q}_n\} e^{-\beta E_n} |\langle \{\mathbf{q}_n\} | \phi_n \rangle|^2. \quad (12.7)$$

Vyjádříme-li nyní $|\phi_n\rangle$ za pomoci Slaterova determinantu (tj. budeme se zajímat o fermiony), dostaneme

$$\langle \{\mathbf{q}_i\} | \phi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{\mathbf{p}_1}(\mathbf{q}_1) & \psi_{\mathbf{p}_1}(\mathbf{q}_2) & \dots \\ \psi_{\mathbf{p}_2}(\mathbf{q}_1) & \psi_{\mathbf{p}_2}(\mathbf{q}_2) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}, \quad (12.8)$$

kde jsme zavedli bázevé vlnové funkce

$$\psi_{\mathbf{p}_i}(\mathbf{q}_j) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(-\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}}{i\hbar}\right). \quad (12.9)$$

Sčítací index n v partiční sumě má tedy nyní význam sčítání přes všechny momenty \mathbf{p} , pokud přejdeme k popisu za pomoci Slaterova determinantu. V termodynamické limitě, kdy $V \rightarrow \infty$ (neboť $N \rightarrow \infty$) se stavy čím dál víc zhušťují u sebe a přecházíme v integrál přes elementární kvantový objem $\sim \hbar^3$ v objemu V , tj.

$$Z = \sum_{\mathbf{p}} \int d^{3N} \{\mathbf{q}_n\} e^{-\beta E_n(\{\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i\})} |\langle \{\mathbf{q}_n\} | \phi_n \rangle|^2 \rightarrow \quad (12.10)$$

$$\rightarrow \frac{V^N}{N! \hbar^{3N}} \int d^{3N} \{\mathbf{q}_n\} d^{3N} \{\mathbf{p}_n\} e^{-\beta E_n(\{\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_j\})} |\langle \{\mathbf{q}_n\} | \phi_n \rangle|^2. \quad (12.11)$$

Na souřadnicích závisí norma, a tudíž

$$\|\phi_n(\{\mathbf{q}_j\})\| = \frac{1}{V^N} \sum_{\mathfrak{P}} (-1)^{\mathfrak{P}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_1(\mathbf{q}_1 - \mathfrak{P}\mathbf{q}_1) + \dots + \mathbf{p}_N(\mathbf{q}_N - \mathfrak{P}\mathbf{q}_N))\right).$$

Nyní využijme předpokladu, že se jedná o ideální plyn bez vnitřních stupňů volnosti, a tudíž je energie závislá pouze na kvadrátu hybnosti částic. Označme $\mathbf{Q} = \mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_N$ a $\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \dots + \mathbf{p}_N$, partiční sumu lze upravit do tvaru

$$Z = \frac{1}{N! \hbar^{3N}} \sum_{\mathfrak{P}} (-1)^{\mathfrak{P}} \int d^{6N} \{\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_j\} e^{-\beta \frac{\mathbf{p}_1^2 + \dots + \mathbf{p}_N^2}{2m}} f(\mathbf{q}_1 - \mathfrak{P}\mathbf{q}_1) \dots f(\mathbf{q}_N - \mathfrak{P}\mathbf{q}_N)$$

pro funkci $f(\mathbf{x}) \sim e^{-x^2 T/\hbar}$. Klasická limita platí tam, kde $T \ll \hbar$, tj. $f(\mathbf{x}) \rightarrow 0$ mimo případy, kdy $x^2 = 0$, potom $f(\mathbf{x}) \rightarrow 1$. V partiční sumě tedy vymizí nediagonální členy. Zbývají odpovídají nulté permutaci, tj. $(-1)^{\mathfrak{P}} = 1$ a finálně dostáváme skutečně známou partiční funkci klasické fyziky

$$Z \approx \frac{1}{N! \hbar^{3N}} \sum_{\mathfrak{P}} (-1)^{\mathfrak{P}} \int d^{6N} \{\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_j\} \prod_{i=1}^N e^{-\beta \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}}. \quad (12.12)$$

Doplnit kvantovou korekci alespoň prvního řádu

12.3 Bose–Einsteinova kondenzace

Nejprve zaměříme svůj hluboký zrak na systémy bosonů, které nás budou provázet následující tři podkapitoly. Jako první a nejsnazší případ budeme uvažovat ideální plyn bosonů s energií

$$E(\mathbf{p}_i) = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}. \quad (12.13)$$

Grand-kanonický potenciál a střední počet částic při zavedené fugacitě $z = e^{\beta\mu}$ lze vyjádřit z obecných předpokladů

$$\Omega = \frac{4\pi V}{\hbar^3} kT \int_0^\infty p^2 \ln \left(1 - ze^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \right), \quad (12.14)$$

$$\langle N \rangle = \frac{4\pi}{\hbar^3} \int_0^\infty \frac{p^2}{z^{-1} e^{\beta p^2/2m} - 1} \quad (12.15)$$

Část III

Relativistická kvantová mechanika a kvantová teorie pole

KAPITOLA 13

KLASICKÁ TEORIE POLE

Tato kapitola se bude věnovat klasickým polním teoriím, od nichž je třeba se odrazit při kvantování a vstupu do „vyšší“ kvantové fyziky.

13.1 Dynamika v polní teorii

V klasické částicové fyzice N hmotných bodů lze přiřadit na fázovém prostoru \mathfrak{F} dohromady $3N$ souřadnic a $3N$ hybností. Částice je vždy v jediném bodě $q^i(t)$, je tedy potřeba pouze diskrétních indexů i . Popis pole je však obecnější, neboť to určuje hodnotu nějaké fyzikální veličiny v každém bodě. Pole je tedy veličina

$$\phi_a(x, t),$$

přičemž x je spojitý index definující polohu (ve vícerozměrném prostoru) a a je případný dodatečný diskrétní index. Příklad takového pole může být elektrické pole udané ve sférických souřadnicích $E_r(x, t)$, $E_\theta(x, t)$ a $E_\phi(x, t)$.

Dynamiku pole nejlépe vystihneme za pomoci *hustoty Lagrangeovy funkce* \mathcal{L} , z níž lze určit Lagrangián

$$\mathcal{L}(t) = \int d^3x \mathcal{L}(x, t), \quad (13.1)$$

dynamika polí se pak určí z Hamiltonova variačního principu nejmenší akce $\delta S = 0$, přičemž akce je definována coby

$$S = \int dt \mathcal{L}(t) = \int d^4x \mathcal{L}(x, t). \quad (13.2)$$

Z tohoto principu lze získat tzv. Euler-Lagrangeovy rovnice pro dynamiku pole;

$$\begin{aligned}\delta S &= \delta \int d^4x \mathcal{L}(x, t) = \int d^4x \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \delta \phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \delta (\partial_\mu \phi) \right] = \\ &= \int d^4x \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \delta \phi - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right) \delta \phi + \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \delta \phi \right) \right] = \\ &= \int d^4x \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right) \right] \delta \phi + \int d^4x \left[\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \delta \phi \right) \right].\end{aligned}\quad (13.3)$$

Dále je potřeba si zvolit okrajové podmínky. Nechť platí, že $\delta \phi_i = \delta \phi_f = 0$, tj. variace pole vymizí v počátečním a finálním čase. Díky tomu se vynuluje druhý z integrálů a pro dynamiku pole lze získat Euler-Lagrangeovy dynamické rovnice

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right) = 0.} \quad (13.4)$$

Maxwellovy rovnice jsou jedním z nejdůležitějších případů v klasické teorii pole, neboť právě tyto rovnice tvoří spolu s materiálovými vztahy celou teorii. Jedná se o ryze polní teorii, a tudíž musí existovat Lagrangián, který takovou fyzikální disciplínu popisuje. Zde se podíváme na vakuum.

Nechť je A^μ čtyř-potenciál definovaný ve speciální relativitě, potom Lagrangián definujeme vztahem

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}(\partial_\mu A_\nu)(\partial^\mu A^\nu) + \frac{1}{2}(\partial_\mu A^\mu)^2, \quad (13.5)$$

tedy po napočítání derivací

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu A_\nu)} = -\partial^\mu A^\nu + \eta^{\mu\nu} \partial_\alpha A^\alpha, \quad (13.6)$$

$$\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu A_\nu)} \right) = -\partial_\mu{}^\mu A^\nu + \partial^\nu{}_\alpha A^\alpha = -\partial_\mu (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) = -\partial_\mu F^{\mu\nu} = 0. \quad (13.7)$$

Pokud bychom nyní chtěli přeformulovat Lagrangián v jazyce nového tenzoru $F^{\mu\nu}$, můžeme napsat $\mathcal{L} = -F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}/4$. Že tento přepis platí lze snadno ověřit

$$F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu)(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) = \quad (13.8)$$

$$= 2(\partial^\mu A^\nu)(\partial_\mu A_\nu) - 2(\partial^\mu A^\nu)(\partial_\nu A_\mu) = \quad (13.9)$$

$$= -4 \left(-\frac{1}{2}(\partial^\mu A^\nu)(\partial_\mu A_\nu) + \frac{1}{2}(\partial_\mu A^\mu)^2 \right) = -4\mathcal{L}. \quad (13.10)$$

13.2 Lorentzova invariance

Nehomogenní Lorentzova grupa všech transformací prostoročasu zachovávající prostoročasový interval je grupa všech transformací typu

$$x^\mu \longrightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu, \quad (13.11)$$

kde a^μ tvoří 4D normální podgrupu nehomogenní Lorentzovy grupy pro případ $\Lambda^\mu_\nu = \delta^\mu_\nu$ a této transformaci říkáme *shift*. Budeme uvažovat nyní nulové shifty, tedy budeme se zaměřovat na tzv. homogenní Lorentzovy transformace, pro něž platí

$$x' = \Lambda x, \quad \text{a tudíž} \quad x = \Lambda^{-1} x', \quad (13.12)$$

kde $\Lambda^{-1}\Lambda = \text{Id}$. Aby se jednalo o Lorentzovu transformaci, která zachová prostoročasový interval, musí platit

$$\eta^{\mu\nu} = \eta^{\alpha\beta} \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\nu_\beta, \quad (13.13)$$

neboli v maticovém zápise

$$\eta = \Lambda^T \eta \Lambda. \quad (13.14)$$

Pro lepší značení budeme nadále psát $(\Lambda^{-1})^\mu_\nu = \Lambda_\nu^\mu$. Jelikož jsme v klasické polní teorii, ptáme se, jak působení Lorentzova grupa na pole. Každá transformace z Lorentzovy grupy má mnoho reprezentací na samotném prostoročase, my jsme zvolili maticovou reprezentaci pomocí Λ a díky ní nyní zavedeme nejsnazší transformaci pole

$$\phi(x) = \phi(x^\mu) \rightarrow \phi(\Lambda_\nu^\mu x^\nu) = \phi(\Lambda^{-1} x). \quad (13.15)$$

Klein–Gordonova rovnice je určena Lagrangianem $\mathcal{L} = \eta^{\mu\nu}(\partial_\mu \phi)(\partial_\nu \phi)/2 - m^2 \phi^2/2$. Označme nyní $\Lambda^{-1}x = y$, potom platí

$$(\partial_\mu \phi)(x^\alpha) \rightarrow \Lambda_\mu^\nu (\partial_\nu \phi)(\Lambda_\beta^\alpha x^\beta) = \Lambda_\mu^\nu (\partial_\nu \phi)(y^\alpha) \quad (13.16)$$

a lze ukázat díky $\det \Lambda = 1$, že pohybová rovnice pole (Klein–Gordonova) je invariantní pod touto transformací;

$$\mathcal{L}(x) \rightarrow \frac{1}{2} \underbrace{\eta^{\mu\nu} \Lambda_\mu^\alpha \Lambda_\nu^\beta}_{\eta^{\alpha\beta}} (\partial_\alpha \phi)(y) (\partial_\beta \phi)(y) - \frac{1}{2} m^2 \phi^2(y) = \mathcal{L}(y), \quad (13.17)$$

$$S = \int d^4x \mathcal{L}(x) = \int d^4y \mathcal{L}(y) \underbrace{\det \Lambda}_1 = S, \quad (13.18)$$

a tedy rovnice zachová stejný tvar. Z principu nejmenší akce za pomoci Euler–Lagrangeových rovnic můžeme tento tvar jednoduše odvodit;

$$\partial_\mu \partial^\mu \phi + m^2 \phi = 0, \quad (13.19)$$

což lze zapsat ve vektorové zápise jako $(\square + m^2)\phi = 0$ bez ohledu na to, v jakých souřadnicích se pohybujeme, pokud jsou svázány s původními souřadnicemi x^μ homogenní Lorentzovou transformací.

13.3 Klein–Gordonovo pole

Standardně lze zadat v klasické teorii pole Lagrangián pole ve tvaru

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\eta^{\mu\nu}\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi - \frac{1}{2}m^2\phi^2, \quad (13.20)$$

kde $\phi = \phi(x^\mu)$ je zkoumané pole a $\eta^{\mu\nu}$ je kontravariantní tenzor Minkowského metriky se signaturou $(+ - - -)$. Nejprve je potřeba spočítat příslušné derivace, které lze dosadit do Euler–Lagrangeových rovnic;

$$\begin{aligned} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)} &= \frac{1}{2}\eta^{\alpha\beta}\frac{\partial}{\partial(\partial_\mu\phi)}(\partial_\alpha\phi\partial_\beta\phi) = \frac{1}{2}\eta^{\alpha\beta}\left(\frac{\partial(\partial_\alpha\phi)}{\partial(\partial_\mu\phi)}\partial_\beta\phi + \partial_\alpha\frac{\partial(\partial_\beta\phi)}{\partial(\partial_\mu\phi)}\right) = \\ &= \frac{1}{2}\eta^{\alpha\beta}(\delta_\alpha^\mu\partial_\beta\phi + \partial_\alpha\delta_\beta^\mu) = \frac{1}{2}\eta^{\mu\beta}\partial_\beta\phi + \frac{1}{2}\eta^{\alpha\mu}\partial_\alpha\phi = \eta^{\mu\beta}\partial_\beta\phi = \partial^\mu\phi, \end{aligned} \quad (13.21)$$

odkud už jednoduše dostáváme

$$(\partial_\mu\partial^\mu + m^2)\phi = 0. \quad (13.22)$$

Rovnici (13.22) nazýváme Klein–Gordonovou rovnicí pro reálné klasické pole $\phi = \phi(x^\mu)$. Často jej můžeme nalézt taktéž ve tvaru s d'Alembertovým operátorem $(\square + m^2)\phi = 0$, neboť $\square = \partial_\mu\partial^\mu$.

13.3.1 Invariance Klein–Gordonovy rovnice

Hledáme takovou lineární transformaci souřadnic $x^\mu \rightarrow y^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$, pod níž bude invariantní akce, tedy i pohybové rovnice pole.

Pokud změníme souřadnice, musí se změnit hodnota pole z $\phi(x^\mu)$ na $\phi(\Lambda^\mu_\nu x^\nu)$. Transformace se vlastně chová tak, že posune podklad, na němž je pole definováno, proto se tímto způsobem změní hodnota pole.

Transformace derivovaného pole probíhá standardně coby derivace složené funkce

$$\partial_\mu\phi(x^\alpha) \mapsto \partial_\mu y^\nu \frac{\partial}{\partial y^\nu}\phi(y^\alpha) \stackrel{*}{=} \Lambda^\nu_\mu \partial_\nu\phi(y^\alpha). \quad (13.23)$$

Lagrangián se tak změní na

$$\mathcal{L}'(y^\alpha) = \frac{1}{2}\eta^{\mu\nu}\Lambda^\rho_\mu\partial_\rho\phi(y^\alpha)\Lambda^\sigma_\nu\partial_\sigma\phi(y^\alpha) - \frac{1}{2}m^2\phi^2(y^\alpha) = \quad (13.24)$$

$$= \frac{1}{2}\eta^{\mu\nu}\Lambda^\rho_\mu\Lambda^\sigma_\nu\partial_\rho\phi(y^\alpha)\partial_\sigma\phi(y^\alpha) - \frac{1}{2}m^2\phi^2(y^\alpha). \quad (13.25)$$

Nadále chceme

$$\int d^4x \mathcal{L}(x^\alpha) = \int d^4y \mathcal{L}(y^\alpha) \det \Lambda. \quad (13.26)$$

Aby se tedy akce nezměnila, musí platit naráz dvě podmínky, konkrétně

$$\eta^{\mu\nu} \Lambda^\rho{}_\mu \Lambda^\sigma{}_\nu = \eta^{\rho\sigma}, \quad \text{a zároveň} \quad \det \Lambda = 1. \quad (13.27)$$

13.3.2 Energie klasického Klein–Gordonova pole

V klasické teorii pole konstruujeme Hamiltonián coby Legendreovu transformaci Lagrangiánu z konfiguračního prostoru $\phi(x)$ do fázového prostoru $\phi(x)$ a $\pi(x)$, kde $\pi(x)$ je kanonická hybnost

$$\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}}. \quad (13.28)$$

Odkud plyne, že Hamitonián takového pole je

$$\mathcal{H} = \int d^4x \left(\pi(x) \dot{\phi}(x) - \mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi) \right) \Big|_{\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}}}. \quad (13.29)$$

Jelikož uvažujeme Lagrangián (tudíž i Hamiltonián) časově nezávislý, je hodnota Hamiltoniánu zachovávající se veličinou o rozměru energie.

KAPITOLA 14

LORENTZOVA GRUPA

Začneme zavedením standardního popisu **speciální teorie relativity** (STR). V STR máme Minkowského prostoročas M^4 , jehož prvky nazýváme události (též světobody). Spojitou diferencovatelnou křivkou $\varphi : (a, b) \rightarrow M^4$ nazveme světočárou v Minkowského prostoročase a všechny možné světočáry v daném bodě můžeme rozdělit na světelné, časupodobné a prostorupodobné podle orientace tečného vektoru ke světočáře.

Máme-li dvě inerciální soustavy, používáme k přechodu mezi nimi lineární transformaci

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} + b^{\mu}. \quad (14.1)$$

Zavedeme-li $ds^2 = g_{\mu\nu} dx^{\mu} dx^{\nu}$, platí, že $ds' = ds$, tj. prostoročasový interval ds se zachovává.

Lorentzova grupa je grupa všech lineárních transformací prostoročasu typu (14.1), pro níž platí, že prostoročasový interval ds se zachovává, tj. pro $g \in \mathcal{L}$ definujeme nový systém $S' = g|S$, že $ds' = ds$.

Pokud nyní označíme $\Delta x = (t_x - t'_x) \mathbf{e}_0 + (x^i - x'^i) \mathbf{e}_i$, potom dostáváme ihned, že součin $\Delta x \Delta y$ se zachová při změně souřadnic ($x \mapsto x', x' \mapsto x$);

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta y &= (t_x - t'_x)(t_y - t'_y) - \delta_{ij}(x^i - x'^i)(y^i - y'^i) = \\ &= (t'_x - t_x)(t'_y - t_y) - \delta_{ij}(x'^i - x^i)(y'^i - y^i) = \Delta x' \Delta y'. \end{aligned}$$

Pokud tedy není budeme uvažovat transformaci (14.1), můžeme psát

$$\Delta x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} \Delta x^{\nu}.$$

Rozepišme nyní rovnost $\Delta x \Delta y = \Delta x' \Delta y'$ s uvažovanou transformací:

$$\eta_{\mu\nu} \Delta x'^\mu \Delta y'^\nu = \eta_{\alpha\beta} \Lambda^\alpha_\mu \Lambda^\beta_\nu \Delta x^\mu \Delta y^\nu. \quad (14.2)$$

Jelikož musí tato rovnost platit pro úplně libovolné intervaly $\Delta x, \Delta y$, dostáváme finální rovnost, kterou je obecně omezená libovolná transformační matice Lorentzovy grupy

$$\boxed{\eta_{\mu\nu} = \eta_{\alpha\beta} \Lambda^\alpha_\mu \Lambda^\beta_\nu}, \quad (14.3)$$

kdy celou dobu uvažujeme metrický tensor Minkowskeho prostoročasu $\eta_{\alpha\beta}$ se signaturou $(+ \ - \ - \ -)$. Na signatuře ale samozřejmě nezáleží při popisu prostoročasu.

Maticově nyní můžeme zapsat formální tensorovou rovnost (14.3), neboť si uvědomíme, že se jedná ve skutečnosti o násobení matic po složkách;

$$\eta = \Lambda^T \eta \Lambda. \quad (14.4)$$

Označení V maticovém zápisu budeme nadále Lorentzovu transformaci (14.1) zapisovat jako dvojici (Λ, a) , kdy Λ je omezená vztahem (14.3) a a je shift - posun. Speciálně označíme transformaci bez posunu $(\Lambda) = (\Lambda, 0)$ a pouze posun $(a) = (\text{Id}, a)$.

Cvičení: Ukážeme, že Lorentzovy transformaci tvoří grupu vzhledem ke skládání.

Že existuje jednotkový prvek grupy je jasné, jedná se o identitu $(\text{Id}, 0)$, neboť pro libovolný prostoročas je $S' = (\text{Id}, 0)S = S$.

Inverzní prvek k obecné transformaci (Λ, a) označíme $(\Lambda, a)^{-1}$. Požadujeme, aby $(\Lambda, a) \circ (\Lambda, a)^{-1} = (\text{Id}, 0)$. Proto zvolíme opět tensorového zápisu a napíšeme

$$\xi^\mu_\nu (\Lambda^\nu_\alpha x^\alpha + a^\nu) + \rho^\mu = \xi^\mu_\nu \Lambda^\nu_\alpha x^\alpha + \xi^\mu_\nu a^\nu + \rho^\mu.$$

V první části vidíme, že $\xi^\mu_\nu = \Lambda^\mu_\nu$, tj. $\xi = \Lambda^{-1}$. Z druhé zase, že $\rho^\mu = -\Lambda^\mu_\nu a^\nu$. Z toho dostáváme, že inverzní prvek má tvar

$$(\Lambda, a)^{-1} = (\Lambda^{-1}, -\Lambda^{-1}a)$$

Nyní se podíváme, jak vypadá složení dvou Lorentzových transformací $(\Lambda, a) \circ (\Sigma, b)$. Opět se nám bude hodit tenzorový zápis, ze kterého vycházíme celou dobud.

$$\Lambda^\mu_\nu (\Sigma^\nu_\alpha x^\alpha + b^\nu) + a^\mu = \Lambda^\mu_\nu \Sigma^\nu_\alpha x^\alpha + \Lambda^\mu_\nu b^\nu + a^\mu.$$

Z toho hned vidíme, že musí platit

$$(\Lambda, a) \circ (\Sigma, b) = (\Lambda \cdot \Sigma, \Lambda b + a).$$

Jako poslední z věcí ukážeme asociativitu skládání, to znamená, že budeme uvažovat tři transformace (Λ_1, a) , (Λ_2, a_2) , (Λ_3, a_3) a budeme se ptát, jestli záleží na pořadí složení $(1 \circ 2) \circ 3 = 1 \circ (2 \circ 3)$. Je jasné, že v první složce nebude problém a vždy se finální transformace bude chovat jako $(\Lambda_1 \cdot \Lambda_2 \cdot \Lambda_3, X)$. Jaká bude ale hodnota X ?

$$X_{(1 \circ 2) \circ 3} = \Lambda_1 \Lambda_2 a_3 + \Lambda_1 a_2 + a_1,$$

$$X_{1 \circ (2 \circ 3)} = \Lambda_1 (\Lambda_2 a_3 + a_2) + a_1.$$

Předchozí vztahy byly rozepsány přímo z odvozených pravidel pro transformaci, navíc vidíme, že hodnoty se rovnají, a tudíž je skládání Lorentzových transformací asociativní.

\Rightarrow LORENTZOVY TRANSFORMACE SKUTEČNĚ TVOŘÍ GRUPU.

□

Z důkazu předchozího tvrzení, kdy jsme si ukázali, jak se skládají dvě prostoročasové Lorentzovy transformace, vidíme, že existuje jednotkový a inverzní prvek právě tak, že můžeme Lorentzovu grupu rozdělit na dvě její nezávislé podgrupy transformací. První je grupa tvořená transformacemi typu (Λ) a druhá typu (a) .

První z uvedených podgrup nazveme homogenní Lorentzovou grupou $\mathcal{L} = O(1, 3)$ a druhou nazveme grupou prostoročasových translací T_4 .

Cvičení V tomto cvičení ukážeme, že T_4 je normální podgrupa.

Nejprve zformulujme, co je to normální podgrupa. Je-li H normální podgrupa G , musí platit, že

$$\forall g \in G : g \circ P = P \circ g,$$

čímž máme na mysli $\{g \circ p : p \in P\} = \{p \circ g : p \in P\}$. K tomu využijeme již odvozený vzorec pro skládání obecných Lorentzových transformací prostoročasu: $(\Lambda, a) \circ (\Sigma, b) = (\Lambda \cdot \Sigma, \Lambda b + a)$;

$$(\Lambda, a) \circ (1, b) = (\Lambda, \Lambda b + a),$$

$$(1, b) \circ (\Lambda, a) = (\Lambda, a + b)$$

To ovšem ale znamená, že $g \circ P = P \circ g$, neboť samotná změna translace už změnu neovlivní.

Ekvivalentní definice normální podgrupy $P \subseteq G$ je ta, že $\forall g \in G \forall p \in P : g^{-1}pg \in P$. Vidíme, že to je určitě splněno, neboť v prvním členu vyjde $\Lambda^{-1}1\Lambda = 1$.

□

14.1 Vlastnosti homogenní Lorentzovy grupy $O(1,3)$

Transformace generující homogenní Lorentzovu grupu jsou transformacemi typu

$$x' = \Lambda x,$$

kdy je hned vidět, že inverzní Lorentzova transformace vypadá jako

$$x = \Lambda^{-1}x',$$

což je očekávané pro transformace typu (Λ) . Víme také, že platí relace ortogonality (14.3), které můžeme nyní rozepsat po složkách jako

$$\begin{aligned} (\Lambda^0_0)^2 - \delta_{ij}\Lambda^i_0\Lambda^j_0 &= 1, \\ \Lambda^0_i\Lambda^0_j - \delta_{kl}\Lambda^k_i\Lambda^k_j &= -\delta_{ij}, \\ \Lambda^0_i\Lambda^0_0 - \delta_{kl}\Lambda^k_i\Lambda^l_0 &= 0. \end{aligned} \tag{14.5}$$

To nám dává dohromady deset nezávislých relací. Neboť je prostoročas dimenze 4, musí být tedy nutně počet nezávislých parametrů homogenní Lorentzovy transformace $4 \times 4 - 10 = 6$. Z toho dostáváme, že dimenze homogenní Lorentzovy grupy je 6 a se čtyřmi parametry posunutí je dimenze nehomogenní Lorentzovy grupy 10.

Z relace ortogonality (14.5) vidíme, že $(\Lambda^0_0)^2 = 1 + \sum_i (\Lambda^i_0)^2 \geq 1$. Z toho ihned dostáváme, že $\Lambda^0_0 \in \mathbb{R} \setminus (-1, 1)$.

Dále pro $\det(\eta) = -1$ máme z obecných relací ortogonality

$$\begin{aligned} \det(\Lambda^T \eta \Lambda) &= \det \eta, \\ \det \Lambda &\stackrel{2}{=} 1, \end{aligned}$$

tedy $\det \Lambda = \pm 1$. Můžeme tedy následně rozdělit nehomogenní Lorentzovu grupu na čtyři její části; rozdělení obsahuje tabulka 14.1.

Vidíme, že z tohoto rozdělení je patrné, že metrika, jejíž determinant je -1 a zastává taktéž funkci inverze prostoru a patří do \mathcal{L}^\uparrow_- . Metrika užívaná v relativitě se signaturou $(- + + +)$ by zase hrála roli časové inverze a patřila by to \mathcal{L}^\downarrow_- .

Tabulka 14.1: Tabulka popisující rozdělení Lorentzovy grupy dle vlastností Λ .

Část Lorentzovy grupy	$\det \Lambda$	Λ^0_0
\mathcal{L}^\uparrow_+	1	≥ 1
\mathcal{L}^\uparrow_-	1	≤ 1
\mathcal{L}^\downarrow_+	-1	≥ 1
\mathcal{L}^\downarrow_-	-1	≤ 1

Vztah Λ^{-1} a Λ^T Můžeme ukázat z relací ortogonality, že existuje vztah mezi inverzní a transponovanou maticí Lorentzovy transformace. Konkrétně využijeme faktu, že $\eta^2 \sim \eta^{ij}\eta_{jk} = \delta^i_k \sim 1$. Potom

$$\eta^2 = \eta(\Lambda^T \eta \Lambda) = (\eta \Lambda^T \eta) \Lambda = 1$$

a z toho vidíme, že $\Lambda^{-1} = \eta \Lambda \eta$.

Cvičení V tomto cvičení si ukážeme, že relace ortogonality platí i pro inverzní matice Lorentzovy transformace zadané vztahem $\Lambda^{-1} = \eta \Lambda \eta$.

Nejprve opět rozepíšeme ve složkách - pro nás tedy tenzorově, co chceme počítat.

$$\begin{aligned} \eta^{\alpha\beta} \Lambda_\alpha^\mu \Lambda_\beta^\nu &\stackrel{?}{=} \eta^{\mu\nu}, \\ \eta^{\alpha\beta} \Lambda_\alpha^\mu \Lambda_\beta^\nu \Lambda_\mu^\rho \Lambda_\nu^\sigma &\stackrel{?}{=} \Lambda_\mu^\rho \Lambda_\nu^\sigma \eta^{\mu\nu} = \eta^{\rho\sigma}. \end{aligned}$$

Jelikož ale víme, že $\Lambda_\nu^\mu \Lambda_\rho^\nu = \delta_\rho^\mu$, dostáváme automaticky splněnou rovnost

$$\eta^{\alpha\beta} \delta_\alpha^\rho \delta_\beta^\sigma = \eta^{\rho\sigma}.$$

I inverzní matice má tedy své relace ortogonality. Ve druhé rovnosti jsme uvažovali relace ortogonality (14.3), u nichž jsme čtyřikrát snížili a čtyřikrát zvýšili index.

□

14.2 Významné podgrupy $O(1,3)$

14.2.1 Grupa rotací

Uvažujeme nyní rotace v prostoru, nikoliv v prostoročase, proto se musí nutně zachovat časová složka čtyřvektoru, na nějž rotaci používáme. To mimo jiné znamená, že matice rotace $\Lambda(R)$ musí obecně splnit

$$\Lambda(R) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R \end{pmatrix},$$

kde R je matice rotace ve 3D. Např. pro rotaci okolo osy x^3 o úhel ϕ dostáváme matici

$$R_3(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Grupě takových rotací říkáme jednoparametrické grupy rotace, neboť jediné, co se nám mění, je parametr ϕ , neb jsme zadali pevnou osu otáčení.

Jinak je to už u osy, která se otáčí okolo obecné osy zadané jednotkovým vektorem \mathbf{n} o úhel ϕ . U ní máme již tři parametry ϕ, n^1 a n^2 ($[n^3]^2 = 1 - [n^1]^2 - [n^2]^2$). Rozdělme tedy obecně vektor \mathbf{x} na složku kolmou k ose otáčení a složku rovnoběžnou s osou otáčení

$$\begin{aligned} \mathbf{x}'_{\parallel} &= \mathbf{x}_{\parallel} = x_i n^i \mathbf{n}, \\ \mathbf{x}'_{\perp} &= \mathbf{x}_{\perp} \cos \phi - (\mathbf{n} \times \mathbf{x}) \sin \phi. \end{aligned}$$

Matice takové obecné rotace okolo osy zadané jednotkovým vektorem \mathbf{n} je tedy zapsána ve složkách jako

$$R_{\mathbf{n}}(\phi)^i_j = n^i n_j + (\delta^i_j - n^i n_j) \cos \phi + \varepsilon^i_{k} n^k \sin \phi.$$

14.2.2 Boost ve směru

Ze speciální relativity známe transformaci, které říkáme boost ve směru. Boostem máme na mysli takovou transformaci

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu},$$

že se nejedná o rotaci, ale o transformaci prostoročasu pro pozorovatele, vůči němuž se prostoročas pohybuje rychlostí \mathbf{v} .

Pohybujeme-li se nyní v jednotkách, kde $c = 1$, dostaneme boost ve směru osy x^3 ve tvaru

$$B_3(u) = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\gamma v \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma v & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh u & 0 & 0 & -\sinh u \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sinh u & 0 & 0 & \cosh u \end{pmatrix},$$

kdy máme zdefinováno

$$u = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+v}{1-v} \right),$$

tj. $\gamma = \cosh u$ a $v\gamma = \sinh u$.

Takovéto boosty tvoří opět jednoparametrickou grupu se závislostí pouze na u (případně v , neboť $u = u(v)$ je vzájemně jednoznačné).

Nyní se podívejme na boost v obecném směru \mathbf{n} o rychlosti \mathbf{v} . Matice obecného boostu se dá napsat jako

$$B_{\mathbf{n}}(u) = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma v \mathbf{n}^T \\ -\gamma v \mathbf{n} & 1 + (\gamma - 1) \mathbf{n} \mathbf{n}^T \end{pmatrix}.$$

Cvičení Ukažme, že $R_3(\phi)R_3(\phi') = R_3(\phi + \phi')$ a stejně u boostu $B_3(u)B_3(u') = B_3(u + u')$.

Začneme rotací. Pro takový typ příkladů prostě vezmeme skutečné matice a vynásobíme je mezi sebou. Z očividných důvodů (že rotace je plošná), můžeme vypustit třetí složku a zjednodušit si život zapisováním pouze matic 2×2 ;

$$\begin{aligned}
& \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi' & \sin \phi' \\ -\sin \phi' & \cos \phi' \end{pmatrix} = \\
& = \begin{pmatrix} \cos \phi \cos \phi' - \sin \phi \sin \phi' & \cos \phi \sin \phi' + \sin \phi \cos \phi' \\ -(\cos \phi \sin \phi' + \sin \phi \cos \phi') & \cos \phi \cos \phi' - \sin \phi \sin \phi' \end{pmatrix} = \\
& = \begin{pmatrix} \cos(\phi + \phi') & \sin(\phi + \phi') \\ -\sin(\phi + \phi') & \cos(\phi + \phi') \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

přičemž jsme využili součtových vzorců pro goniometrické funkce. Pro boost bychom udělali to samé, využili bychom ale součtové vzorce pro hyperbolické funkce.

□

KAPITOLA 15

POINCARÉHO ALGEBRA

V této kapitole se budeme zabývat různými vztahy generátorů Lorentzovy grupy. Začneme tím, že budeme uvažovat infinitezimální vztahy, které posléze zintegrujeme, abychom viděli klasickou transformaci.

Máme tedy již nastolenou Lorentzovu grupu, kterou jsme rozdělili na grupy $O(1, 3)$ a T_4 . Ukázali jsme, že T_4 je normální podgrupa G a $O(1, 3)$ se dá rozdělit na čtyři části, z nichž jediná je podgrupa $O(1, 3)$, a to \mathcal{L}_+^\uparrow , neboť obsahuje jednotkový prvek - identitu.

Přímo jsme neukázali, že $\text{Id} \in \mathcal{L}_+^\uparrow$, ale je jasné, že identita reprezentovaná jednotkovou maticí, splní $\det \text{Id} = 1$ a také $\text{Id}_0^0 = 1 \geq 1$.

Bude-li Lorentzova transformace infinitezimální, dá se aproximovat *poruchou* identity, tedy můžeme zapsat

$$x'^\mu = (\delta_\nu^\mu + \omega_\nu^\mu)x^\nu + \varepsilon^\mu, \quad (15.1)$$

kdy ω_ν^μ a ε^μ jsou infinitezimální. Infinitezimálnost uvažujeme tak, že lze zanedbat veškeré členy mimo lineární a stejně tak součin $\omega_\nu^\mu \varepsilon^\rho \approx 0$.

Z relací ortogonalit dostáváme

$$\eta_{\mu\nu} = \eta_{\alpha\beta}(\delta_\mu^\alpha + \omega_\mu^\alpha)(\delta_\nu^\beta + \omega_\nu^\beta) = \eta_{\mu\nu} + \omega_{\mu\nu} + \omega_{\nu\mu} + o(\omega^2),$$

tedy vidíme, že ω je antisymetrická matice, má-li být infinitezimální poruchou identity. Tím pádem má šest nezávislých složek. Je dobré uvědomit si, že ω je matice čísel, tedy prvky ω_ν^μ jsou obecně čísla.

Pro takovou infinitezimální transformaci není nyní úplně jasné, proč bychom chtěli rozdělovat matici Lorentzovy transformace, jak uděláme, to však děláme s předstihem kvůli tzv. exponenciální parametrizaci;

$$\Lambda^\mu_\nu = \delta^\mu_\nu + \frac{i}{2}\omega_{\alpha\beta}(M^{\alpha\beta})^\mu_\nu,$$

kdy definujeme matici matic $M^{\alpha\beta}$ ve složkách

$$(M^{\alpha\beta})^\mu_\nu = -i(\eta^{\mu\alpha}\delta^\beta_\nu - \eta^{\mu\beta}\delta^\alpha_\nu).$$

Ověřme si, že skutečně dostaneme stejný výraz pro Λ^μ_ν :

$$-\frac{i^2}{2}(\omega_{\alpha\beta}\eta^{\mu\alpha}\delta^\beta_\nu - \omega_{\alpha\beta}\eta^{\mu\beta}\delta^\alpha_\nu) = \frac{1}{2}(\omega^\mu_\nu - \omega_\nu^\mu) \stackrel{?}{=} \omega^\mu_\nu.$$

Skládáme-li transformace $\Lambda^\mu_\nu(\omega/N)$, kdy N je počet složených transformací, dostaneme pro N jdoucí do nekonečna - spojitě rozložení transformací na daném úseku - výraz

$$\Lambda(\omega) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{i}{2} \frac{\omega_{\alpha\beta}}{N} M^{\alpha\beta}\right)^N = \exp\left(\frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} M^{\alpha\beta}\right).$$

Tomu říkáme exponenciální parametrizace Lorentzovy transformace Λ pomocí šesti nezávislých parametrů $\omega_{\alpha\beta}$, když matice $M^{\alpha\beta}$ jsou tzv. **generátory grupy Lorentzových transformací** typu (Λ) .

Cvičení Ukažme, že jsou generátory grupy antisymetrické a také jak vypadají komutační relace - jak vypadá algebra Lorentzovy grupy. Prvně ukážeme antisymetrii, která je zřejmá z definice:

$$(M^{\alpha\beta})^\mu_\nu = -\frac{i}{2}(\eta^{\mu\alpha}\delta^\beta_\nu - \eta^{\mu\beta}\delta^\alpha_\nu) = \frac{i}{2}(\eta^{\mu\alpha}\delta^\beta_\nu - \eta^{\mu\beta}\delta^\alpha_\nu) = -(M^{\beta\alpha})^\mu_\nu.$$

Nyní se podíváme na komutační relace. Uděláme je ve složkách, musíme si ale předem uvědomit, že prvky matice $M^{\alpha\beta}$ jsou matice, tedy musíme využít maticové násobení.

$$\begin{aligned} -[M^{\mu\nu}, M^{\alpha\beta}] &\stackrel{\text{složky}}{=} -(M^{\mu\nu})^a_b (M^{\alpha\beta})^b_c + (M^{\alpha\beta})^a_b (M^{\mu\nu})^b_c = \\ &= (\eta^{a\mu}\delta^\nu_b - \eta^{a\nu}\delta^\mu_b)(\eta^{b\alpha}\delta^\beta_c - \eta^{b\beta}\delta^\alpha_c) - (\eta^{a\alpha}\delta^\beta_b - \eta^{a\beta}\delta^\alpha_b)(\eta^{b\mu}\delta^\nu_c - \eta^{b\nu}\delta^\mu_c) = \\ &= \eta^{a\mu}\eta^{b\alpha}\delta^\nu_b\delta^\beta_c - \eta^{a\nu}\eta^{b\beta}\delta^\mu_b\delta^\alpha_c - \eta^{a\mu}\eta^{b\beta}\delta^\nu_b\delta^\alpha_c + \eta^{a\nu}\eta^{b\alpha}\delta^\mu_b\delta^\beta_c - \\ &\quad - \eta^{a\alpha}\eta^{b\mu}\delta^\beta_b\delta^\nu_c + \eta^{a\beta}\eta^{b\nu}\delta^\alpha_b\delta^\mu_c + \eta^{a\alpha}\eta^{b\nu}\delta^\beta_b\delta^\mu_c - \eta^{a\beta}\eta^{b\mu}\delta^\alpha_b\delta^\nu_c = \\ &= \eta^{\nu\alpha}\eta^{a\mu}\delta^\beta_c - \eta^{\mu\beta}\eta^{a\nu}\delta^\alpha_c - \eta^{\nu\beta}\eta^{a\mu}\delta^\alpha_c - \eta^{\mu\alpha}\eta^{a\nu}\delta^\beta_c - \\ &\quad - \eta^{\beta\mu}\eta^{a\alpha}\delta^\nu_c - \eta^{\alpha\nu}\eta^{a\beta}\delta^\mu_c + \eta^{\beta\nu}\eta^{a\alpha}\delta^\mu_c + \eta^{\alpha\mu}\eta^{a\beta}\delta^\nu_c = \\ &= \eta^{\mu\alpha}(\eta^{a\beta}\delta^\nu_c - \eta^{a\nu}\delta^\beta_c) - \eta^{\nu\alpha}(\eta^{a\beta}\delta^\mu_c - \eta^{a\mu}\delta^\beta_c) + \\ &\quad + \eta^{\nu\beta}(\eta^{a\alpha}\delta^\mu_c - \eta^{a\mu}\delta^\alpha_c) - \eta^{\mu\beta}(\eta^{a\alpha}\delta^\nu_c - \eta^{a\nu}\delta^\alpha_c) \end{aligned}$$

Nyní si uvědomíme, že $-1 = i^2$, tedy po vynásobení rovnice -1 dostaneme

$$[M^{\mu\nu}, M^{\alpha\beta}] = i \left(\eta^{\mu\alpha} M^{\nu\beta} - \eta^{\nu\alpha} M^{\mu\beta} + \eta^{\nu\beta} M^{\mu\alpha} - \eta^{\mu\beta} M^{\nu\alpha} \right)$$

□

Ve cvičení jsme ukázali důležité komutační relace generátorů Lorentzovy grupy \mathcal{L}_+^\uparrow (díky $\Lambda \approx 1 + \omega$) spolu s tím, že generátory mají pouze šest nezávislých složek;

$$\boxed{M^{\alpha\beta} = -M^{\beta\alpha}} \quad (15.2)$$

$$\boxed{[M^{\mu\nu}, M^{\alpha\beta}] = i \left(\eta^{\mu\alpha} M^{\nu\beta} - \eta^{\nu\alpha} M^{\mu\beta} + \eta^{\nu\beta} M^{\mu\alpha} - \eta^{\mu\beta} M^{\nu\alpha} \right)}. \quad (15.3)$$

15.1 Unitární reprezentace Lorentzovy grupy

Nyní se zaměříme na reprezentaci Lorentzovy grupy. Obecně budeme značit reprezentaci $R((\Lambda, a))$, pokud bude naše reprezentace unitární, označíme ji $U(\Lambda, a)$. Jak jsme zvyklí, bude-li nulová prostoročasová translace ($a^\mu = 0$), budeme značit reprezentaci $U(\Lambda)$, naopak pouze pro prostoročasnou translaci budeme psát $U(a)$.

Již z kvantové mechaniky a z lineární algebry víme, že je-li operátor \hat{U} unitární, lze jej napsat jako exponenciálu jiného operátoru \hat{A} tak, že $\hat{U} = \exp(i\hat{A})$, je-li \hat{A} hermiteovský/samosdružený. Proto je pro nás nyní logické uvažovat, že unitární reprezentace dané Lorentzovy transformace bude mít tvar $e^{i(\text{„transformace“})}$.

Pro jednoduchost opět uvažujeme v exponenciální parametrizaci pouze lineární členy v infinitezimální transformaci

$$U(\Lambda(\omega), \varepsilon) = 1 + \frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} J^{\alpha\beta} + i\varepsilon_\alpha P^\alpha + o(\omega^2, \omega\varepsilon, \varepsilon^2),$$

kdy z nutnosti unitárnosti jsou $J^{\alpha\beta}$ a P^μ samosdružené. Dohromady vyjadřují $J^{\alpha\beta}$ a P^μ deset nezávislých generátorů Lorentzovy grupy $O(1, 3)$ v její unitární reprezentaci v exponenciální parametrizaci. Nikoho už nyní nepřekvapení, že přejdeme-li z infinitezimálních krajů do větších plání, dostaneme

$$U(\Lambda(\omega), a) = \exp \left(\frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} J^{\alpha\beta} + ia_\alpha P^\alpha \right).$$

Dále z definice $J^{\alpha\beta}$ v souhlasu s generátory $M^{\alpha\beta}$ lze jednoduše přijít na to, že $J^{\alpha\beta} = -J^{\beta\alpha}$. Je třeba si ale uvědomit, že $M^{\alpha\beta}$ jsou generátory Lorentzovy grupy \mathcal{L}_+^\uparrow , kdežto $J^{\alpha\beta}$ a P^μ jsou generátory celé nehomogenní Lorentzovy grupy.

15.1.1 Transformační vlastnosti generátorů

Víme, že Lorentzova grupa je grupa všech námi povolených transformací prostoročasu v daném nastavení, tj. lineárních transformací zachovávajících prostoročasný interval ds . Pokud nyní máme reprezentaci grupy na Minkowského prostoročase, můžeme ji využít k transformaci stavů i operátorů.

Pro nás bude nyní hlavním cílem ukázat si transformaci infinitezimální transformace, tj.

$$U(\Lambda, a)U(\Lambda(\omega), \varepsilon)U^{-1}(\Lambda, a).$$

V infinitezimálním přiblížení víme, že transformace se dá napsat jako

$$U(\Lambda, a) \left(1 + \frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} J^{\alpha\beta} + i \varepsilon_\mu P^\mu \right) U^+(\Lambda, a).$$

Dále si uvědomíme, že i samotný operátor $U(\Lambda(\omega), \varepsilon)$ je Lorentzovou transformací, tudíž patří do reprezentace Lorentzovy grupy. V ní máme určené, jak vypadá inverzní prvek a naučili jsme se skládat prvky v příslušném cvičení. Pro připomenutí:

$$\begin{aligned} (\Lambda, a) \circ (\Sigma, b) &= (\Lambda \cdot \Sigma, \Lambda b + a), \\ (\Lambda, a)^{-1} &= (\Lambda^{-1}, -\Lambda^{-1}a) \end{aligned}$$

To nám tedy dává

$$\begin{aligned} U(\Lambda, a)U(\Lambda(\omega), \varepsilon)U(\Lambda^{-1}, -\Lambda^{-1}a) &= U(\Lambda + \Lambda\omega, \Lambda\varepsilon + a)U(\Lambda^{-1}, -\Lambda^{-1}a) = \\ &= U(1 + \Lambda\omega\Lambda^{-1}, \Lambda\varepsilon - \Lambda\omega\Lambda^{-1}a) \approx 1 + \frac{i}{2}(\Lambda\omega\Lambda^{-1})_{\mu\nu} J^{\mu\nu} + i(\Lambda\varepsilon - \Lambda\omega\Lambda^{-1}a)_\mu P^\mu \end{aligned}$$

Rozepíšeme nyní výraz ve složkách a rovnou položíme do rovnosti s rozpisem infinitezimální transformace, který jsme uvažovali na začátku;

$$\begin{aligned} U(\Lambda, a) \left(1 + \frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} J^{\alpha\beta} + i \varepsilon_\mu P^\mu \right) U^+(\Lambda, a) &= \\ = 1 + \frac{i}{2} \Lambda^\rho_\mu \omega_{\rho\sigma} \Lambda^\sigma_\nu J^{\mu\nu} + i \left(\Lambda^\nu_\mu \varepsilon_\nu - \Lambda^\rho_\mu \omega_{\rho\sigma} \Lambda^\sigma_\nu a^\nu \right) P^\mu \end{aligned}$$

Pokud přeznačíme na pravé straně v prvním výrazu $(\mu, \nu) \mapsto (\alpha, \beta)$, dostaneme ihned vztahy pro generátory grupy porovnáním vztahů u $\omega_{\alpha\beta}$ a u ε_ν ;

$$\begin{aligned} U(\Lambda, a) J^{\alpha\beta} U^+(\Lambda, a) &= \Lambda^\alpha_\mu \Lambda^\beta_\nu J^{\mu\nu} - (\Lambda^\alpha_\mu \Lambda^\beta_\nu - \Lambda^\beta_\mu \Lambda^\alpha_\nu) a^\nu P^\mu, \\ U(\Lambda, a) P^\mu U^+(\Lambda, a) &= \Lambda^\mu_\nu P^\nu. \end{aligned}$$

Vidíme, že P^μ se transformuje jako čtyřvektor, jedná se o tenzorovou veličinu. To ovšem neplatí o $J^{\alpha\beta}$, které se transformuje jako „tenzor + něco navíc“.

vidíme zde i krásu nulových prostoročasových translací $a^\mu = 0$, neboť potom se všechny generátory transformují jako tenzory;

$$\begin{aligned} U^+(\Lambda)J^{\mu\nu}U(\Lambda) &= \Lambda^\mu{}_\rho\Lambda^\nu{}_\sigma J^{\rho\sigma}, \\ U^+(\Lambda)P^\mu U(\Lambda) &= \Lambda^\mu{}_\nu P^\nu. \end{aligned}$$

Řekneme si ještě, jak vypadá transformace pro pouze prostoročasové translace; inverzní matice k matici jednotkové je opět jednotková matice. Nyní je třeba se neunáhlit a uvědomit si, že složky v závorce mají jiné pořadí indexů, tím tedy dostaneme

$$\begin{aligned} U^+(a)J^{\mu\nu}U(a) &= J^{\mu\nu} - a^\mu P^\nu + a^\nu P^\mu, \\ U^+(a)P^\mu U(a) &= P^\mu. \end{aligned}$$

Interpretace Představme si nyní, že máme dva pozorovatele, jejichž klidové soustavy jsou vůči sobě spojeny Lorentzovou transformací, která je homogenní, tj. $a^\mu = 0$ a $x' = \Lambda x$. Potom bude-li systém v nějakém stavu, pozorovatel A popíše stav jako $|\psi\rangle$, kdežto pozorovatel A' jako $|\psi'\rangle = U(\Lambda)|\psi\rangle$.

Generátor grupy P^μ je operátor na daném Hilbertově prostoru, a proto můžeme spočítat střední hodnotu jemu přiřazené fyzikální veličině v obou pozorovaných soustavách. Samotná hodnota nás teď ale zajímat nebude, podíváme se ale na to, jak se tato hodnota transformuje.

$$\langle P^\mu \rangle_{\psi'} = \langle \psi' | P^\mu | \psi' \rangle = \langle \psi | U^+(\Lambda) P^\mu U(\Lambda) | \psi \rangle = \Lambda^\mu{}_\nu \langle \psi | P^\nu | \psi \rangle = \Lambda^\mu{}_\nu \langle P^\nu \rangle_\psi.$$

Stejně tak bychom pro generátory $J^{\alpha\beta}$ došli k závěru, že $\langle J^{\alpha\beta} \rangle_{\psi'} = \Lambda^\alpha{}_\mu \Lambda^\beta{}_\nu \langle J^{\mu\nu} \rangle_\psi$. Střední hodnoty generátorů Lorentzovy grupy se tedy při transformacích typu (Λ) transformují taktéž jako tenzory.

Nyní se podívejme na to, jak komutují generátory Lorentzovy grupy v unitární reprezentaci, tj. jaké jsou komutátory pro $J^{\mu\nu}$ a P^μ . To uděláme tak, že vezmeme infinitezimální transformaci $U(\Lambda, a) = U(\Lambda(\omega), \varepsilon)$ a použijeme ji na transformační vztahy pro generátory. Není již těžké dosadit a dostat vztahy

$$\begin{aligned} [J^{\mu\nu}, J^{\alpha\beta}] &= i \left(\eta^{\mu\alpha} J^{\nu\beta} - \eta^{\nu\alpha} J^{\mu\beta} + \eta^{\nu\beta} J^{\mu\alpha} - \eta^{\mu\beta} J^{\nu\alpha} \right), \\ [P^\mu, J^{\alpha\beta}] &= i \left(P^\alpha \eta^{\beta\mu} - P^\beta \eta^{\alpha\mu} \right), \\ [P^\mu, P^\nu] &= 0. \end{aligned}$$

Tato trojice komutátorů dává podmínky pro generátory nehomogenní Lorentzovy grupy (taktéž Poincarého grupy). Algebra Poincarého grupy tak plně vystihuje podmínky, které klademe na grupu.

Cvičení Ukážeme si, že operátory $M^2 \equiv P^\mu P_\mu$ a $W^2 = \eta_{\mu\nu} W^\mu W^\nu$ komutují se všemi generátory nehomogenní Lorentzovy grupy, pokud je W tzv. Pauli-Lublanského vektor

$$W^\mu \equiv -\frac{1}{2}\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}P_\nu J_{\rho\sigma}.$$

- $[P^\rho, M^2] = \eta_{\mu\nu} P^\rho P^\mu P^\nu - \eta_{\mu\nu} P^\mu P^\nu P^\rho = 0$ protože operátory P^μ vzájemně komutují.

DODĚLAT CVIČENÍ - JE NĚKDE NA PAPIŘE UŽ HOTOVÉ

KAPITOLA 16

REPREZENTACE LORENTZOVY GRUPY

Doposud jsme pracovali s obecně nehomogenní Lorentzovou grupou, jejíž generátory v exponenciální parametrizaci splňovali Poincarého algebru. Nyní se podíváme, jaká reprezentace transformací prostoročasu (tj. nehomogenní Lorentzovy grupy) může existovat na nějakém vektorovém prostoru, jehož prvky jsou pozorovatelné veličiny na systému. Uvažujeme samozřejmě, že na vektorovém prostoru je definována nějaká reprezentace Lorentzovy grupy splňující algebru generátorů $J^{\mu\nu}$. V této kapitole budeme klasifikovat reprezentace této algebry generátorů.

Definujme nové veličiny J^i, N^i vztahy

$$\begin{aligned} J^i &= -\frac{1}{2}\varepsilon^i{}_{jk}J^{jk}, \\ N^i &= J^{i0} \end{aligned}$$

Z matice matic $J^{\mu\nu}$ jsme tedy přešli ke dvěma vektorům matic, které můžeme navíc vhodně vyjádřit.

Cvičení Ukažme si, jak vypadají explicitně operátory J^i, N^i .

Provedeme složkové vyjádření. Nejprve je jasné, že J^i pro dané i je matice, která je řádu 4×4 . Taková matice tedy bude mít složky $(J^i)^\mu{}_\nu$. Využijeme také

toho, že $J^{ij} = -J^{ji}$

$$\begin{aligned}
(J^i)_0^0 &= -\frac{1}{2}\varepsilon^i_{jk}(J^{jk})_0^0 = \frac{i}{2}\varepsilon^i_{jk}(\eta^{0j}\delta_0^k - \eta^{0k}\delta_0^j) = 0, \\
(J^i)_0^m &= \frac{i}{2}\varepsilon^i_{jk}(\eta^{mj}\delta_0^k - \eta^{mk}\delta_0^j) = 0, \\
(J^i)_n^m &= \frac{i}{2}\varepsilon^i_{jk}(\eta^{mj}\delta_n^k - \eta^{mk}\delta_n^j) = \frac{i}{2}(\varepsilon^{im}_n - \varepsilon^i_m{}^n) = i\varepsilon^{im}_n = i\eta_{ln}\varepsilon^{iml}, \\
(N^i)_0^0 &= (J^{i0})_0^0 = -i(\eta^{0i}\delta_0^0 - \eta^{00}\delta_0^i) = 0, \\
(N^i)_0^m &= -i(\eta^{mi}\delta_0^0 - \eta^{m0}\delta_0^i) = i\delta^{mi}, \\
(N^i)_n^m &= -i(\eta^{mi}\delta_n^0 - \eta^{m0}\delta_n^i) = 0.
\end{aligned}$$

V předcházejícím cvičení jsme ukázali, že matice J^i a N^i nabývají tvaru

$$J^i = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -i\varepsilon^{imn} \end{pmatrix}, N^i = \begin{pmatrix} 0 & i\delta^{mi} \\ i\delta_m^i & 0 \end{pmatrix}.$$

Cvičení Nyní ukážeme, že hodnoty J^i a N^i mají svůj fyzikální význam generátorů boostu a rotace.

Nejprve se podíváme na to, jak vypadají tvary našich matic. Indexy nám napovídají, že J^i, N^i indexujeme pouze hodnotami 1, 2 a 3. Víme již, že $J^{\alpha\beta}$ jsou generátory grupy, která v sobě obsahuje rotace a boosty. Postupně se tedy podívejme na exponenciální parametrizace, přičemž si ale nejprve ukažme explicitní tvar matic J^i a N^i .

$$\begin{aligned}
N^1 &= \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & N^2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & N^3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
J^1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{pmatrix}, & J^2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & J^3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\exp(i\mathbf{u}\mathbf{n} \cdot \mathbf{N}) = \exp^{-1} \left[u \begin{pmatrix} 0 & n_1 & n_2 & n_3 \\ n_1 & 0 & 0 & 0 \\ n_2 & 0 & 0 & 0 \\ n_3 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right]$$

DODĚLAT!

V minulém cvičení jsme tedy ukázali, že J^i jsou generátory rotací kolem i . osy a N^i jsou boosty ve směru i . osy a to pomocí

$$\begin{aligned}\exp(i\mathbf{u}\mathbf{n} \cdot \mathbf{N}) &= B_{\mathbf{n}}(u), \\ \exp(i\phi\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}) &= R_{\mathbf{n}}(\phi).\end{aligned}$$

Cvičení Podívám se na to, jak vypadají komutační relace generátorů boostu a rotace v naší definované reprezentaci.

$$\begin{aligned}[J^a, J^i] &= J^a J^i - J^i J^a = \frac{1}{4} \varepsilon^a_{bc} \varepsilon^i_{jk} \left[(J^{bc})^\mu_\nu (J^{jk})^\nu_\rho - (J^{jk})^\mu_\nu (J^{bc})^\nu_\rho \right] = \\ &= \frac{i}{4} \varepsilon^a_{bc} \varepsilon^i_{jk} \left[\eta^{bj} J^{ck} - \eta^{cj} J^{bk} + \eta^{ck} J^{bj} - \eta^{bk} J^{cj} \right]\end{aligned}$$

DODĚLAT!

Finálně tedy máme komutační relace ve tvaru

$$\begin{aligned}[J^i, J^j] &= i\varepsilon^{ij}_k J^k, \\ [J^i, N^j] &= i\varepsilon^{ij}_k N^k, \\ [N^i, N^j] &= -i\varepsilon^{ij}_k J^k.\end{aligned}$$

Co to ale znamená? N^i tvoří komponenty vektoru vzhledem k rotacím a boosty nekomutují! Takové věci se nám přirozeně nelíbí, protože zavedeme nový systém generátorů L^i, R^i , které budeme nazývat levými a pravými generátory (proč uvidíme později). Definičně zavedeme

$$\begin{aligned}L^i &= \frac{1}{2}(J^i + iN^i), & J^i &= L^i + R^i, \\ R^i &= \frac{1}{2}(J^i - iN^i), & N^i &= i(R^i - L^i).\end{aligned}$$

Předpokládejme hermitičnost operátorů J^i, N^i , potom jsou hermiteovské také operátory L^i, R^i .

Cvičení Ukážeme komutační relace nových generátorů.

$$\begin{aligned}[L^i, R^j] &= \frac{1}{4} \left[(J^i + iN^i)(J^j - iN^j) - (J^j - iN^j)(J^i + iN^i) \right] = \\ &= \frac{1}{4} \left([J^i, J^j] + [N^i, N^j] + i[N^i, J^j] - i[J^i, N^j] \right) = -\frac{1}{4} \left(-\varepsilon^{ji}_k N^k - \varepsilon^{ij}_k N^k \right) = 0 \\ [L^i, L^j] &= \frac{1}{4} \left[(J^i + iN^i)(J^j + iN^j) - (J^j + iN^j)(J^i + iN^i) \right] = \\ &= \frac{1}{4} \left([J^i, J^j] - [N^i, N^j] + i[J^i, N^j] + i[N^i, J^j] \right) = i\varepsilon^{ij}_k L^k, \\ [R^i, R^j] &= \text{stejný způsob jako pro } L, \text{ vyruší se mínus } R = i\varepsilon^{ij}_k R^k.\end{aligned}$$

□

Prozatím jsme si neustále hráli s generátory grupy, respektive s danou algebrou generátorů. Ukázali jsme ale, že na místo uvažování složité soustavy generátorů $J^{\mu\nu}$ můžeme uvažovat daleko snazší generátory L^i, R^i , které jsou 3D za cenu toho, že jsou samozřejmě dva.

Není zde 3D struktura újmou na obecnosti? Nikoliv, jelikož $J^{\mu\nu}$ je antisymetrický, tudíž popsání šesti složkami ve 4D je naprosto dostačující.

A co víc? Vidíme, že L^i, R^i splňují komutační relace, které platí pro moment hybnosti - impulsmoment.

Budeme nyní rozebírat situaci pro L^i a poté budeme mlčky předpokládat, že naprosto stejná analogie se dá provést i pro R^i .

Máme tedy Hilbertův prostor \mathcal{H}_L přiřazený systému nějakým pozorovatelem, ten můžeme rozdělit na direktní součet prostorů, na nichž existuje pro L^i ireducibilní reprezentace

$$\mathcal{H}_L = \bigoplus_{j,A} \mathcal{H}_{L,A}^{(j)},$$

kdy j je celé nebo polocelé číslo a $\dim \mathcal{H}_{L,A}^{(j)} = 2j + 1$.

Báze prostoru $\mathcal{H}_{L,A}^{(j)}$ je tvořena kety

$$|j, m, A\rangle; m \in \{-j, -j+1, \dots, j\},$$

přičemž platí

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 |j, m, A\rangle &= j(j+1) |j, m, A\rangle, \\ L^3 |j, m, A\rangle &= m |j, m, A\rangle. \end{aligned}$$

Navíc, pokud zdefinujeme $L_{\pm} = L^1 \pm iL^2$, dostaneme

$$\begin{aligned} L_{\pm} |j, m, A\rangle &= \alpha^{\pm}(j, m) |j, m \pm 1, A\rangle, \\ \alpha^{\pm}(j, m) &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}. \end{aligned}$$

Multiindex A zde odpovídá vlastním číslům nějaké úplné množiny pozorovatelných (do níž patří L^3, \mathbf{L}^2 .)

Nyní, jelikož L^i, R^i jsou vzájemně kompatibilní veličiny - jejich operátory (generátory) komutují, dostáváme výsledný prostor jako tensorový součin

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L \otimes \mathcal{H}_R = \bigoplus_{j_L, j_R, A, B} \left[\mathcal{H}_{L,A}^{(j_L)} \otimes \mathcal{H}_{R,B}^{(j_R)} \right] \equiv \bigoplus_{j_L, j_R, A, B} \mathcal{H}_{A,B}^{(j_L, j_R)}.$$

Vcelku logicky je $\dim \mathcal{H}_{A,B}^{(j_L, j_R)} = (2j_L + 1)(2j_R + 1)$ a báze prostoru se skládá z entanglovaných stavů

$$|j_L, j_R, m_L, m_R, A, B\rangle = |j_L, m_L, A\rangle |j_R, m_R, B\rangle$$

s jasným rozložením operátorů

$$\begin{aligned} L^i &\longrightarrow L^i \otimes 1, \\ R^i &\longrightarrow 1 \otimes R^i. \end{aligned}$$

Nyní se zamysleme nad tím, jak to vypadá s operátory J^i . Víme, že se tyto generátory dají zapsat jako $J^i = L^i + iR^i$. Jak tedy působí operátor J^i na bázi prostoru?

Složením dvou nezávislých impulsmomentů j_L, j_R se dostanou všechny impulsmomenty s hodnotami $j \in \{|j_L - j_R|, \dots, j_L + j_R\}$. Potom se $\mathcal{H}_{A,B}^{(j_L, j_R)}$ musí nutně rozpadnout narasu ireducibilních podalgeber

$$\mathcal{H}_{A,B}^{(j_L, j_R)} = \bigoplus_{j=|j_L-j_R|}^{j_L+j_R} \mathcal{H}^{(j)},$$

kdy báze $\mathcal{H}^{(j)}$ je zadána pomocí Clebshových-Gordanových koeficientů

$$|j_L, j_R, j, m\rangle = \sum_{m_L, m_R} (j_L, m_L, j_R, m_R | j, m) |j_L, m_L, A\rangle |j_R, m_R, B\rangle,$$

díky čemuž platí standardní pravidla pro práci s impulsmomenty

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 |j_L, j_R, j, m\rangle &= j(j+1) |j_L, j_R, j, m\rangle, \\ J^3 |j_L, j_R, j, m\rangle &= m |j_L, j_R, j, m\rangle, \\ J_{\pm} |j_L, j_R, j, m\rangle &= \alpha^{\pm}(j, m) |j_L, j_R, j, m \pm 1\rangle. \end{aligned}$$

$D^{(j_L, j_R)}$, jak označíme reprezentaci takové grupy generované uvedenými operátory, tedy nese mimo jiné informaci o spinu, který může nabývat hodnot

$$j \in \{|j_L - j_R|, \dots, j_L + j_R\}.$$

16.1 Příklady ireducibilních reprezentací $D^{(j_L, j_R)}$

16.1.1 $D^{(0,0)}$ - „Skalární reprezentace“

Uvažujme nyní, že $j_L = j_R = 0$, tím získáváme vcelku jednoduchou vlastnost $L^i = R^i = J^i = N^i = 0$, tedy veškeré reprezentace odpovídají identitě.

Naše transformační matice je jednotková - $U(\Lambda) = \exp(i \text{ generátor}) = 1$.

Tato reprezentace tedy představuje invariant - skalár. Nutně vidíme, že spin je nulový.

16.1.2 $D^{(1/2,0)}, D^{(0,1/2)}$ - „Dvojznačné reprezentace“

KAPITOLA 17

KVANTOVÁNÍ POLÍ

V této kapitole si ukážeme, jak kvantovat pole na jednoduchých příkladech. Jedná se o rozšíření z klasické teorie pole, během něž provedeme tzv. *druhé kvantování*.

17.1 Klein–Gordonovo pole

Jak jsme již ukázali, Klein–Gordonovo pole $\phi(x)$ je zadáno Lagrangiánem

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\eta^{\mu\nu}\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi - \frac{1}{2}m^2\phi^2. \quad (17.1)$$

Z takového Lagrangiánu jsme vytvořili akci

$$S = \int d^4x \mathcal{L}(\phi, \partial_\mu\phi), \quad (17.2)$$

odkud z variačního principu $\delta S = 0$ vyplynuly evoluční dynamické rovnice pole

$$\left(\partial^\mu\partial_\mu + m^2\right)\phi(x^\alpha) = 0. \quad (17.3)$$

Část IV

Pevné látky a kondenzovaný stav obecně

KAPITOLA 18

ÚVOD DO STUDIA KRYSTALŮ

Látky v našem světě se skládají z atomů, tyto atomy jsou tvořeny jádry a elektronovými obaly. Jedná se o kvantovou teorii, která musí takové systémy popsat. Nechť je tedy dáno n elektronů a N jader v celém systému, čísla Z_J odpovídají počtu protonů uvnitř jádra, tedy $Z_J e$ je celkový náboj jádra. Připomeňme, že e je kladná hodnota, náboj elektronu je tak $-e$.

Hamiltonián systému je v souřadnicové reprezentaci nerelativistické kvantové mechaniky dán vztahem

$$H = - \sum_J \frac{\hbar^2}{2M_J} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_J^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_j^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{J < K} \frac{Z_J Z_K}{\|\mathbf{R}_J - \mathbf{R}_K\|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j < k} \frac{1}{\|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k\|} - \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \sum_J \frac{Z_J}{\|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_J\|}. \quad (18.1)$$

Takový Hamiltonián působí ve stacionární Schrödingerově rovnici na vlnovou funkci v souřadnicové reprezentaci

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N), \quad (18.2)$$

s níž lze pracovat. Hamiltonián můžeme rozdělit na jadernou část a elektronovou. Do elektronové budeme počítat také interakci s nukleony, tj.

$$H_n = - \sum_J \frac{\hbar^2}{2M_J} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_J^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{J < K} \frac{Z_J Z_K}{\|\mathbf{R}_J - \mathbf{R}_K\|}, \quad (18.3)$$

$$H_{el} = - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_j^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j < k} \frac{1}{\|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k\|} - \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \sum_J \frac{Z_J}{\|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_J\|}. \quad (18.4)$$

Elektronový Hamiltonián tak závisí pouze na polohách jader, nikoliv na jejich hybnostech. To formálně znamená, že můžeme vlnovou funkci rozdělit na část elektronovou závisující na polohách a hybnostech elektronů s parametry poloh jader a na jadernou část závisující pouze na hybnostech a polohách jader, názorně tak

$$H\psi(\mathbf{r}_j, \mathbf{R}_J) = (H_n + H_{el})(A_{\mathbf{R}_J}(\mathbf{r}_j)B(\mathbf{R}_J)) = H_n(AB) + H_{el}(A)B. \quad (18.5)$$

Označme nyní elektronovou energii $E_{\mathbf{R}}$, tak dostáváme

$$H_n(AB) + E_{\mathbf{R}}AB = E\psi(\mathbf{r}_j, \mathbf{R}_J), \quad (18.6)$$

první člen levé strany této rovnice lze rozdělit na kinetickou a interakční část. Interakční část se nezmění, u kinetické části lze zavést tzv. adiabatickou aproximaci;

$$\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_J^2} A_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})B(\mathbf{R}) = \left(\frac{\partial^2 A_{\mathbf{R}}}{\partial \mathbf{R}_J^2} B + \frac{\partial^2 B}{\partial \mathbf{R}_J^2} A_{\mathbf{R}} + 2 \frac{\partial A_{\mathbf{R}}}{\partial \mathbf{R}_J} \cdot \frac{\partial B}{\partial \mathbf{R}_J} \right) \approx \frac{\partial^2 B}{\partial \mathbf{R}_J^2} A_{\mathbf{R}}, \quad (18.7)$$

tedy závislost $A_{\mathbf{R}_J}(\mathbf{r}_j)$ na polohách jader je konstantní (nezávisí na hybnostech).

Definice 18.1 (Born–Oppenheimerova aproximace). Nechť H je Hamiltonián systému N jader a n elektronů. Potom adiabatická (Born–Oppenheimerova) aproximace říká, že vlnovou funkci lze rozdělit na elektronovou a jadernou část, přičemž platí $T\psi(\mathbf{r}_j, \mathbf{R}_J) \approx A_{\mathbf{R}_J}(\mathbf{r}_j)TB(\mathbf{R}_J)$.

Pokud je tedy v platnosti adiabatická aproximace, redukuje se celá Schrödingerova rovnice do tvaru

$$(H_n + E_{\mathbf{R}})\psi(\mathbf{r}_j, \mathbf{R}_J) = E\psi(\mathbf{r}_j, \mathbf{R}_J). \quad (18.8)$$

18.1 Harmonická aproximace jaderného potenciálu

Předchozí popis vedl k rovnici, v níž lze najít celkový potenciál jader

$$V^n = E_{\mathbf{R}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{J < K} \frac{Z_J Z_K}{\|\mathbf{R}_J - \mathbf{R}_K\|}. \quad (18.9)$$

Tento potenciál však lze upravit za pomoci harmonické aproximace. Atomy v krystalu se totiž pohybují kolem svých rovnovážných poloh, neboť v nich je minimum celkového potenciálu V^n . Atomy se samozřejmě snaží obsadit stavy tak, aby jejich celková energie byla co nejmenší. Jako u standardních harmonických úvah budeme uvažovat změnu potenciálu od rovnovážné polohy \mathbf{R}^0

$$V^n - V_0^n \approx \frac{1}{2} \sum_{J=0}^N \sum_{K=0}^N \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 V^n}{\partial R_J^\alpha \partial R_K^\beta} \bigg|_{\mathbf{R}^0} (\mathbf{R}_J - \mathbf{R}_J^0)^\alpha (\mathbf{R}_K - \mathbf{R}_K^0)^\beta \quad (18.10)$$

kde lze zavést **matici tuhosti** $B_{\alpha\beta}^{JK}$ a **relativní odchylky** u_J^α a potenciál zapsat ve tvaru

$$\Delta V^n \approx \frac{1}{2} \sum_{JK\alpha\beta} B_{\alpha\beta}^{JK} u_J^\alpha u_K^\beta. \quad (18.11)$$

Poznámka: V tuto chvíli zapisujeme vektor u^α a vektor příslušící J . jádru u_J^α . Matice tuhosti je tak matice v indexech (α, β) a $B_{\alpha\beta}^{JK}$ je kolekce matic v indexech (JK) .

18.1.1 Pohybové rovnice a dynamická matice

Pohybové rovnice při znalosti Hamiltoniánu je nejlepší řešit za pomoci kanonických rovnic na konfiguračním prostoru, tak je potřeba udělat pro kanonicky sdružené proměnné q^j a $-i\hbar\partial_{q^j}$. K relativní výchylce \mathbf{u}_J^α tedy lze zavést kanonicky sdruženou hybnost $p_J^\alpha = -i\hbar\partial_{u_J^\alpha}$. Kinetická část Hamiltoniánu tak dostává tvar

$$T = - \sum_J \frac{\hbar^2}{2M_J} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{u}_J^2} = \sum_J \frac{\mathbf{p}_J^2}{2M_J}, \quad (18.12)$$

neboť derivace konstantní klidové polohy je nulová. Heisenbergovy rovnice, které jsou analogií ke klasickým Hamiltonovým, tak dávají

$$\partial_t \mathbf{u}_J = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{u}_J, H] = \mathbf{p}_J / M_J, \quad (18.13)$$

$$\partial_t \mathbf{p}_J = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{p}_J, H] = - \sum_K B_{JK} \mathbf{u}_K. \quad (18.14)$$

Derivováním první rovnice a následným dosazením za $\partial_t \mathbf{p}_J$ přichází na světlo světa chtěná pohybová rovnice

$$\partial_{tt} u_J^\alpha + \sum_K B_{\alpha\beta}^{JK} u_K^\beta = 0. \quad (18.15)$$

Fourierovou transformací $\int d\omega e^{i\omega t}$, kde ω má rozměr frekvence, lze získat **rovnici spektra frekvencí**

$$\boxed{\omega^2 M_J U_J^\alpha - \sum_K B^{JK} U_K^\alpha = 0.} \quad (18.16)$$

s označením $U_J^\alpha(\omega) = \mathcal{F}[u_J^\alpha(t)](\omega)$. Nyní je vhodné zavést **dynamickou matici** $D_{\alpha\beta}^{JK}$ a **redukované výchylky** w_J^α , aby rovnice spektra frekvencí dostala hezčí tvar

$$\omega^2 \mathbf{w}_J - \sum_K D^{JK} \mathbf{w}_K = 0, \quad (18.17)$$

po diagonalizaci¹, kdy vypadnou veškeré členy mimo $D^{JJ} \equiv \mathfrak{D}^J$, se rovnice ukáže ve své nejsnazší podobě

$$\boxed{(\omega^2 - \mathfrak{D}^J) \mathbf{w}_J = 0.} \quad (18.18)$$

Řešení této rovnice jsou vlastní módy ω_ν^2 dynamické matice s \mathbf{w}_ν coby vlastními vektory. Počet stupňů volnosti je $3N$, a tudíž i vlastních módů je $3N$, tedy musí být splněno $\nu \in \{1, \dots, 3N\}$.

Každý z vektorů \mathbf{w}_ν lze zapsat za pomoci jeho velikosti a směru $\mathbf{w}_\nu = u_\nu \mathbf{e}_\nu$, přičemž platí, že vektory \mathbf{e}_ν jsou ortonormální díky tomu, že jsou taktéž vlastními vektory dynamické matice.

18.1.2 Krystalová mřížka

Hledat módy ω_ν není dvakrát jednoduché ve všeobecné rovině, krystalová mřížka však nabízí mnohá zjednodušení. Definujeme takovou mříž coby systém skupiny atomů s translační symetrií. Uložme libovolně počátek mříže (současné soustavy), potom tvrdíme, že z místa \mathbf{a} se můžeme přesunout do libovolného místa $\mathbf{a} + \mathbf{T}(\mathbf{n})$ a situace okolo nás se nijak nezmění. Vektor udávající translační symetrii je tak dvakrát kontravariantní tenzor \mathbf{m} , který vystupuje v posunovacím vektoru skrze vztah

$$\mathbf{T}(\mathbf{n}) = \mathbf{n} \cdot \mathbf{m} = n^1 \mathbf{m}_1 + n^2 \mathbf{m}_2 + n^3 \mathbf{m}_3. \quad (18.19)$$

Kdyby n^i mohla být libovolná reálná čísla, skutečně bychom translační symetrii nezískali. Jediné omezení na symetrii je tak, aby vektory \mathbf{m}_i byly lineárně nezávislé a $n^i \in \mathbb{N}$.

Pokud doted' bylo označení atomu J , nyní lze každý atom označit dvěma indexy – svou polohou skupiny (např. molekuly) \mathbf{n} a svým označením v rámci této molekuly τ . Pokud má molekula dvacet atomů, potom τ probíhá 1 až 20.

Rovnice pro spektrum frekvencí kmitů má tak na mříži tvar

$$\omega^2 w_{\tau\mathbf{n}}^\alpha = \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\lambda=1}^s \sum_{\mathbf{m}} D_{\alpha\beta}^{\tau\lambda}(\mathbf{n} - \mathbf{m}) w_{\lambda\mathbf{m}}^\beta, \quad (18.20)$$

kde s je množství atomů ve skupině a vlastnosti dynamické matice nesmí záviset na volbě počátku, proto $D_{\alpha\beta}^{\tau\mathbf{n}\lambda\mathbf{m}} = D_{\alpha\beta}^{\tau\lambda}(\mathbf{n} - \mathbf{m})$. Pravá strana má tvar diskrétní konvoluce, a proto je vhodné použít další Fourierovu transformaci, tentokrát diskrétní

$$F(\mathbf{q}) = \mathfrak{F}[f(\mathbf{k})](\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}}, \quad (18.21)$$

¹Dynamická matice lze diagonalizovat, neboť je symetrická díky tomu, že $V^n \in \mathcal{C}^2$, nezáleží tedy na pořadí parciálních derivací.

odkud je jasné, že \mathbf{q} musí mít složky o rozměru inverzní vzdálenosti, tj. \mathbf{q} neměří vzdálenost na krystalové mříži. Níže zavedeme odpovídající reciprokou mříž. Po provedení této transformace tak rovnice dostává jednodušší tvar

$$\omega^2 W_{\tau\mathbf{q}}^\alpha = \sum_{\beta\lambda} \mathbb{D}_{\alpha\beta}^{\tau\lambda}(\mathbf{q}) W_{\lambda\mathbf{q}}^\beta \quad (18.22)$$

se zavedením

$$W_{\tau\mathbf{q}}^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N_e}} \mathfrak{F}[w_{\tau\mathbf{k}}^\alpha](\mathbf{q}), \quad (18.23)$$

$$\mathbb{D}_{\alpha\beta}^{\tau\lambda}(\mathbf{q}) = \mathfrak{F}[D_{\alpha\beta}^{\tau\lambda}(\mathbf{k})](\mathbf{q}). \quad (18.24)$$

Symbol N_e zde zastupuje počet elementárních buněk na skupinu. Ukazuje se, že vlastní frekvence $\omega_{\tau\mathbf{q}}$ je spojitá v indexu \mathbf{q} , tudíž lze pro pevné τ najít spojitou množinu $\{\omega_{\tau\mathbf{q}}\}_{\mathbf{q}}$, jíž označíme za **fononový pás**.

Část V

Svazy, grupy a symetrie

ÚVOD

Ve fyzice se často setkáváme s transformacemi. Už v prvních kurzech fyziky na vysokých školách se student dozvídá, že existují transformace souřadnic, např. transformace kartézských souřadnic na sférické

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} r \\ \theta \\ \phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \arctan y/x \\ \arccos z/\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \end{pmatrix} \quad (25)$$

LITERATURA

- [1] S. Weinberg - Lectures on Quantum mechanics, 2012, Cambridge University Press