Skládání momentů hybnosti

1) Shrnutí vlastností momentu hybnosti z hlediska posunovacích operátorů

$$\boxed{\hat{L}_i = \frac{1}{\hbar}\varepsilon_{ijk}\hat{X}_j\hat{P}_k} \qquad \boxed{\hat{L}^2 = \sum_i \hat{L}_i\hat{L}_i}$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k \qquad [\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$$

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

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0 \qquad [\hat{L}_3, \hat{L}_\pm] = \pm\hat{L}_\pm \qquad [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hat{L}_3$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_3 + \hat{L}_3^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- - \hat{L}_3 + \hat{L}_3^2$$

pp. $\exists\, |\lambda,\mu\rangle$: $\hat{L}^2|\lambda,\mu\rangle = \lambda|\lambda,\mu\rangle$, $\hat{L}_3|\lambda,\mu\rangle = \mu|\lambda,\mu\rangle$, $\langle\lambda,\mu|\lambda,\mu\rangle = 1$

$\Rightarrow$ $\hat{L}^2(\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle) = \lambda\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle$, $\hat{L}_3(\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle) = (\mu\pm1)\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle$

$\|\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle\|^2 \geq 0$ z definice, současně $\|\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle\|^2 = \langle\lambda,\mu|\hat{L}_\mp\hat{L}_\pm|\lambda,\mu\rangle =$

$= \langle\lambda,\mu|\hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 \mp L_3|\lambda,\mu\rangle = (\lambda - \mu(\mu\pm1))\underbrace{\langle\lambda,\mu|\lambda,\mu\rangle}_{=1}$

$\Rightarrow$ $\lambda \geq \mu(\mu\pm1)$ $\forall$ přípustná μ

Abychom opakovaným působením $\hat{L}_\pm$ nezískali stav s zápornou normou, musí být

$$\lambda = \underset{\substack{\parallel \\ \text{ozn. } l}}{\mu_{max}}(\mu_{max}+1) \quad \wedge \quad \lambda = \mu_{min}(\mu_{min}-1)$$

opakovaným působením $\hat{L}_-$ na stav $|l,l\rangle$: $\hat{L}^2|l,l\rangle = l(l+1)|l,l\rangle$, $\hat{L}_3|l,l\rangle = l|l,l\rangle$

získáváme stavy s $\mu = l-1, l-2$, atd., abychom po konečně mnoha krocích nenarušili nerovnost $\mu \geq \mu_{min}$, musí být $\mu_{min} = l-k$, $k \in \mathbb{N}\cup\{0\}$

$\Rightarrow \cancel{l^2}+l = l(l+1) = (l-k)(l-k-1) = \cancel{l^2} - 2kl + k^2 - l + k$

$\Rightarrow -2kl + k^2 + k - 2l = 0 \Rightarrow k = \dfrac{+2l-1 \pm \sqrt{(2l-1)^2 + 8l}}{2} =$

$= \dfrac{2l-1 \pm \sqrt{(2l+1)^2}}{2} = \dfrac{(2l-1)\pm(2l+1)}{2} = \begin{cases} \\ \end{cases}$

(Pozn: též z $l(l+1) = \mu_{min}(\mu_{min}-1)$ plyne $\mu_{min} = \begin{cases} l+1 & \text{nelze} > l \\ -l \end{cases}$)

$\Rightarrow l \in \mathbb{N}\cup\{0\}$, $\mu \equiv m \in \{-l, \dots, l\}$

normalizace $\quad \langle l,m|\hat{L}_+\hat{L}_-|l,m\rangle = \|\hat{L}_-|l,m\rangle\|^2$

$$\underbrace{\alpha^{(-)}(l,m)}_{} = l(l+1) - m^2 + m = l(l+1) - m(m-1)$$

$$\Rightarrow \quad \hat{L}_-|l,m\rangle = \sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\;|l,m-1\rangle$$

$$\hat{L}_+|l,m\rangle = \underbrace{\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}}_{\alpha^{(+)}(l,m)}\;|l,m+1\rangle$$

2) Skládání 2 momentů hybnosti

$\hat{\vec{L}}_{(1)} \quad \dots \quad |l_1,m_1\rangle$

$\hat{\vec{L}}_{(2)} \quad \dots \quad |l_2,m_2\rangle$

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{L}}_{(1)} + \hat{\vec{L}}_{(2)}, \qquad [\hat{L}_{(1)j}, \hat{L}_{(2)k}] = 0$$

$$\hat{\vec{L}}^2 = (\hat{\vec{L}}_{(1)} + \hat{\vec{L}}_{(2)})^2 = \hat{\vec{L}}_{(1)}^2 + \hat{\vec{L}}_{(2)}^2 + 2\,\hat{\vec{L}}_{(1)}\cdot\hat{\vec{L}}_{(2)} = \hat{\vec{L}}_{(1)}^2 + \hat{\vec{L}}_{(2)}^2 + 2\hat{L}_{(1)3}\hat{L}_{(2)3}$$
$$+ 2\cdot\frac{1}{4}\left((\hat{L}_{(1)+} + \hat{L}_{(1)-})(\hat{L}_{(2)+} + \hat{L}_{(2)-}) - (\hat{L}_{(1)+} - \hat{L}_{(1)-})(\hat{L}_{(2)+} - \hat{L}_{(2)-})\right)$$
$$= \hat{\vec{L}}_{(1)}^2 + \hat{\vec{L}}_{(2)}^2 + 2\hat{L}_{(1)3}\hat{L}_{(2)3} + \hat{L}_{(1)+}\hat{L}_{(2)-} + \hat{L}_{(1)-}\hat{L}_{(2)+}$$

$$\Rightarrow [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}^2_{(1)}] = 0 \qquad \text{ale} \quad [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_{(1)}^k] \neq 0$$
$$\text{pouze} \quad [\hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{L}}_{(1)} + \hat{\vec{L}}_{(2)}] = 0$$

2 vhodné volby systému komutujících operátorů

a) $\hat{\vec{L}}_{(1)}^2, \hat{L}_{(1)3}, \hat{\vec{L}}_{(2)}^2, \hat{L}_{(2)3}$ … spol. vlastní vektory $|l_1,m_1\rangle|l_2,m_2\rangle$

b) $\hat{\vec{L}}_{(1)}^2, \hat{\vec{L}}_{(2)}^2, \hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_3$ … — " — $|l_1 l_2; l\,m\rangle$

pro dané $l_1, l_2 \in \mathbb{N}\cup\{0\}$ tvoří $\{|l_1,m_1\rangle|l_2,m_2\rangle\}$ bázi $(2l_1+1)(2l_2+1)$-dimenzionálního podprostoru $\mathcal{H}_{l_1,l_2} \subset \mathcal{H}$. Ukážeme, jakých hodnot mohou pro dané l_1, l_2 nabývat l, m, že $|l_1, l_2; l, m\rangle$ tvoří též bázi $\mathcal{H}_{l_1,l_2}$ a jak lze najít transformaci přecházející jednou bází na druhou.

Pozn: $\mathcal{H}_{l_1 l_2}$ je určen: $\hat{\vec{L}}_{(1)}^2|\psi\rangle = l_1(l_1+1)|\psi\rangle$, $\hat{\vec{L}}_{(2)}^2|\psi\rangle = l_2(l_2+1)|\psi\rangle$

$\Rightarrow |l_1,m_1\rangle|l_2,m_2\rangle \in \mathcal{H}_{l_1 l_2}$, $|l_1 l_2; l\,m\rangle \in \mathcal{H}_{l_1 l_2}$

Začněme s vektorem $|l_1 l_1\rangle |l_2 l_2\rangle$

$$\Rightarrow \hat{\vec{L}}^2 |l_1 l_1\rangle |l_2 l_2\rangle = (l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1) + 2 l_1 l_2) |l_1 l_1\rangle |l_2 l_2\rangle$$
$$= (l_1+l_2)(l_1+l_2+1) |l_1 l_1\rangle |l_2 l_2\rangle$$

$$\hat{L}_3 |l_1 l_1\rangle |l_2 l_2\rangle = (l_1+l_2) |l_1 l_1\rangle |l_2 l_2\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{|l_1 l_2; l_1+l_2, l_1+l_2\rangle = |l_1 l_1\rangle |l_2 l_2\rangle}$$

Opakovanou aplikací $\hat{L}_- = L_{(1)-} + L_{(2)-}$ na $|l_1 l_2; l_1+l_2, l_1+l_2\rangle$ dostáváme celkem $2(l_1+l_2)+1$ stavů .. vl. vektorů příslušných $l = l_1+l_2$, $m \in \{-l_1-l_2, \dots, l_1+l_2\}$

např.

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

$$\left. + \sqrt{l_2(l_2+1) - l_2(l_2-1)}\, |l_1 l_1\rangle |l_2 l_2-1\rangle \right) =$$

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

Označíme-li $\langle l_1 l_2; l\, m | l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle^* = (l_1 l_2 m_1 m_2 | l m)$ tzv. **Clebschovy – Gordanovy koeficienty**

pak vidíme, že

$$(l_1 l_2\ l_1 l_2 \mid l_1+l_2\ \ l_1+l_2) = 1$$
$$(l_1 l_2\ l_1 -1\ l_2 \mid l_1+l_2\ \ l_1+l_2-1) = \sqrt{\frac{l_1}{l_1+l_2}}$$
$$(l_1 l_2\ l_1\ l_2-1 \mid l_1+l_2\ \ l_1+l_2-1) = \sqrt{\frac{l_2}{l_1+l_2}}$$

Pro další postup je vhodné si povšimnout, že $\hat{L}_3 |l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle = (m_1+m_2) |l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle$

Tj. vzhledem k ON stavových vektorů bude vl. vektor $|l_1 l_2, l, m\rangle$ lineární kombinací vektorů $|l_1 m_1\rangle |l_2 m_2\rangle$ vyhovujících podmínce $\boxed{m = m_1+m_2}$

Těchto vektorů pro dané $l_1 l_2 l\ l_1+l_2-n$ $\quad \#\{k \in \mathbb{Z} \mid |l_1+l_2-n-k| \le l_1,\ |k| \le l_2\}$

BÚNO tj. $l_2 \le l_1 \Rightarrow -l_1 \le l_1+l_2-n-k \le l_1,\ -l_2 \le k \le l_2$

$$\Rightarrow k \in \{-\min(l_2, n-l_2), \dots, l_2 - \max(0, n-2l_1)\}$$

$n \le 2l_2 \Rightarrow k \in \{-n+l_2, \dots, l_2\} \Rightarrow \#\{k\} = n+1$

$(2l_1 \ge) l_1+l_2 \ge n \ge 2l_2 \Rightarrow k \in \{-l_2, \dots, l_2\} \Rightarrow \#\{k\} = 2l_2+1$

celkem $\#\{k\} = 1 + \min(n, 2l_1, 2l_2)$

Je tedy vidět, že $\exists\ |l_1 l_2; l_1+l_2-1, l_1+l_2-1\rangle$ určený podmínkou

$$\langle l_1 l_2; l_1+l_2, l_1+l_2-1 | l_1 l_2; l_1+l_2-1, l_1+l_2-1\rangle = 0 \text{ a normalizací}$$

tj.:

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

$$\Rightarrow \quad (l_1 l_2\ \ l_1-1\ \ l_2 \mid l_1+l_2-1\ \ l_1+l_2-1) = \sqrt{\frac{l_2}{l_1+l_2}}$$

$$(l_1 l_2\ \ l_1\ \ l_2-1 \mid l_1+l_2-1\ \ l_1+l_2-1) = -\sqrt{\frac{l_1}{l_1+l_2}}$$

další bazické vektory se konstruují obdobně, v každém kroku přibude vektor $|l_1, l_2; L, M\rangle$ až do $L = |l_1-l_2|$ a vektory takto tvaru vzniky generují po opakovaných aplikacích $\hat{L}_-$ $(2L+1)$-rozměrný podprostor

Kontrola počtu bazických vektorů $\sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} 2L+1 = 2\sum_{L} L + (l_1+l_2-l_1+l_2+1) =$

$$= \frac{2}{2}(l_1+l_2-l_1+l_2+1)(l_1-l_2+l_1+l_2) + (2l_2+1) = \underline{(2l_2+1)(2l_1+1)}$$

Je vhodné si uvědomit <u>obecné vlastnosti CG koeficientů</u>

1) CG koeficienty lze vybrat reálné

2) $\sum_{l,m} (l_1 l_2\ m_1 m_2 \mid l\ m)(l_1 l_2\ \tilde{m}_1 \tilde{m}_2 \mid l\ m) = \delta_{m_1 \tilde{m}_1}\ \delta_{m_2 \tilde{m}_2}$

3) $\sum_{m_1, m_2} (l_1 l_2\ m_1 m_2 \mid l\ m)(l_1 l_2\ m_1 m_2 \mid \tilde{l}\ \tilde{m}) = \underset{=0}{\delta_{l\tilde{l}}}\ \delta_{m\tilde{m}}$ pokud $l, \tilde{l} \in \{|l_1-l_2|, \ldots, l_1+l_2\}$ jinak

4) $(l_1 l_2\ m_1 m_2 \mid l\ m) = 0$ pokud $m \neq m_1+m_2$

nebo $l \notin \{|l_1-l_2|, \ldots, l_1+l_2\}$

5) $\alpha^{(-)}(l,m)(l_1 l_2\ m_1 m_2 \mid l\ m-1) = \alpha^{(+)}(l_1, m_1+1)(l_1 l_2\ m_1+1\ m_2 \mid l\ m) + \alpha^{(+)}(l_2, m_2+1)(l_1 l_2\ m_1 m_2+1 \mid l\ m)$

$\alpha^{(+)}(l,m)(l_1 l_2\ m_1 m_2 \mid l\ m+1) = \alpha^{(-)}(l_1, m_1-1)(l_1 l_2\ m_1-1\ m_2 \mid l\ m) + \alpha^{(-)}(l_2, m_2-1)(l_1 l_2\ m_1\ m_2-1 \mid l\ m)$

Obecný tvar CG koeficientů je s klesajícím ℓ čím dál složitější zápis:

$$(\ell_1 \ell_2 \; \ell_1 - z \; \ell_2 \,|\, \ell_1+\ell_2, \ell_1+\ell_2-z) = \sqrt{\frac{\ell_1(2\ell_1-1)}{(\ell_1+\ell_2)(2(\ell_1+\ell_2)-1)}}$$

$$(\ell_1 \ell_2 \; \ell_1-1 \; \ell_2-1 \,|\, \ell_1+\ell_2, \ell_1+\ell_2-2) = 2\sqrt{\frac{\ell_1\ell_2}{(\ell_1+\ell_2)(2(\ell_1+\ell_2)-1}}$$

Př: $\ell_1 = \ell_2 = \frac{1}{2}$

$$(\tfrac12\tfrac12\,\tfrac12\tfrac12\,|\,1\;1) = 1$$

$$(\tfrac12\tfrac12\,-\tfrac12\tfrac12\,|\,1\;0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad (\tfrac12\tfrac12\,\tfrac12-\tfrac12\,|\,1\;0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$(\tfrac12\tfrac12\,-\tfrac12\tfrac12\,|\,0\;0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad (\tfrac12\tfrac12\,\tfrac12-\tfrac12\,|\,0\;0) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$(\tfrac12\tfrac12\,-\tfrac12-\tfrac12\,|\,1\;-1) = 1$$

Př: $\ell_1 = 1 \quad \ell_2 = \frac{1}{2}$

$$(1\,\tfrac12\,1\,\tfrac12\,|\,\tfrac32\;\tfrac32) = 1$$

$$(1\,\tfrac12\,0\,\tfrac12\,|\,\tfrac32\;\tfrac12) = \sqrt{\tfrac23} \qquad (1\,\tfrac12\,1\,-\tfrac12\,|\,\tfrac32\;\tfrac12) = \sqrt{\tfrac13}$$

$$(1\,\tfrac12\,0\,\tfrac12\,|\,\tfrac12\;\tfrac12) = \sqrt{\tfrac13} \qquad (1\,\tfrac12\,1\,-\tfrac12\,|\,\tfrac12\;\tfrac12) = -\sqrt{\tfrac23}$$

dopočítejte!

Lze v literatuře najít Wignerovy 3j-symboly

$$\left(\begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{matrix}\right) = (-1)^{j_1-j_2-m_3} \frac{(j_1 j_2 m_1 m_2 | j_3 -m_3)}{(2j_3+1)^{\frac12}}$$

vyhoda .. větší symetrie

Z komutačních relací momentu hybnosti a z pravidel pro jejich skládání lze odvodit řadu vlastností skalárních součinů vhodných vektorů a maticových elementů

Mějme nějakou ÚMP tvořenou $\hat{A}, \hat{L}^2, \hat{L}_3$, pak definujeme $\vec{L}^{(l)}_{m_1 m_2} = \langle a, l, m_1 | \hat{\vec{L}} | a, l, m_2 \rangle$
(evidentně nezávisí na a, proč?)

Máme-li zadány dvě sady vektorů $\{|a, l_1, m_1\rangle\}_{m_1=-l_1}^{l_1}$, $\{b, l_2, m_2\}_{m_2=-l_2}^{l_2}$
vyhovující $\hat{\vec{L}} |a, l_1, m_1\rangle = \sum_{m=-l_1}^{l_1} \vec{L}^{(l_1)}_{m m_1} |a, l_1, m\rangle$, $\hat{\vec{L}} |b, l_2, m_2\rangle = \sum_{m=-l_2}^{l_2} \vec{L}^{(l_2)}_{m m_2} |b, l_2, m\rangle$
pak platí

$$\boxed{\langle a, l_1, m_1 | b, l_2, m_2 \rangle = \delta_{m_1 m_2} \delta_{l_1 l_2} F(l_1, l_2, a, b)}$$

Dk: z předpokladů vyplývá, že

$$\hat{L}_\pm |\overset{\circ}{b}, l_{\frac{1}{2}}, m_{\frac{1}{2}}\rangle = \sqrt{l_{\frac{1}{2}}(l_{\frac{1}{2}}+1) - m_{\frac{1}{2}}(m_{\frac{1}{2}} \pm 1)}\, |\overset{\circ}{b}, l_{\frac{1}{2}}, m_{\frac{1}{2}} \pm 1\rangle, \quad \hat{L}_\pm = \hat{L}_1 \pm i \hat{L}_2$$

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 - \hat{L}_3$$

$$\Rightarrow \langle a, l_1, m_1 | \hat{L}_- \hat{L}_+ | b, l_2, m_2 \rangle = a) \; (l_2(l_2+1) - m_2(m_2+1)) \langle a, l_1, m_1 | b, l_2, m_2 \rangle$$
$$= b) \; (l_1(l_1+1) - m_1(m_1+1)) \langle a, l_1, m_1 | b, l_2, m_2 \rangle$$
$$= c) \; \sqrt{l_1(l_1+1) - m_1(m_1+1)} \sqrt{l_2(l_2+1) - m_2(m_2+1)} \langle a, l_1, m_1+1 | b, l_2, m$$

$a) = b) \quad \forall m_1, m_2 \Rightarrow \quad 0 = [l_1(l_1+1) - m_1(m_1+1) - (l_2(l_2+1) - m_2(m_2+1))] \langle a, l_1, m_1 | b, l_2, m_2 \rangle$

$\Rightarrow$ $a) = c)$ implikuje $\langle a, l_1, m_1 | b, l_2, m_2 \rangle = \langle a, l_1, m_1+1 | b, l_2, m_2+1 \rangle$, pokud $m_1 \in \{-l_1, \dots, l_1\}$, $m_2 \in \{-l_2$

$\Rightarrow$ protože platí $\forall l_2, m_2, l_1, m_1 \Rightarrow \langle a, l_1, m_1 | b, l_2, m_2 \rangle = 0 \quad \forall l_1 \neq l_2 \vee m_1 \neq m_2 \Rightarrow$ QED

Tenzorové operátory a Wigner-Eckartův teorém

<u>ireducibilní tenzorový operátor</u> l-tého řádu ... $\hat{T}(l)$ ... $(2l+1)$ operátorů $\hat{T}(l, m)$ takových, že

1) $[\hat{L}_3, \hat{T}(l, m)] = m \hat{T}(l, m)$ 2) $[\hat{L}_\pm, \hat{T}(l, m)] = \alpha^{(\pm)}(l, m) \hat{T}(l, m \pm 1)$

1) $\wedge$ 2) lze ekvivalentně přepsat

$$\boxed{[\hat{\vec{L}}, \hat{T}(l, m)] = \sum_{n=-l}^{l} \vec{L}^{(l)}_{nm} \hat{T}(l, n)}$$

Cílem je využít vlastností $\hat{\vec{L}}$ ke zjednodušení výpočtu výrazů tvaru

$$\langle a, L, M | \hat{T}(k, q) | b, l, m \rangle$$

kde $\hat{A} |a, L, M\rangle = a |a, L, M\rangle$, $\hat{L}^2 |a, L, M\rangle = L(L+1) |a, L, M\rangle$, $\hat{L}_3 |a, L, M\rangle = M |a, L, M\rangle$, $[\hat{A}, \hat{\vec{L}}] = 0$
$\hat{B} |b, l, m\rangle = b |b, l, m\rangle$, $\hat{L}^2 |b, l, m\rangle = l(l+1) |b, l, m\rangle$, $\hat{L}_3 |b, l, m\rangle = m |b, l, m\rangle$, $[\hat{B}, \hat{\vec{L}}] = 0$

z komutačních relací vyplývá, že

$$\hat{\vec{L}}\left(\hat{T}(k,q)\,|b,l,m\rangle\right) = \sum_{q'=-k}^{k} \vec{L}^{(k)}_{q'q}\,\hat{T}(k,q')\,|b,l,m\rangle + \hat{T}(k,q)\,\hat{\vec{L}}\,|b,l,m\rangle =$$

$$= \sum_{q'=-k}^{k} \vec{L}^{(k)}_{q'q}\,\hat{T}(k,q')\,|b,l,m\rangle + \sum_{n=-l}^{l} \vec{L}^{(l)}_{nm}\,\hat{T}(k,q)\,|b,l,n\rangle$$

=> nápadně připomíná vztahy pro celkový moment hybnosti soustavy 2 částic

$$\hat{\vec{L}}\left(|k,q\rangle|l,m\rangle\right) = \sum_{q'=-k}^{k} \vec{L}^{(k)}_{q'q}\,|k,q'\rangle|l,m\rangle + \sum_{n=-l}^{l} \vec{L}^{(l)}_{nm}\,|k,q\rangle|l,n\rangle$$

=> spol. vlastní vektor $\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_3$ s danými k,l má tvar

$$|b(kl), L'M'\rangle = \sum_{q,m} (k\,l\,q\,m|L'M')\,\hat{T}(k,q)\,|b,l,m\rangle$$

OG C-G koef. => naopak $\hat{T}(k,q)\,|b,l,m\rangle = \sum_{L'=|l-k|}^{l+k} \sum_{M'=-L'}^{L'} (k\,l\,q\,m|L'M')\,|b(kl),L'M'\rangle$

předchozí odvození => $\boxed{\langle a,L,M|\,\hat{T}(k,q)\,|b,l,m\rangle = (k\,l\,q\,m|L\,M)\,\underbrace{\langle a,L,M|b(kl),L,M\rangle}_{\text{nezávisí na } M\text{, viz předch. odvození}}}$

$\boxed{\text{W-E teorém}}$

=> známe-li $\langle a,L,M|\hat{T}(k,q)|b,l,m\rangle$ pro jednu hodnotu M,q,m, známe ho díky výše uvedenému i pro libov. jiné hodnoty, tj. místo $(2L+1)(2l+1)(2k+1)$ výpočtů stačí provést jediný

Obvyklý způsob zápisu Wigner-Eckartova teorému pomocí redukovaných maticových elementů $(a,L\|\hat{\mathbb{T}}(k)\|b,l)$

$$\boxed{\begin{aligned}\langle a,L,M|\,\hat{T}(k,q)|b,l,m\rangle &= (-1)^{L+k-l}\,\frac{(k\,l\,q\,m|L\,M)}{(2L+1)^{1/2}}\,(a,L\|\hat{\mathbb{T}}(k)\|b,l)\\ &= (-1)^{L-M}\begin{pmatrix} L & k & l\\ -M & q & m\end{pmatrix}(a,L\|\hat{\mathbb{T}}(k)\|b,l)\end{aligned}}$$

Pozn: redukovaný maticový element je určen levou stranou pro nějakou volbu M,q,m, nemá přímý fyzikální smysl

Př: vektorový operátor $\hat{\mathbb{V}}$: $[\hat{V}_j, \hat{L}_k] = i\,\varepsilon_{jkl}\,\hat{V}_l$

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

=> $\hat{V}(1,m)$ jsou složky ired. tenzorového operátoru 1. řádu

=> $\langle\beta,0,0|\,\hat{\vec{V}}\,|\alpha,0,0\rangle = 0$ $\quad(\Leftarrow (1\,0\,q\,0|0\,0) = 0)$

$\langle \beta, L, m | \hat{V}_i | \alpha, l, m \rangle = 0$, $i = 1,2$ $\quad (\Leftarrow \langle l \pm 1\, m | L\, m \rangle = 0)$

lze odvodit i složitější vztahy, např. $\langle \beta, l, m' | \hat{\vec{V}} | \alpha, l, m \rangle = \langle \beta, l, m' | \frac{\hat{\vec{L}} (\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{V}})}{\hat{L}^2} | \alpha, l, m \rangle$

Příklad použití: systém 2 (rozlišitelných) částic připravený ve vlastním stavu kvadrátu a třetí komponenty celkového momentu hybnosti, chceme znát střední hodnotu měření 3. komponenty 1. částice

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

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

$$\Rightarrow \boxed{\langle \alpha\, l_1 l_2, l\, m | \hat{L}_3^{(1)} | \alpha\, l_1 l_2, l\, m \rangle = \frac{m}{2l(l+1)} \left(l(l+1) + l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1) \right)}$$

Jiné ekvivalentní způsoby zápisu kvantové mechaniky
tzv. jiné reprezentace QM

a) jiný výběr báze Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$

pro jednoduchost předpokládejme, že se jedná o bezspinovou částici v $\mathbb{R}^3$, resp. $\mathbb{R}$
zobecnění na částice se spinem, resp. systémy více částic budou zřejmá

vlnovou funkci $\psi(\vec{x})$ lze psát $\psi(\vec{x}) = \int \delta^{(3)}(\vec{y}-\vec{x})\,\psi(\vec{y})\,d^3\vec{y} = \langle \vec{x}|\psi\rangle$
a chápat ji jako skalární součin abstraktního vektoru $|\psi\rangle$ a zobecněného
vlastního vektoru polohy $|\vec{x}\rangle$: $\hat{\vec{X}}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|\vec{x}\rangle$. Obvyklý zápis QM
je tedy možno chápat jako zápis v "bázi $\mathcal{H}$" tvořené zobecněnými vlastními vektory $\hat{\vec{X}}$.
Lze si představit, že je možné pracovat i v jiných bázích. Lze se setkat s
1) bází tvořenou vl. vektory hybnosti $|\vec{p}\rangle$: $\hat{\vec{P}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$, $\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\pm i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}$
2) bází tvořenou vl. vektory ÚMP obsahující hamiltonián $\hat{H}$, pp. $\hat{H}$ nezávisí explicitně na čase

ad 1) tzv. hybnostní (nebo p-) reprezentace, stavu $|\psi\rangle$ přiřadíme vlnovou funkci v hybnostní
reprezentaci $\psi(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle$

vztah mezi $\psi(\vec{p})$ a $\psi(\vec{x})$: $\psi(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle = \int\langle\vec{p}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle\,d^3x = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}\psi(\vec{x})\,d$
naopak $\psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}\psi(\vec{p})\,d^3p$, jedná se tedy o přímou a
inverzní Fourierovu transformaci.

Vnosné bázi je třeba psát též operátory : $\langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle = \int d^3x\int d^3y\,\langle\psi|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\hat{A}|\vec{y}\rangle\langle\vec{y}|\varphi\rangle$
$= \int d^3x\int d^3y\,\psi^*(\vec{x})\langle\vec{x}|\hat{A}|\vec{y}\rangle\varphi(\vec{y})$

resp. $\langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle = \int d^3p\int d^3q\,\psi^*(\vec{p})\langle\vec{p}|\hat{A}|\vec{q}\rangle\varphi(\vec{q})$

např. $\langle\psi|\hat{X}_i|\varphi\rangle = \int d^3p\int d^3q\,\psi^*(\vec{p})\left(\int d^3x\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}\underbrace{x_i e^{i\frac{\vec{q}\cdot\vec{x}}{\hbar}}}_{-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}e^{i\frac{\vec{q}\cdot\vec{x}}{\hbar}}}\right)\varphi(\vec{q}) =$

$= \int d^3p\int d^3q\,\psi^*(\vec{p})(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial q_i}\cdot\left(\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q})\right)\varphi(\vec{q}) = i\hbar\int d^3p\int d^3q\,\psi^*(\vec{p})\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q})\frac{\partial\varphi(\vec{q})}{\partial q_i}$

$= \int d^3p\ \psi^*(\vec{p})\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\right)\varphi(\vec{p}) \Rightarrow$ operátor polohy v hybnostní reprezentaci
je $\hat{X}_i = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}$

podobně $\hat{P}_j = p_j \cdot$, $\underbrace{\hat{H} = \frac{\sum_j p_j p_j}{2M} + V\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j}\right)}$

$\Downarrow$

většinou (kromě velmi jednoduchých potenciálů) je výhodnější souřadnicová či x-reprezentace

Př: Ověřte, že v p-reprezentaci platí kanonické komutační relace $[\hat{X}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\,\delta_{jk}\,\mathbb{1}$

ad 2) tzv. energetická reprezentace ... báze $\{|n,\alpha\rangle\}$ $\quad \hat{H}|n,\alpha\rangle = E_n|n,\alpha\rangle$

pokud $\hat{H}$ je operátor s čistě bodovým spektrem, je $\{|n,\alpha\rangle\}$ bází $\mathcal{H}$ v korektním matematickém smyslu. Za předpokladu, že definiční obor všech fyzikálně zajímavých operátorů obsahuje $\{|n,\alpha\rangle\}$, lze místo operátoru $\hat{A}$ počítat s příslušnou ∞-rozměrnou maticí $\left(\langle m,\beta|\hat{A}|n,\alpha\rangle\right)_{m,\beta,n,\alpha}$, skládání operátorů je pak možné zapsat jako násobení matic apod.

Výhoda ... snadný popis časového vývoje $|n,\alpha,(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|n,\alpha,(t_0)\rangle$

Nevýhoda ... netriviální tvar operátorů $\hat{P}, \hat{X}$ => složitější konstrukce fyzikálně interpretovatelných pozorovatelných

Př: 1D harmonický oscilátor $\{|n\rangle\}_{n=0}^{\infty}$, pp. $M = \frac{\hbar}{\omega}$

$$\hat{H} \longleftrightarrow \langle m|\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\delta_{mn}$$

$$\hat{a}^+ \longleftrightarrow \langle m|\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}$$

$$\hat{a} \longleftrightarrow \langle m|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}$$

$$(\Rightarrow \hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a}+\tfrac{1}{2}\right) \longleftrightarrow \langle m|\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(\sum_{k=0}^{\infty}\langle m|\hat{a}^+|k\rangle\langle k|\hat{a}|n\rangle + \langle m|\tfrac{1}{2}|n\rangle\right) =$$

$$= \hbar\omega\left(\sum_k \sqrt{m}\,\delta_{m,k+1}\cdot\sqrt{n}\,\delta_{k+1,n} + \tfrac{1}{2}\delta_{mn}\right) = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\delta_{mn}$$

$$\hat{X} = \frac{\hat{a}^+ - \hat{a}}{i\sqrt{2}} \longleftrightarrow \langle m|\hat{X}|n\rangle = \frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\sqrt{m}\,\delta_{m,n+1} - \sqrt{n}\,\delta_{m+1,n}\right)$$

$$\hat{P} = \frac{\hat{a}^+ + \hat{a}}{\sqrt{2}} \longleftrightarrow \langle m|\hat{P}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{m}\,\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{m+1,n}\right)$$

Pozn: podmínka samosdruženosti pro matice je $\langle m|A|n\rangle = \overline{\langle n|A|m\rangle}$, což $\hat{X}, \hat{P}, \hat{H}$ splňují

časový vývoj bazických vektorů je triviální $\quad |n,(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\omega}(n+\frac{1}{2})(t-t_0)}|n,(t_0)\rangle$

tj. v energetické reprezentaci je časový vývoj libov. stavu ihned zřejmý

$$\boxed{\langle n,\alpha|\psi(t)\rangle = \sum_{m,\beta}\underbrace{\langle n,\alpha|m,\beta,(t)\rangle}_{\delta_{mn}\delta_{\alpha\beta}e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}}\underbrace{\langle m,\beta,(t)|\psi(t)\rangle}_{\langle m,\beta|\psi(t_0)\rangle} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\langle n,\alpha|\psi(t_0)\rangle}$$

b) jiný popis časového vývoje

Schrödingerova rovnice $\Rightarrow$ s časem se stavy systému mění, operátory přiřazené pozorovatelným se nemění, pokud pozorovatelná nezávisí explicitně na čase

Pro další zobecnění je výhodné zavést evoluční operátor $\hat{U}(t_1, t_0)$:

$\hat{U}(t_1, t_0)|\psi\rangle = |\psi(t_1)\rangle$, kde $\psi(t)$: $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$, $|\psi(t_0)\rangle = |\psi\rangle$

Takto lze definovat $\hat{U}$ jen pro $\hat{H}$ závislé na čase, $\hat{U}$ je unitární (pro dané t_1, t_0)

$$\frac{d}{dt_1}\langle\varphi|\hat{U}^+(t_1,t_0)\hat{U}(t_1,t_0)|\psi\rangle = \frac{d}{dt_1}\langle\varphi(t_1)|\psi(t_1)\rangle = \left(\frac{d}{dt_1}\langle\varphi(t_1)|\right)|\psi(t_1)\rangle + \langle\varphi(t_1)|\frac{d}{dt_1}|\psi(t_1)\rangle =$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\langle\varphi(t_1)|\hat{H}|\psi(t_1)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\varphi(t_1)|\hat{H}|\psi(t_1)\rangle = 0, \text{ poč. podm. } \hat{U}(t_0,t_0) = \mathbb{1}$$

($\hat{H}^+ = \hat{H}$)

$\Rightarrow \hat{U}^+(t_1,t_0)\hat{U}(t_1,t_0) = \mathbb{1}$

Též z definice plyne, že $\hat{U}(t_1,t_2)\hat{U}(t_2,t_3) = \hat{U}(t_1,t_3)$, $\hat{U}^{-1}(t_1,t_0) = \hat{U}^+(t_1,t_0) = \hat{U}(t_0,t_1)$

Pokud $\hat{H}$ nezávisí na čase, platí $\hat{U}(t_1+T, t_0+T) = \hat{U}(t_1,t_0) \Rightarrow \hat{U}(t_1,t_0) = \hat{U}(t_1-t_0,0) \equiv \hat{U}(t$

a pro $\hat{U}(t)$ lze najít explicitní vyjádření

$$\boxed{\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)}$$

Pozn: exp lze definovat např. pro $\hat{H}$ s čistě bodovým spektrem jako $\exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)|E,\alpha\rangle = \exp(-\frac{i}{\hbar}Et)|E,\alpha\rangle$

obecně pomocí spektrálního rozkladu $\hat{A} = \int \lambda\, dE_\lambda \Rightarrow \exp(i\hat{A}) = \int e^{i\lambda}\, dE_\lambda$

ověření: $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle = \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)|\psi\rangle \Rightarrow i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}\exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)|\psi\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$

Pomocí $\hat{U}(t)$ lze přejít k <u>Heisenbergově reprezentaci</u>:

pp., že v čase $t=0$ máme dány stavy $|\psi_0\rangle$. Časovým vývojem tohoto stavu v čase t získáme stav $|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi_0\rangle$. Měřitelné jsou ovšem pouze výrazy tvaru $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$. Je tedy fyzikálně přípustné zavést i jiný formalismus, v němž se stavy nemění $|\psi_H(t)\rangle = |\psi_0\rangle = \hat{U}^+(t)|\psi_S(t)\rangle$, ale vhodným způsobem se mění operátory. Časovou změnu operátorů vůči stavům požadujeme z podmínky, aby $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$ na výběru popisu nezávisělo.

$$\langle\varphi(t)|\hat{A}(t)|\psi(t)\rangle = \langle\varphi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\varphi_0|\hat{U}\hat{A}_S\hat{U}|\psi_0\rangle$$

$$= \langle\varphi_H^{(t)}|\hat{A}_H(t)|\psi_H^{(t)}\rangle = \langle\varphi_0|\hat{A}_H(t)|\psi_0\rangle$$

$\Rightarrow \hat{A}_H(t) = \hat{U}^+(t)\hat{A}_S\hat{U}(t)$ (pokud $\hat{A}_S$ nezávisí explicitně na čase, obecně $= \hat{U}^+(t)\hat{A}_S(t)\hat{U}(t)$)

Pro časový vývoj $\hat{A}_H(t)$ lze najít dif. rovnici $\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \left(\frac{d}{dt}U^+(t)\right)\hat{A}_S(t)U(t) + U^+(t)\frac{d}{dt}\hat{A}_S(t)U(t) + U^+(t)\hat{A}_S(t)\frac{d}{dt}U(t)$

$\Rightarrow \frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = +\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{A}_H(t) - \frac{i}{\hbar}\hat{A}_H(t)\hat{H} + U^+(t)\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_S(t)U(t) \Rightarrow$ pokud $\hat{A}_S$ nezávisí na čase

$$\boxed{\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_H(t), \hat{H}]}$$

. Pokud $\hat{H}$ nezávisí na čase, $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$, je výpočet nejjednodušší.

obecně platí pro $\hat{A}_S(t) = \hat{A}_S$ $\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_H(t), \hat{H}_H]$, ale je obtížné najít $\hat{H}_H$ (protože $\hat{H}_S(t)$)

Tato rovnice je původním obdobou časového vývoje pozorovatelné a v klasické mechanice $\dot{a} = \{a, H\}$, pokud chápeme $\frac{1}{i\hbar}[\,,\,]$ jako kvantový analog klasické Poissonovy závorky $\{\,,\,\}$

Otáz: $\hat{H}_H(t) = ?$

Výhody Heisenbergovy reprezentace: a) přímá analogie s klasickou mechanikou

b) někdy výhodné pro popis rozptylu, např. v kvantové teorii pole

Nevýhody —"— : obvykle složitější řešení rovnice časového vývoje než v Schrödingerově repr.

Pozn.: původní Heisenbergova verze maticové mechaniky = QM v energetické Heisenbergově reprezentaci

Diracova reprezentace ... "směs" Schröd. a Heisenberg. reprezentace, vhodná pro některé časově závislé poruchové výpočty

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$, $\hat{U}_0(t) = \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t)$ $\hat{A}_D = \hat{U}_0^+(t)\, A_{S(H)}\, \hat{U}_0(t)$, nadále budeme pod operátory bez indexu chápat op. ve Schröd. repr.

$|\psi_D(t)\rangle = \hat{U}_0^+(t)|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}_0^+(t)\hat{U}(t,t_0)|\psi_0\rangle$

$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_D(t)\rangle = i\hbar\dot{\hat{U}}_0^+(t)\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\right)\hat{U}(t,t_0)|\psi_0\rangle = \hat{U}_0^+(t)(-\hat{H}_0 + \hat{H}_0 + V(t))\underbrace{\hat{U}_0(t)\hat{U}_0^+(t)}_{\mathbb{1}}\underbrace{|\psi_S(t)\rangle}_{|\psi_0(t)\rangle}$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_D(t)\rangle = \hat{V}_D(t)|\psi_D(t)\rangle, \quad \hat{V}_D(t) = \exp(\tfrac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t)\hat{V}(t)\exp(-\tfrac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t)}$$

Tato reprezentace je výhodná, pokud umíme najít evoluční operátor příslušný $\hat{H}_0$ (např. harmonický oscilátor nebo volná částice) a chceme poruchovým výpočtem zjistit, jaký je časový vývoj v případě započtení časově závislého potenciálu $\hat{V}(t)$. Konkrétní příklad uděláme později.

Matice hustoty

Ve fyzice se setkáváme se situacemi, kdy nelze získat experimentálně úplnou informaci o stavu systému v daný okamžik (např. z důvodu příliš velkého počtu částic, nedostatečné kvality aparatury či z nemožnosti dostatečně rychle zpracovat získaná data). V takovém případě užíváme statistický popis. Ten lze interpretovat tak, že ve fázovém prostoru přiřadíme každému bodu pravděpodobnost (resp. její hustotu), že se systém v daný časový okamžik nalézá v daném stavu ... ϱ. Z normalizace dostáváme $\int d^N p\, d^N x\, \varrho = 1$ (celková pravděp. nalezení systému někde je 1)

V analogii s hydrodynamikou lze odvodit lokální verzi zachování pravděpodobnosti tj. rovnici kontinuity

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = -\sum_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\varrho \frac{dx_k}{dt}\right) + \frac{\partial}{\partial p_k}\left(\varrho \frac{dp_k}{dt}\right)\right) = -\sum_k \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x_k}\frac{dx_k}{dt} + \frac{\partial \varrho}{\partial p_k}\frac{dp_k}{dt}\right)$$
$$- \sum_k \varrho \left(\frac{\partial}{\partial x_k}\frac{dx_k}{dt} + \frac{\partial}{\partial p_k}\frac{dp_k}{dt}\right)$$

a použitím Hamiltonových rovnic $\frac{dx_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_k}$, $\frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_k}$ dostáváme

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = -\sum_k \frac{\partial \varrho}{\partial x_k}\frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial \varrho}{\partial p_k}\frac{\partial H}{\partial x_k} = -\{\varrho, H\}$$

tj.

$$\boxed{\frac{\partial \varrho}{\partial t} = \{H, \varrho\}}$$

Pozn: opačné znaménko než v časovém vývoji pozorovatelek

Střední hodnota pozorovatelné a při měření na systému popsaném hustotou pravděpodobnosti ϱ

$$\langle a \rangle = \int d^N p\, d^N x\; a(p,x)\, \varrho(p,x)$$

Pro obdobné účely chceme najít QM analog hustoty pravděp. ϱ

Nejprve přepíšeme výraz pro střední hodnotu $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = Tr\left(\hat{A} |\psi\rangle\langle\psi|\right)$

$\boxed{Tr = Sp = \text{stopa}}$ .. $\forall |\psi_i\rangle_{i=1}^{\dim \mathcal{H}}$ ONBáze $\mathcal{H}$: $Tr(\hat{B}) = \sum_{i=1}^{\dim \mathcal{H}} \langle \psi_i | \hat{B} | \psi_i \rangle$, nezávisí na volbě báze

$|\psi\rangle\langle\psi|$ je projektor na stav $|\psi\rangle$

Uhodneme, že v QM bude $\int d^N p\, d^N x$ nahrazen Tr, pozorovatelná příslušná operátorem $\hat{a}$ a ϱ operátorem $\hat{\varrho}$, který bude vážným součtem projektorů, tj. jestliže s pravděpodobností P_m máme systém ve stavu $|\psi_m\rangle$, bude příslušný operátor $\hat{\varrho}$, tzv. operátor matice hustoty (J. von Neum

$$\boxed{\hat{\varrho} = \sum_m P_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m|}$$

Pozn: stačí $\forall p.$ $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$
rozklad $\hat{\varrho}$ do Σ 1×1 není určen jednoznačně, lze vybrat z jiné sady $|\tilde{\psi}_n\rangle$

celková pravděp. $= 1 \Leftrightarrow \sum_m P_m = 1 \Leftrightarrow \sum_{m,n} \langle \psi_m | P_m | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \psi_n \rangle = Tr\, \hat{\varrho} = 1$ (δ_{mn})

Střední hodnota libov. pozorovatelné A: $\langle A\rangle = \sum_m P_m \langle\psi_m|\hat{A}|\psi_m\rangle = Tr\left(\sum_m \hat{A}\, P_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m|\right)$
$= Tr(\hat{A}\hat{\varrho})$ Pozn: $Tr(\hat{A}\hat{B}) = Tr(\hat{B}\hat{A})$ DKDÚ

Pozn: vlastní čísla $\hat{\varrho}$: $\hat{\varrho}|\varphi\rangle = \varrho|\varphi\rangle \Rightarrow \sum_m P_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m|\varphi\rangle = \varrho|\varphi\rangle$, $\langle\varphi|\cdot \Rightarrow \sum_m P_m |\langle\psi_m|\varphi\rangle|^2 = \varrho\cdot\langle\varphi|\varphi\rangle \Rightarrow \varrho \geq 0$

Obecná definice: Matice hustoty ... $\hat{\varrho}$ samosdružený operátor na $\mathcal{H}$, pozitivní ($\langle\psi|\hat{\varrho}|\psi\rangle \geq 0$, $\forall|\psi\rangle\in\mathcal{H}$),
s jednotkovou stopou $Tr\,\hat{\varrho} = \sum_n \langle\psi_n|\hat{\varrho}|\psi_n\rangle = 1$, $\forall$ ON báze $\{|\psi_n\rangle\}$

Časový vývoj $\hat{\varrho}$: pokud má tvar $\hat{\varrho} = \sum_m P_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m|$, P_m nezávisí na čase (pp., že složení směsi stavů je dáno vlastnostmi systému neměnnými s časem) $\Rightarrow$ $i\hbar\frac{d\hat{\varrho}}{dt} = \sum_m P_m \hat{H}|\psi_m\rangle\langle\psi_m| - \sum_m P_m|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\hat{H} = [\hat{H},\hat{\varrho}]$ ... obdoba klas. rovnice

Obecně postulujeme

$$\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\varrho} = [\hat{H},\hat{\varrho}]}$$

Pozn: stacionární matice hustoty $\Leftrightarrow [\hat{H},\hat{\varrho}]=0$
tj. $\hat{\varrho}$ je integrál pohybu

Střední hodnota pozorovatelné $\hat{A}$ ve stavu popsaném $\hat{\varrho}$

$$\boxed{\langle\hat{A}\rangle_\varrho = Tr(\hat{\varrho}\hat{A}) = Tr(\hat{A}\hat{\varrho})}$$

Terminologie: čisté stavy ... popsané vlnovou funkcí neboli projektorem na 1-rozměrný podprostor
smíšené stavy ... popsané maticí hustoty, která není —"—

Pravděpodobnost naměření vlastní hodnoty a pozorovatelné $\hat{A}$ na stavu popsaném maticí hustoty $\hat{\varrho}$

pp. $|a,k\rangle$ ON báze vlastního podprostoru $\hat{A}|a,k\rangle = a|a,k\rangle$

$$\Rightarrow W_{\hat{A}=a,\varrho} = \sum_{m,k} P_m |\langle\psi_m|a,k\rangle|^2 = \sum_{m,k} P_m \langle\psi_m|a,k\rangle\langle a,k|\psi_m\rangle = \sum_{m,k} P_m \langle\psi_m|a,k\rangle\langle a,k|j\rangle\langle j|\psi_m\rangle$$

j $\{|j\rangle\}$ ON báze $\mathcal{H}$

$$= \sum_j \langle j|\left(\sum_m P_m|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\right)\left(\sum_k |a,k\rangle\langle a,k|\right)|j\rangle = Tr\Big(\hat{\varrho}\underbrace{\sum_k |a,k\rangle\langle a,k|}_{\hat{P}_{A=a}}\Big)$$

projektor na vlastní podprostor $A=$

obecně def $\boxed{W_{A=a,\varrho} = Tr(\hat{\varrho}\,\hat{P}_{A=a})}$

Pozn: pokud provádíme opakovaně měření A na čistém stavu $|\psi\rangle$, dostaneme (pro počet měření $\to\infty$) smíšený stav

$$\hat{\varrho} = \sum_{a,k} |a,k\rangle|\langle a,k|\psi\rangle|^2\langle a,k| = \sum_{a,k} |a,k\rangle\langle a,k|\psi\rangle\langle\psi|a,k\rangle\langle a,k\rangle = \sum_a \hat{P}_{A=a}|\psi\rangle\langle\psi|\hat{P}_{A=a}$$

Přímým zobecněním získáváme tvar smíšeného stavu po provedení měření pozorovatelné A

$$\hat{\varrho} \to \sum_a \hat{P}_a\hat{\varrho}\hat{P}_a$$ (platí pouze pokud provádíme hodně měření a systémy nyní schopni rozřídit podle výsledků)

: 2 hladinový systém ... na cvičení

: Gibbsovo rozdělení $\varrho = c\,e^{-\frac{H(p,q)}{kT}} \to \hat{\varrho} = c\,e^{-\frac{\hat{H}}{kT}}$ pokud existuje (a má konečný Tr) (Př: 1D harm. oscilátor na cvičení)

pokud $T\to\infty \Rightarrow W_{A=a,\varrho} \approx W_{A=b,\varrho}$ pokud rank $\hat{P}_{A=a}$ = rank $\hat{P}_{A=b}$ ... všechny diskrétní stavy stejně pravděpodobné při vysoké teplotě

Přibližné metody v kvantové mechanice

JWKB aproximace (1925-26 H. Jeffreys, G. Wentzel, L. Brillouin, H.A. Kramers)

- metoda přibližného řešení 1-D bezčasové Schrödingerovy rovnice, lze ji chápat jako rozvoj v mocninách $\hbar$, proto bývá také nazývána semiklasickou aproximací

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}\psi(y) + u(y)\psi(y) = E\psi(y)}$$

pp. $u(y) = u_0 f\left(\frac{y}{a}\right)$ $\quad u_0$ ... nějaká vhodná konst. rozměru energie

a ... — " — polohy

$\Rightarrow$ přechod k bezrozměrným výrazům $x = \frac{y}{a}$, $\eta = \frac{E}{u_0}$, $\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2mu_0a^2}$ $\Rightarrow \frac{d}{dx} = a\frac{d}{dy}$

$\Rightarrow \quad -\xi^2\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + f(x)\psi(x) = \eta\psi(x)$, $\quad r(x) = \eta - f(x)$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{\xi^2}r(x)\psi(x) = 0}$$

pp. řešení ve tvaru $\psi(x) = e^{\frac{i}{\xi}\int_{x_0}^{x} q(\tilde{x})d\tilde{x}}$

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \frac{d}{dx}\left(\frac{i}{\xi}q(x)\psi(x)\right) = \frac{i}{\xi}q'(x)\psi(x) - \frac{1}{\xi^2}q^2(x)\psi(x)$$

$$\Rightarrow \left(-q^2(x) + r(x) + i\xi q'(x)\right)\psi(x) = 0, \quad \text{pp. } \psi(x) \neq 0$$

$\Rightarrow$ Riccatiho rovnice pro q:

$$\boxed{i\xi q'(x) - q^2(x) + r(x) = 0}$$

řešení hledáme ve formě řady

$$q(x) = \sum_{n=0}^{\infty}(-i\xi)^n q_n(x)$$

$$\Rightarrow i\xi\sum_{n=0}^{\infty}(-i\xi)^n\frac{dq_n}{dx} + r(x) - \underbrace{\sum_{\mu,\nu=0}^{\infty}(-i\xi)^\mu(-i\xi)^\nu q_\mu(x)q_\nu(x)}_{\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{n}(-i\xi)^{n-m}\cancel{(-i\xi)^m}\, q_{n-m}(x)q_m(x)} = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty}\left[-(-i\xi)^n\frac{dq_{n-1}}{dx} - (-i\xi)^n\sum_{m=0}^{\infty}q_m(x)q_{n-m}(x)\right] + \left[r(x) - q_0^2(x)\right] = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{q_0(x) = \pm\sqrt{r(x)} \qquad \frac{dq_{n-1}}{dx} = -\sum_{m=0}^{n}q_m(x)q_{n-m}(x),\ n \geq 1}$$

$$\rightarrow q_0(x) = \pm\sqrt{\eta - f(x)} = \pm\sqrt{\frac{E}{u_0} - \frac{u}{u_0}} = \pm\sqrt{\frac{2m(E-u)}{2mu_0}} = \pm|p(x)|$$ ... klasická hybnost ve vhodných jednotkách

když použijeme aproximaci do 2. řádu v ξ $\quad q(x) \doteq q_0(x) - i\xi q_1(x) - \xi^2 q_2(x)$, dostáváme

$\frac{dq_0}{dx} = -2q_0q_1 \Rightarrow q_1 = -\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\ln|q_0(x)| = -\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\ln|p(x)|$ $\quad q_1$ .. 1. kvantová korekce

$\frac{dq_1}{dx} = -2q_0q_2 - q_1^2 \Rightarrow q_2 = \frac{-\frac{dq_1}{dx} - q_1^2}{2q_0} = \dots$ $\quad q_2$ .. 2. — " —

aby odhad byl použitelný, musí být $|q_0| \gg \xi|q_1|$ ... není splněno pro $x_k: p(x_k)=0 \;..\; E=u(x_k)$ ..

.. body obratu v klasické mechanice ... takové body budeme umět ošetřit jinak

$q(x) \doteq q_0 - i\xi q_1 \Rightarrow \psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\xi}\int_a^x q_0(\tilde{x})d\tilde{x}\right)\exp\left(\int_a^x q_1(\tilde{x})d\tilde{x}\right)$

$\exp\left(-\frac{1}{2}(\ln|p(x)|)\Big|_a^x\right) = \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}}$ $\quad A = \sqrt{p(a)}$

$$\Rightarrow \boxed{\psi^{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}}\, e^{\pm\frac{i}{\xi}\int_a^x p(\tilde{x})d\tilde{x}}}$$

Propojení přes body obratu .. odvození se provádí analytickým přístupem dif. rce v komplexním oboru,

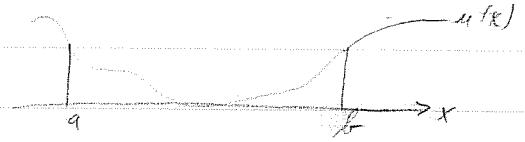
tj. "dojití" x_k komplexní rovinou

výsledky: $\psi(x) = \frac{1}{|-u(x)|^{\frac{1}{4}}}\, e^{-\int_x^{x_k}\sqrt{-u(\tilde{x})}d\tilde{x}} \longleftrightarrow \frac{2}{|u(x)|^{\frac{1}{4}}}\cos\left(\int_{x_k}^{x}\sqrt{u(\tilde{x})}d\tilde{x} - \frac{\pi}{4}\right)$

$x<x_k$, $u(x)<0$ $\qquad$ $x>x_k$, $u(x)>0$

$\psi(x) = \frac{\sin\left(\phi+\frac{\pi}{4}\right)}{|-u(x)|^{\frac{1}{4}}}\, e^{+\int_x^{x_k}\sqrt{-u(\tilde{x})}d\tilde{x}} \longleftrightarrow \frac{1}{|u(x)|^{\frac{1}{4}}}\cos\left(\int_{x_k}^{x}\sqrt{u(\tilde{x})}d\tilde{x} + \phi\right)$, $\phi \neq -\frac{\pi}{4}$

Př:



$$\kappa(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(E-u(x)) \quad \begin{matrix} >0 & a<x<b \\ <0 & x>b \vee x<a \end{matrix}$$

v řešení kvadr. integrabilní $\Rightarrow$ v $\pm\infty$ ubývající exp., v propojovacích formulích pak

vyplývá, že v (a,b)

$$\psi(x) = \frac{A}{|E-u|^{\frac{1}{4}}}\cos\left(\int_a^x\sqrt{\tfrac{2m}{\hbar^2}(E-u)}\,d\tilde{x} - \tfrac{\pi}{4}\right) \wedge \psi(x) = -\frac{B}{|E-u|^{\frac{1}{4}}}\cos\left(\int_x^b\sqrt{\tfrac{2m}{\hbar^2}(E-u)}\,d\tilde{x} - \tfrac{\pi}{4}\right)$$

$\Rightarrow$ protože tyto funkce musí být rovny $\forall x\in(a,b) \Rightarrow \cos\left(\int_a^x\sqrt{\tfrac{2m}{\hbar^2}(E-u)}\,d\tilde{x} - \tfrac{\pi}{4}\right) = \pm\cos\left(\int_x^b\sqrt{\tfrac{2m}{\hbar^2}(E-u)}\,d\tilde{x} - \tfrac{\pi}{4}\right)$

(evidentně cos nulová fce $\Rightarrow$ A, B mají stejnou komplexní fázi, a rovnají se možných hodnot $|A|=|B| \Rightarrow A=\pm B$)

dále využíváme $\cos(\;)+\cos(\;)=0$, druhé znaménko bere analogicky $\quad \cos A+\cos B = 2\cos\frac{A+B}{2}\cos\frac{A-B}{2}$

$$\Rightarrow 2\cos\tfrac{1}{2}\left(\int_a^b\sqrt{\tfrac{2m}{\hbar^2}}(E-u)dx - \tfrac{2\pi}{4}\right)\underbrace{\cos\tfrac{1}{2}\left(\int_a^x - \int_x^b\right)}_{\text{není konst. v } x}\sqrt{\tfrac{2m}{\hbar^2}(E-u)}\,dx = 0$$

$\Rightarrow$ nulový musí být první člen

$$\Rightarrow \int_a^b\sqrt{\tfrac{2m}{\hbar^2}}|E-u(x)|dx = 2\left(\tfrac{n}{2}\pi\right) + \tfrac{1}{2}\pi = \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\pi$$, n liché

obdobně pro $\cos(\;)-\cos(\;)=0 \Rightarrow 2\sin(\dots)\sin(\dots)=0 \Rightarrow \int_a^b\sqrt{\tfrac{2m}{\hbar^2}(E-u(x))}\,dx = \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\pi$, n sudé

$$\Rightarrow \int_a^b\sqrt{2m(E-u(x))}\,dx = \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\pi\hbar,\ n\in\mathbb{N}\cup\{0\}$$ připomíná Bohr-Sommerfeldova kvantovací podmínku $\int p\,dq = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar$

Použití JWKB metody pro studium rozptylu:

Hledáme řešení pro Schrödingerovu s vhodnou asymptotikou

pro $x > b$ volíme $\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar}\int_b^x p(\tilde{x})\,d\tilde{x}}$ ~ prošlá vlna

pomocí propojovacích formulí pak nalezneme řešení v intervalu (a,b) (na Cv.)

a pak v intervalu $(-\infty, a)$

$$x < a \qquad \psi(x) = \frac{C}{A\sqrt{|p(x)|}} \cdot \left(\underbrace{\left(-1+\frac{A^2}{4}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\int_x^a p(\tilde{x})\,d\tilde{x}}}_{\sim \text{odražená vlna}} + \underbrace{\left(1+\frac{A^2}{4}\right) e^{-\frac{i}{\hbar}\int_x^a p(\tilde{x})\,d\tilde{x} - \frac{i\pi}{2}}}_{\sim \text{dopadající vlna}} \right)$$

(pozor: x v dolní mezi, proto $\int_x^a \dots \sim -px$

kde $A = e^{-\frac{1}{\hbar}\int_a^b |p(x)|\,dx}$

$\Rightarrow$ koeficient průchodu $T = \left(\frac{4A}{4+A^2}\right)^2$

JWKB použitelná pro široké a výrazné bariéry (aby body obratu a jejich okolí nehrály příliš velkou roli)

$\Rightarrow \quad A \ll 1 \quad \Rightarrow \quad T \approx A^2$

$$\Rightarrow \boxed{T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(E-u(x))}\,dx\right)}$$

Variační metoda

- způsob hledání energie základního stavu a nejnižších excitovaných stavů
- často vede k lepším výsledkům než poruchový výpočet, lze použít i pokud nemáme vhodné rozdělení $\hat{H}$ na $\hat{H}_0$ a $\hat{V}$

založeno na $E_0 \le \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \quad \forall |\psi\rangle \neq \vec{0}$ $\quad E_0$... energie základního stavu

Dk: obecně viz FA, pro operátor s čistě bodovým spektrem $E_n|\psi_n\rangle = \hat{H}|\psi_n\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle \Rightarrow \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_{n,m}\langle\psi|\psi_m\rangle \underbrace{\langle\psi_m|E_n|\psi_n\rangle}_{E_n\delta_{mn}}\langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_n E_n |\langle\psi|\psi_n\rangle|^2$$

$$E_n \ge E_0 \Rightarrow \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \ge \sum_n E_0 |\langle\psi|\psi_n\rangle|^2 = E_0 \sum_n |\langle\psi|\psi_n\rangle|^2 = E_0\langle\psi|\psi\rangle \quad \text{Q.E.D.}$$

vybereme třídu vektorů $|\psi(\alpha,\beta,\dots)\rangle \in \mathcal{H}$ a provádíme minimalizaci

$$\inf_{\alpha,\beta,\dots} \frac{\langle\psi(\alpha,\beta,\dots)|\hat{H}|\psi(\alpha,\beta,\dots)\rangle}{\langle\psi(\alpha,\beta,\dots)|\psi(\alpha,\beta,\dots)\rangle} = E_{min} \qquad \left(\text{výpočet: } \frac{\partial}{\partial\alpha,\beta,\dots}(-) = 0\right)$$

$\Rightarrow E_{min} \ge E_0$ $\quad E_{min}$ považujeme za energii zákl. stavu v uvažované aproximaci

odpovídající vektor $|\psi(\alpha,\beta,\dots)\rangle$ za aproximaci odpov. vlastního vektoru $|\psi_0\rangle$

Chceme-li určit energii 1. excitovaného stavu, řešíme stejnou variační úlohu s vazbou $\langle\psi(\alpha,\beta,\dots)|\psi(\alpha_0,\beta_0,\dots)\rangle=0$
podobně postupujeme při hledání vyšších hladin.

2n: často vybíráme $|\psi(\alpha_1,\dots,\alpha_N)\rangle=\alpha_1|\varphi_1\rangle+\alpha_2|\varphi_2\rangle+\dots+\alpha_N|\varphi_N\rangle$, $[|\varphi_1\rangle,\dots,|\varphi_N\rangle]_\lambda=\tilde{\mathcal{H}}$

$\Rightarrow$ výše popsaným postupem hledáme vlastní čísla operátoru $\hat{P}_{\tilde{\mathcal{H}}}\hat{H}\hat{P}_{\tilde{\mathcal{H}}}$, kde $\hat{P}_{\tilde{\mathcal{H}}}$ je projektor na $\tilde{\mathcal{H}}$

Označíme-li vlastní čísla $\hat{P}_{\tilde{\mathcal{H}}}\hat{H}\hat{P}_{\tilde{\mathcal{H}}}$ $e_0\le e_1\le\dots\le e_{N-1}\Rightarrow \inf\frac{\langle\,|\hat{H}|\,\rangle}{\langle\,|\,\rangle}=e_0$, $e_0\ge E_0$

Lze odvodit obecnější výsledek $\forall k<N:\ e_k\ge E_k$ (každá energie započítaná podle počtu násobnost

$\Rightarrow$ prvních N energ. hladin lze odhadnout jako kořeny rovnice

$$\det\left(\langle\varphi_i|\hat{H}|\varphi_j\rangle-\lambda\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle\right)=0$$

2n: odhad chyby variačních výpočtů je v praxi obtížný
obecně ... energie bývají odhadnuty lépe než vlastní vektory

: heliový atom

$$\varphi(\vec{x}_1,\vec{x}_2,\alpha)=\frac{\alpha^3}{\pi}\exp(-\alpha(r_1+r_2))$$ ($\alpha=\frac{Z}{a}\Rightarrow$ řešení při zanedbání $\underbrace{\frac{\tilde{e}^2}{|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}}_{\hat{H}'}$

z poruchového výpočtu v ZS rovnou získáváme záměnou $\frac{Z}{a}\to\alpha$

$$\langle\varphi(\alpha)|\hat{H}'|\varphi(\alpha)\rangle=\frac{5}{8}\tilde{e}^2\alpha$$

$$\hat{H}_0=\hat{T}+\hat{V}(Z)=\hat{T}+\frac{Z}{a\alpha}\hat{V}(\alpha a)\quad\Rightarrow\quad\hat{T}+\hat{V}(\alpha a)|\varphi(\alpha)\rangle=-\tilde{e}^2\alpha^2a|\varphi(\alpha)\rangle$$

kin. energie Coulomb. potenciál

$\wedge$ platí viriálový teorém $2\langle\varphi(\alpha)|\hat{T}|\varphi(\alpha)\rangle=-\langle\varphi(\alpha)|\hat{V}(\alpha a)|\varphi(\alpha)\rangle$

$$\Rightarrow\langle\varphi(\alpha)|\hat{T}|\varphi(\alpha)\rangle=\tilde{e}^2\alpha a,\ \langle\varphi(\alpha)|\hat{V}(\alpha a)|\varphi(\alpha)\rangle=-2\tilde{e}^2\alpha^2a$$

$$\Rightarrow\langle\varphi(\alpha)|\hat{H}_0|\varphi(\alpha)\rangle=\tilde{e}^2\alpha^2a\left(1-\frac{2Z}{\alpha a}\right)$$

$\Rightarrow$

$$E(\alpha)=\tilde{e}^2\alpha\left[\alpha a-2Z+\frac{5}{8}\right],\quad\frac{\partial}{\partial\alpha}E(\alpha_0)=0\Rightarrow\alpha_0=\frac{Z-\frac{5}{16}}{a}\Rightarrow E(\alpha_0)=-\frac{\tilde{e}^2}{a}\left(Z-\frac{5}{12}\right)^2$$

$\to$ pro helium

$$\boxed{E(\alpha_0)=-77{,}5\,eV}$$ lepší shoda s experimentem než pro poruchový výpočet

n: Viriálový teorém $\hat{H}=\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M}+V(\vec{x})$, $\hat{T}=\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M}\Rightarrow\boxed{2\langle\hat{T}\rangle_\psi=\langle\hat{\vec{X}}\cdot\operatorname{grad}V\rangle_\psi,\ \forall\text{ stacionární }\psi}$

Dk: ve stacionárním stavu se s časem mění jen fáze, ve střední hodnotě se vytlučou $\to\forall$ pozorovatelnou A nezáv. na čas

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_\psi=0\Rightarrow 0=\frac{d}{dt}\langle\hat{\vec{X}}\cdot\hat{\vec{P}}\rangle_\psi=\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{\vec{X}}\hat{\vec{P}}]\rangle_\psi=\frac{i}{\hbar}\langle\hat{\vec{X}}\cdot[\hat{H},\hat{\vec{P}}]+[\hat{H},\hat{\vec{X}}]\cdot\hat{\vec{P}}\rangle_\psi=$$

$$=-\langle\hat{\vec{X}}\operatorname{grad}V\rangle_\psi+2\left\langle\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M}\right\rangle_\psi\Rightarrow 2\langle\hat{T}\rangle_\psi=\langle\hat{\vec{X}}\operatorname{grad}V\rangle_\psi$$ QED

```
> restart;
> assume(M>0);assume(E,real);assume(omega>0);
```

Castice v nekonecne hluboke potencialove jame v WKB aproximaci

```
> int(sqrt(2*M*E),x=-a..a)=(n+1/2)*Pi*h;
```

$$2\sqrt{2}\sqrt{ME}\,a=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi h$$

```
> E=solve(%,E);
```

$$E=\frac{1}{32}\frac{\pi^2 h^2(4n^2+4n+1)}{Ma^2}$$

zatimco spravny vysledek je

```
> E = 1/8*Pi^2*h^2*(n^2)/(M*a^2);
```

$$E=\frac{1}{8}\frac{\pi^2 h^2 n^2}{Ma^2}$$

Harmonicky oscilator v WKB aproximaci

```
> solve(E=1/2*M*omega^2*a^2,a);
```

$$\frac{\sqrt{2}\sqrt{ME}}{M\omega},-\frac{\sqrt{2}\sqrt{ME}}{M\omega}$$

```
> a:=sqrt(2)*sqrt(M*E)/(M*omega);
```

$$a:=\frac{\sqrt{2}\sqrt{ME}}{M\omega}$$

```
> simplify(int(sqrt(2*M*(E-1/2*M*omega^2*x^2)),x=-a..a))=(n+1/2)*P
  i*h;
```

$$\frac{E\pi}{\omega}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi h$$

```
> E=solve(%,E);
```

$$E=h\omega n+\frac{1}{2}h\omega$$

to vychazi spravne

Koeficient pruchodu obdelnikovou ~~jamou~~ bariérou (V>E)

```
> T=simplify(exp(-2/h*int(sqrt(2*M*(V-E)),x=-a..a)));
```

$$T=\mathbf{e}^{\left(-4\frac{\sqrt{2}\sqrt{M}\sqrt{-E+V}\,a}{h}\right)}$$

souhlasi se vztahem T=exp(-4*kappa*a), kde kappa=sqrt(2*M*(V-E))/h, ktery je limitou v ZS odvozeneho vyrazu pro kappa*a>>1

```
>
```

Nestacionární poruchová teorie

mp. $\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V}(t)$ pp. $\hat{H}_0$ na čase nezávisí

Obvyklá úloha: v nějakém počátečním čase t_0 je zadán stav $|\psi_0\rangle$ (často $\hat{H}_0|\psi_0\rangle = E^0|\psi_0\rangle$)

zajímá nás, v jakém stavu bude systém v čase $t_1 > t_0$

pp., že umíme vyřešit časový vývoj v případě $\varepsilon = 0$ => evoluční operátor $\hat{U}_0(t-t_0)$

a řešení hledáme ve tvaru rozvoje v ε

úlohu budeme řešit v Diracově reprezentaci $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi_D(t)\rangle = \varepsilon \hat{V}_D(t)|\psi_D(t)\rangle$, $\hat{V}_D(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)} \hat{V}(t) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}$

zavedeme evoluční operátor v Diracově reprezentaci

$\hat{U}_D(t,t_0)$: $|\psi_D(t)\rangle = \hat{U}_D(t,t_0)|\psi_D(t_0)\rangle = \hat{U}_D(t,t_0)|\psi_0\rangle$ => $i\hbar \frac{d}{dt}\hat{U}_D(t,t_0) = \varepsilon \hat{V}_D(t)\hat{U}_D(t,t_0)$

přímo z definice je vidět, že $\varepsilon = 0$ => $\hat{U}_D(t,t_0) = \mathbb{1}$ => pp. tvar $\hat{U}_D(t,t_0)$ jako poruchový rozvoj

$$\hat{U}_D(t,t_0) = \mathbb{1} + \varepsilon \hat{U}_D^{(1)}(t,t_0) + \varepsilon^2 \hat{U}_D^{(2)}(t,t_0) + \dots$$

=> dosazením do $i\hbar \frac{d}{dt}\hat{U}_D(t,t_0) = \varepsilon \hat{V}_D(t)\hat{U}_D(t,t_0)$ dostáváme

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt}\hat{U}_D^{(1)}(t,t_0) &= \hat{V}_D(t) \\ i\hbar \frac{d}{dt}\hat{U}_D^{(k)}(t,t_0) &= \hat{V}_D(t)\hat{U}_D^{(k-1)}(t,t_0), \quad k>1 \end{aligned}}$$

$$\Rightarrow \hat{U}_D^{(1)}(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \hat{V}_D(\tilde{t})\,d\tilde{t}, \quad \hat{U}_D^{(2)}(t,t_0) = -\frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t}\hat{V}_D(t)\,dt \int_{t_0}^{\tilde{t}} \hat{V}_D(\tilde{t})\,d\tilde{t}, \dots$$

Obvykle hledáme pravděpodobnost nalezení systému v nějakém stavu $|\psi_1\rangle$ (obvykle $\hat{H}_0|\psi_1\rangle = E^1|\psi_1\rangle$)

=> v nejnižším přiblížení (pp. $\varepsilon = 1$)

$$|\langle\psi_1|\psi(t_1)\rangle|^2 = |\langle\psi_1|e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_1-t_0)}|\psi_0\rangle|^2 \overset{U_D(t) = U_0^{-1}(t)U(t)}{=} |\langle\psi_1|e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t_1-t_0)}U_D(t_1,t_0)|\psi_0\rangle$$

(dá jen fázi)

$$= |\langle\psi_1|U_D(t_1,t_0)|\psi_0\rangle|^2$$

=> a) $\langle\psi_1|\psi_0\rangle = 0$: $|\langle\psi_1|\psi(t)\rangle|^2 \approx \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{t_1}\langle\psi_1|\hat{V}_D(t)|\psi_0\rangle\,dt\right|^2$

Pozn: v této aproximaci $|\langle\psi_1|\hat{U}_D|\psi_0\rangle| = |\langle\psi_0|\hat{U}_D|\psi_1\rangle|$ přechody $0\to1$ a $1\to0$ stejně pravděpodobné

b) $|\psi_1\rangle = |\psi_0\rangle$: $|\langle\psi_0|\psi(t)\rangle|^2 \approx \left|1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_1}\langle\psi_0|\hat{V}_D(t)|\psi_0\rangle\,dt\right|^2$

$= 1 + \sigma(\varepsilon^2)$, pokud chceme $\sigma(\varepsilon^2)$ korektně, musíme vzít i 2. řád a znalost $\sigma(\varepsilon^3)$

Pokud je $|\langle\psi_1|\psi(t)\rangle|^2$ malá ve srovnání s ostatními pravděp., je pro výpočet některých jevů třeba zahrnout i 2. řád poruch. teorie. Pp., že $|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle$ doplníme na ON bázi $\{|\psi_k\rangle\}_1^\infty$ $\hat{H}_0|\psi_k\rangle = E^{(k)}|\psi_k\rangle$ =>

$$|\langle\psi_1|\psi(t)\rangle|^2 \approx \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{t_1}\langle\psi_1|\hat{V}_D(t)|\psi_0\rangle\,dt - \frac{i}{\hbar}\sum_{k>1}\int_{t_0}^{t_1}\langle\psi_1|\hat{V}_D(t)|\psi_k\rangle\,dt\int_{t_0}^{t}\langle\psi_k|\hat{V}_D(\tilde{t})|\psi_0\rangle\,d\tilde{t}\right|^2$$

když předpokládáme $\int_{t_0}^{t_1}\langle\psi_1|\hat{V}_D(t)|\psi_0\rangle\,dt$ malé ve srovnání s ostatními členy

Pozn: interpretace: $\hat{V}_D(t)$ způsobuje přechody mezi stavy, při započítání korekcí výše řádu bereme do úvahy možnost, že systém přejde do určitého mezistavu a teprve poté do finálního stavu. Tyto procesy nejsou zahrnuty

rozlišit, proto sčítáme amplitudy pravděpodobností a tím pádem může docházet k interferenci.

Př: interakce záření s látkou

pp. záření popsáno klasicky pomocí intenzity el. pole (pp. dlouhé vlnové délky dopadajícího záření ve srovnání s velikostí atomů → lze pro el. pole použít klasický popis), zanedbáme magn. pole

$\Rightarrow \quad V = \vec{E} \cdot \vec{D}$ $\qquad \vec{D}$ elektrický dipólový moment atomu $\sum_j e^{(j)} \hat{\vec{X}}_j$, j .. různé část

$\vec{E}$ ... pp. lineárně polarizovaná EM vlna, vybereme vhodně soustavu souřadnou $\Rightarrow V = E(t) \cdot D$.

$\vec{D}$ ve směru $E(t)$

$\Rightarrow \langle \psi_1 | \hat{V} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{D} | \psi_0 \rangle E(t)$

$$\langle \psi_1 | \hat{V}_D(t) | \psi_0 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{D} | \psi_0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E^1 - E^0)(t - t_0)} \cdot E(t)$$

$\Rightarrow$

$$W_{\psi_0 \to \psi_1} \approx \frac{1}{\hbar^2} |\langle \psi_1 | \hat{D} | \psi_0 \rangle|^2 \left| \int_{t_0}^{t_1} e^{\frac{i}{\hbar}(E^1 - E^0)(t - t_0)} E(t)\, dt \right|^2$$

dopadající vlnu rozložíme do Fourierových složek $\Rightarrow$ energie dopadající na jednotku plochy na jednotkový rozsah frekvencí kolem ν je dle klasické elektrodynamiky

$$E_\nu = \frac{c}{2\pi} \left| \int_{t_0}^{t_1} e^{2\pi i \nu (t - t_0)} E(t)\, dt \right|^2$$

$$\Rightarrow W_{\psi_0 \to \psi_1} = 2\pi \frac{1}{c\hbar^2} |\langle \psi_1 | D | \psi_0 \rangle|^2 E_\nu \quad , \quad \nu = \frac{|E^1 - E^0|}{h}$$

$\Rightarrow$ pravděpodobnost závisí pouze na energii záření o frekvenci blízké $\frac{1}{h}$ · rozdíl energií obou stavů

$\Rightarrow$ Bohrova frekvenční podmínka (ve "staré QM")

výsledky lze interpretovat jako pravděpodobnost stimulované absorpce a emise. Vidíme, že v použité aproximaci jsou pravděpodobnosti stimulované emise a absorpce stejné

V použité aproximaci nelze popsat spontánní, nestimulovanou emisi.

Že uvedené vztahy pro $\hat{U}_D^{(k)}(t, t_0)$ lze též přepsat po zavedení operátoru časového uspořádání T:

$$T(\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)) = \hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2), \quad t_1 > t_2$$
$$= \hat{B}(t_2)\hat{A}(t_1), \quad t_2 > t_1$$

přepsání $\displaystyle\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{N-1}} dt_N \underbrace{\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\ldots\hat{A}(t_N)}_{T(\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\ldots\hat{A}(t_N))} = \frac{1}{N!} \int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_N\, T(\hat{A}(t_1)\ldots\hat{A}(t_N))$

např. $\displaystyle\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, T(\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)) = \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_2}^{t} dt_1\, T(\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2))$ zde ani není nutné $T(\cdot)$, pouze zaměněno pořadí integrace, dále přejmenuji $t_1 \leftrightarrow t_2$ v integracích a ponechám v $T(\ )$

$$\Rightarrow \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, T(\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, T(\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2))$$

$\Rightarrow$ lze formálně zavést $T\exp\left(\int_{t_0}^{t} d\tilde{t}\ \hat{A}(\tilde{t})\right)$

$$T\exp\left(\int_{t_0}^{t} d\tilde{t}\ \hat{A}(\tilde{t})\right) = \mathbb{1} + \int_{t_0}^{t} dt_1 \hat{A}(t_1) + \frac{1}{2!}\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t} dt_1 dt_2\ T(\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)) + \ldots + \frac{1}{N!}\int_{t_0}^{t}\ldots\int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots dt_N\ T(\hat{A}(t_1)\ldots\hat{A}(t_N)) + \ldots$$

a pak $\boxed{\hat{U}_D(t,t_0) = T\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{V}_D(\tilde{t})\,d\tilde{t}\right)}$

Pozn: Uvědomte si, že obecně $[\hat{V}_D(t_1), \hat{V}_D(t_2)] \neq 0$ pro $t_1 \neq t_2$, proto bylo nutno zavést $T(\cdot)$

Formálně lze též dosadit $\hat{H}_0 = 0$ $\Rightarrow$ máme vzorec pro evoluční operátor

$$\boxed{\hat{U}(t,t_0) = T\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(\tilde{t})\,d\tilde{t}\right)}$$

Pokud $\hat{H}(\tilde{t}) = \hat{H}$, $\forall\tilde{t}$ $\Rightarrow$ lze exponenciálu za T a $\hat{H}$ vytáhnout před $\int$ $\Rightarrow$ $\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$ viz dříve

Pozn: Pokud V nezávisí explicitně na čase $\Rightarrow$ $\langle\psi_1|\hat{V}_D(t)|\psi_0\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}t(E_1-E_0)}\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_0\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{|\langle\psi_1|\psi(t)\rangle|^2 \approx \frac{1}{\hbar^2}\left|\left(\int_{t_0}^{t_1} e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)t}\,dt\right)\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_0\rangle\right|^2} =$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}|\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_0\rangle|^2 \cdot \left|\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)(t_1-t_0)/\hbar} - 1}{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)/\hbar}\right|^2$$

$$\boxed{= 2\,|\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_0\rangle|^2\ \frac{1-\cos\left((E_1-E_0)\frac{t_1-t_0}{\hbar}\right)}{(E_1-E_0)^2}}$$

$\Rightarrow$ pravděpodobnost přechodu do stavu ψ_1 počítaná v prvním řádu poruchové teorie omezená shora konstantou $4|\langle\psi_1|\hat{V}|\psi_0\rangle|^2\frac{1}{(E_1-E_0)^2}$

$\Rightarrow$ pravděpodobnost přechodu do stavu s výrazně odlišnou energií je malá

Př: nabitá částice v krabici o rozměrech $a\times b\times c$

v čase $t=0$ vypneme elektr. pole ve směru osy x $V = -e\,E\cdot x$, v čase $t=T$ jej vypneme.

V čase $t<0$ je systém ve stacionárním stavu

$$\phi_{qrs}(\vec{x}) = \left(\frac{8}{abc}\right)^{1/2}\sin\frac{q\pi x}{a}\sin\frac{r\pi y}{b}\sin\frac{s\pi z}{c},\quad q,r,s\in\mathbb{Z}_+$$

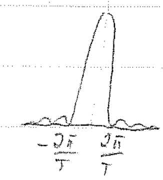
(ověřte normalizaci)

Jakou pravděpodobností bude systém v čase $t>T$ ve stavu ϕ_{QRS} ?

Řešení: $W_{gr\lambda \to QRS} \doteq \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^T dt' (\phi_{QRS}, -eEx\,\phi_{gr\lambda}) e^{i(E_{QRS}-E_{gr\lambda})t'/\hbar} \right|^2$

$$= \frac{e^2E^2}{\hbar^2} |I(\omega)|^2 (\phi_{QRS}, x\phi_{gr\lambda}), \quad \omega = \frac{E_{QRS}-E_{gr\lambda}}{\hbar}$$

kde $I(\omega) = \frac{4}{\omega^2} \sin^2 \frac{1}{2}\omega T \quad \left(= \frac{4}{\omega^2}(1-\cos\omega T)\right)$ $\qquad I(\omega)$:



$$(\phi_{QRS}, x\phi_{gr\lambda}) = \delta_{R\lambda}\delta_{S\lambda} \cdot \int_0^a \left(\frac{2}{a}\right) x \sin\frac{Q\pi x}{a} \sin\frac{g\pi x}{a}\,dx$$, součtové vzorce, per partes

$$= \delta_{R\lambda}\delta_{S\lambda} \cdot \frac{-8aQg}{\pi^2(Q^2-g^2)^2}$$ pokud $Q-g$ je liché

$= 0$ $\quad Q-g$ sudé

=> systém může vlivem časově proměnné poruchy přejít do stavu s Q lišícím se o liché číslo nebo zůstat v původním stavu (viz 0. řád)

Pozn: pokud T je velké, je $I(\omega)$ nezanedbatelné pouze v malém okolí kolem 0 => energie se prakticky nezmění, pokud T je malé => $I(\omega)$ je dost široké, tj. nezanedbatelné pro velký počet možných energií. Toto je možné chápat jako projev „principu neurčitosti energie": Při měření trvajícím čas T jsme schopni určit energii s přesností maximálně řádu $\hbar/T$.

=> neurčitost v určení hmotnosti (klidové energie) nestabilních částic

=> možnost tunelového jevu

Pozn.: náhlá změna hamiltoniánu: v čase $t < t_0$ systém popsaný na čase nezávislým H_0 ... vl. stavy Φ_i

$t > t_0$ $\qquad H_0'$ ... vl. stavy Φ_i'

sledujeme časový vývoj ze stavu Φ_i v čase $t_1 < t_0$, v čase $t_2 > t_0$ chceme vědět, s jakou pravděp. naměříme E_j'

$$\Psi(t) = \begin{cases} \Phi_i\, e^{-i\frac{E_i t}{\hbar}}, & t < t_0 \\ \sum \Phi_j' b_j\, e^{-i\frac{E_j'(t-t_0)}{\hbar}} \end{cases}$$, v čase musí být Ψ spojitá (jinak $\frac{\partial}{\partial t}\Psi \sim \delta(\,)$, která se nemá s čím kompenzovat) => $b_k = (\phi_k', \phi_i)\, e^{-i\frac{E_i t_0}{\hbar}}$

$$\Rightarrow W_{E=E_j'} = |b_j|^2 = |(\phi_j', \phi_i)|^2$$

Př.: 1D částice v ∞-hluboké potenciálové jámě, náhle zdvojnásobíme šířku jámy. S jakou pravděp. systém, který byl na počátku ve stavu s nejnižší energií, v něm zůstane? $\phi_0 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{\pi x}{a}$, $\phi_0' = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\frac{\pi x}{2a}$, $\boxed{W = \frac{32}{9\pi^2}}$

rozpad tritia: $^3H \to {}^3He + e^- + \nu$, uvolní se dost energie => e^- odletí, zbude iont $^3He^+$, s jakou pravděp. zůstane jeho e^- v nejnižším stavu?

(jako jádra)

Řešení: náhlé zdvojnásobení náboje jádra => $\phi_0(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$, $\phi_0'(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{(\frac{a_0}{2})^3}} e^{-\frac{2r}{a_0}}$, $\boxed{W = \frac{512}{729} \lesssim \frac{3}{4}}$

excitované e^- (tj. asi $\frac{1}{4}$ případů) se postupně vrací do zákl. stavu => ^3H svítí

Propagátor, Greenova funkce, dráhový integrál

Propagátor .. maticový element evolučního operátoru

$$K(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0) \equiv \langle \vec{x}_1, t_1 \mid \vec{x}_0, t_0 \rangle = \langle \vec{x}_1 | \hat{U}(t_1, t_0) | \vec{x}_2 \rangle$$

$\Rightarrow$ *chceme-li najít řešení* $\psi(\vec{x}, t)$ *Schrödingerovy rovnice s počáteční podmínkou* $\psi_0(\vec{x}, t_0)$ *při znalosti propagátoru, dostáváme*

$$\boxed{\psi(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \psi_0 \rangle = \int d^3y \; \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{y} \rangle \langle \vec{y} | \psi_0 \rangle =}$$

$$\boxed{= \int d^3y \; K(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0) \, \psi_0(\vec{y}, t_0)}$$

Propagátor vyhovuje též Schröd. rovnici s jistou počáteční podmínkou:

$$ik \frac{d}{dt} K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \langle \vec{x} | ik \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}_0 \rangle = \langle \vec{x} | \hat{H} \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}_0 \rangle =$$

$$= \int d^3y \; \langle \vec{x} | \hat{H} | \vec{y} \rangle \langle \vec{y} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}_0 \rangle$$

$$= \int d^3y \; \langle \vec{x} | \hat{H} | \vec{y} \rangle \, K(\vec{y}, t; \vec{x}_0, t_0)$$

je-li $\hat{H} = -\frac{k^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}, t)$

$$\Rightarrow \langle \vec{x} | \hat{H} | \vec{y} \rangle = -\frac{k^2}{2m} \Delta \left(\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \right) + V(\vec{x}, t) \, \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y})$$

tj. po přetažení derivace z $\delta^{(3)}(\,)$ *na* $K(\cdot, \cdot)$ *dostáváme*

$$ik \frac{d}{dt} K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \int d^3y \; \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \left(-\frac{k^2}{2m} \right) \Delta_y K(\vec{y}, t; \vec{x}_0, t_0)$$

$$+ \int d^3y \; V(\vec{x}) \, \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \, K(\vec{y}, t; \vec{x}_0, t_0)$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{ik \frac{d}{dt} K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = -\frac{k^2}{2m} \Delta K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) + V(\vec{x}, t) \, K(\vec{x}, t; \vec{y}_0, t_0)}$$

$K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0)$ *je* **řešením** *Schrödingerovy rovnice s počáteční podmínkou*

$$\boxed{K(\vec{x}, t_0; \vec{x}_0, t_0) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_0)} \qquad \forall \vec{x}_0 \in \mathbb{R}^3$$

Často je vhodné uvažovat propagátory respektující kauzalitu, tj. nulové pro $t_0 > t_1$, resp. $t_1 > t_0$

Pozn: $\Theta(t) = 1, \forall t \geq 0 \qquad \Theta(t) = 0, \forall t < 0$

Retardovaný propagátor $K^{(+)}(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0) = \Theta(t_1 - t_0)\, K(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0)$

Advancovaný —"— $K^{(-)}(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0) = \Theta(t_0 - t_1)\, K(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0)$

Retardovaný, resp. advancovaný propagátor jsou Greenovými funkcemi Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} K^{(\pm)}(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \underbrace{\pm i\hbar \delta(t - t_0)\, K(\ldots)}_{\pm i\hbar \delta(t-t_0) K(\vec{x}, t_0; \vec{x}_0, t_0) = \pm i\hbar \delta(t-t_0)\, \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_0)} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta K^{(\pm)}(\ldots) + V(\vec{x}, t) K^{\pm}(\ldots)$$

$$\Rightarrow \boxed{\left(i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H}\right) K^{(\pm)}(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \pm i\hbar \delta(t - t_0)\, \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_0)}$$

Volná částice $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$

$$K_{byb}(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0) \equiv \langle \vec{p}, t \,|\, \vec{p}_0, t_0 \rangle \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} K_{byb}(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0) = \frac{\vec{p}^2}{2m} K_{byb}(\ldots)$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} K_{byb}(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t - t_0)}\, \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}_0) \\ K^{(\pm)}_{byb}(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0) &= \Theta(\pm(t - t_0))\, \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t - t_0)} \end{aligned}}$$

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}}, \qquad K^{(\pm)}(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \int \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle K^{(\pm)}_{byb}(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0) \langle \vec{p}_0 | \vec{x}_0 \rangle \, d^3p \, d^3p_0$$

$$\Rightarrow K^{(\pm)}(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \Theta(\pm(t - t_0)) \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \, d^3p_0 \, \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}_0)\, e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t - t_0)}\, e^{-i\frac{\vec{p}_0\vec{x}_0}{\hbar}}$$

$$= \Theta(\pm(t - t_0)) \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{x} - \vec{x}_0)\vec{p}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}(t - t_0)}$$

Tento integrál nekonverguje, což ale není překvapivé – i na levé straně máme zobecněnou funkci

Výpočet integrálu je možné

(a) provést ve smyslu zobecněných funkcí – vynásobit testovací funkcí a integrovat přes $\vec{x}, \vec{x}_0 \ldots$

(b) regularizovat přidáním malého parametru do exponentu $\frac{1}{2m} \to \frac{1}{2m} \mp i\varepsilon$ (znaménko dle $\Theta(\pm(t-t$

$\Rightarrow$ integrál je konvergentní Gaussovský typu $\int dx\, e^{-ax^2 + bx} = e^{b^2/4a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$, $\mathrm{Re}\, a > 0$,

nakonec ve výsledku je možné provést limitu $\varepsilon \to 0$

$$\Rightarrow K^{(\pm)}(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\Theta(\pm(t - t_0))}{(2\pi\hbar)^3} \left(\sqrt{\frac{\pi}{\frac{t}{i\hbar}\left(\frac{1}{2m} \pm i\varepsilon\right)(t - t_0)}} \right)^3 e^{-\frac{(\vec{x} - \vec{x}_0)^2}{4\hbar^2 \cdot \left(\frac{t}{i\hbar}\right)\left(\frac{1}{2m} \mp i\varepsilon\right)(t - t_0)}}$$

$$\boxed{K^{(\pm)}(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \Theta(\pm(t - t_0)) \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t_0)}\right)^{3/2} e^{\frac{i m (\vec{x} - \vec{x}_0)^2}{2\hbar (t - t_0)}}}$$

Na cvičení rozplývání vlnového balíku v 1-D (vojní viz R von Unge)

Feynmanův integrál

Při výpočtu propagátoru je možné postupovat v obecném případě následovně:

$\langle \vec{x}_f, t_f | \vec{x}_0, t_0 \rangle = \langle \vec{x}_f | \hat{U}(t_f, t_0) | \vec{x}_0 \rangle$, interval (t_0, t_f) rozdělíme na $N+1$ podintervalů

$\Delta t = \frac{t_f - t_0}{N+1}$, $t_k = t_0 + k\Delta t$ a vložíme $\mathbb{1} = \int d^3x\, |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|$ v časech t_k

$$= \int d^3x_1 \dots d^3x_N \; \langle \vec{x} | U(t_f, t_N) | \vec{x}_N \rangle \langle \vec{x}_N | U(t_N, t_{N-1}) | \vec{x}_{N-1} \rangle \dots$$
$$\dots \langle \vec{x}_2 | U(t_2, t_1) | \vec{x}_1 \rangle \langle \vec{x}_1 | U(t_1, t_0) | \vec{x}_0 \rangle$$

pokud Δt je velice malé, lze aproximovat

$$U(t_k, t_{k-1}) \approx \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \, \hat{H}(t_k)$$

Za předpokladu, že $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{x}, t)$ dostáváme

$$\langle \vec{x}_k | U(t_k, t_{k-1}) | \vec{x}_{k-1} \rangle \approx \delta^{(3)}(\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}) - \frac{i}{\hbar} \Delta t \langle \vec{x}_k | \hat{V}(t_k) | \vec{x}_{k-1} \rangle$$
$$- \underbrace{\frac{i}{\hbar} \Delta t \int \langle \vec{x}_k | \vec{p} \rangle \frac{\vec{p}^2}{2m} \langle \vec{p} | \vec{x}_{k-1} \rangle \, d^3p}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \Delta t \int \frac{\vec{p}^2}{2m} e^{i \frac{(\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})\vec{p}}{\hbar}} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

použijeme integrální vyjádření δ-funkce $\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i \frac{(\vec{x}-\vec{y})\vec{p}}{\hbar}}$

$\Rightarrow$

$$\langle \vec{x}_k | U(t_k, t_{k-1}) | \vec{x}_{k-1} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i \frac{(\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})\vec{p}}{\hbar}} \underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t \left(V(\vec{x}_k, t_k) + \frac{\vec{p}^2}{2m} \right)\right)}$$

použijeme opět odhad $e^{+a} = 1 + a$, $|a| \ll 1$

$$= \int \frac{d^3p_k}{(2\pi\hbar)^3} e^{i \frac{(\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})\vec{p}_k}{\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \, H(p_k, x_k)}$$

, kde $H(p_k, x_k)$ ... klasický hamiltonián, nikoliv operátor !

$\Rightarrow$

$$\langle \vec{x}_f, t_f | \vec{x}_0, t_0 \rangle \approx \int \frac{d^3p_{N+1}}{(2\pi\hbar)^3} d^3x_N \frac{d^3p_N}{(2\pi\hbar)^3} \dots d^3x_1 \frac{d^3p_1}{(2\pi\hbar)^3} \; e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{N+1} (\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})\vec{p}_k - \frac{i}{\hbar} \Delta t \sum_{k=1}^{N+1} H(\vec{p}_k, \vec{x}_k)}$$

kde jsme zavedli označení $\vec{x}_f \equiv \vec{x}_{N+1}$

Použité odhady jsou tím přesnější, čím je Δt menší $\Rightarrow$ pokud existuje limita $\Delta t \to 0$, tj. $N \to \infty$, bude platit rovnost

$$\boxed{\langle \vec{x}_f, t_f | \vec{x}_0, t_0 \rangle = \lim_{N \to \infty} \int \prod_{k=1}^{N+1} \frac{d^3p_k}{(2\pi\hbar)} \prod_{k=1}^{N} d^3x_k \; e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{N+1} \left(\left(\frac{\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}}{\Delta t} \right) \vec{p}_k - H(\vec{p}_k, \vec{x}_k) \right) \Delta t}}$$

kde $\Delta t = \frac{t_f - t_0}{N+1}$

Tento integrál lze interpretovat v $\lim_{N\to\infty}$ jako integrál přes všechny možné trajektorie ve fázovém prostoru spojující zadanou počáteční a koncovou konfiguraci. Problém, zda limita existuje a zda nezávisí na případném jiném, neekvidistantním rozdělení intervalu (t_0, t_f) se obvykle ve fyzice zanedbává. Zavádí se označení

$$\mathcal{D}\vec{p}\,\mathcal{D}\vec{x} = \text{"}\lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N+1} \frac{d^3 p_k}{(2\pi\hbar)^3} \prod_{k=1}^{N} d^3 x_k \text{"}$$

a v exponentu se Riemannova suma nahrazuje integrálem: $\frac{\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}}{\Delta t} \longrightarrow \dot{\vec{x}}_k$

$$\sum_{k=1}^{N} \left(\frac{\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}}{\Delta t} \vec{p}_k - H(\vec{p}_k, \vec{x}_k) \right) \Delta t \longrightarrow \int \left(\dot{\vec{x}}(t)\vec{p}(t) - H(\vec{p}(t), \vec{x}(t)) \right) dt$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\langle \vec{x}, t_f | \vec{x}_0, t_0 \rangle = \int \mathcal{D}\vec{p}\,\mathcal{D}\vec{x}\; e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f} (\dot{\vec{x}}\vec{p} - H(\vec{p}, \vec{x}))\, dt}}$$

Tento vzorec lze stejným postupem odvodit, pokud má H tvar $H = f(\vec{p}) + g(\vec{x})$. Pokud v H máme výrazy tvaru $\vec{x}\cdot\vec{p}$ apod, které v operátorovém formalismu vedou na problém uspořádání, je nutno dávat pozor na indexy (např. $p_k x_k$ vs. $p_{k+1} x_k$ apod.). Pokud H je kvadratické v $\vec{p}$, tj. $H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{x})$, lze provést Gaussovské integrace přes $\prod_{k=1}^{N+1} \frac{d^3 p_k}{(2\pi\hbar)^3}$. Integrály je třeba, podobně jako při výpočtu propagátoru, regularizovat $\vec{p}^{\,2}/2m \longrightarrow (1/2m - i\varepsilon)\vec{p}^{\,2}$, dostáváme Gaussovské integrály

$$\int \frac{d^3 p_k}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}}{\Delta t} p_k - \left(\frac{1}{2m} - i\varepsilon\right)\vec{p}_k^{\,2}\right)\Delta t} = \left(\frac{2m\pi\hbar}{i\Delta t}\right)^{3/2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{2i\, m(\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})^2}{4\hbar\Delta t}}$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{3/2} e^{i\frac{m(x_k - x_{k-1})^2}{2\hbar\Delta t}} \quad \Longrightarrow$$

$$\langle \vec{x}, t_f | \vec{x}_0, t_0 \rangle = \underbrace{\lim_{N\to\infty} \int \left(\prod_{k=1}^{N} d^3 x_k\right) \left(\frac{m}{2\pi\hbar\, i\Delta t}\right)^{3(N+1)}}_{\text{ozn. } \int \mathcal{D}\vec{x} \text{ (někdo } \lim_{N\to\infty} (\;)^{3(N+1)} \text{ ozn. } \mathcal{N} \text{ a ponechá mimo } \int \mathcal{D}\vec{x})} e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{N+1}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\Delta t}\right)^2 - V(x_k)\right)\Delta t}$$

$$= \boxed{\int \mathcal{D}\vec{x}\; e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f} \mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}})\, dt} = \int \mathcal{D}\vec{x}\; e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}]}}$$

$\int \mathcal{D}\vec{x}$ interpretujeme jako integrál přes všechny možné trajektorie spojující počáteční bod $\vec{x}_0$ v čase t_0 a koncový bod $\vec{x}$ v čase t_f v konfiguračním prostoru, $S[\vec{x}]$.

Výhody a nevýhody dráhového integrálu

- Zápis pomocí dráhového integrálu umožňuje celkem snadno rekonstruovat poruchový rozvoj pro propagátor zadaného fyzikálního systému a výsledky (maticové elementy evolučního operátoru) souhlasí s výsledky získanými tradičním (operátorovým přístupem).

- Naší snahou ve fyzikálně zajímavých případech dokázáno, že $\mathcal{D}\vec{x}$ je míra v matematickém slova smyslu $\Rightarrow$ z matematického hlediska jsou výpočty pomocí dráhových integrálů nekorektní.

- Obdobná tvrzení platí i v kvantové teorii pole: Co lze kvantovat kanonickým (operátorovým) přístupem, lze popsat i pomocí dráhového (funkcionálního) integrálu a fyzikálně měřitelné výsledky obou postupů jsou stejné. Ve většině případů je ale postup pomocí dráhového integrálu podstatně snazší (např. kalibrační teorie ve Stand. modelu) a řadu systémů fyzikově jinak než pomocí funkcionálního integrálu popsat neumí. Proto se funkcionální integrál v QFT všeobecně používá navzdory problémům s matem. rigorózností. Lze jen doufat, že v budoucnu bude nalezena matematicky korektní formulace.

Klasická limita

Pro většinu trajektorií existuje z makroskopického hlediska nepatrně odlišná trajektorie taková, že $S_1 - S_2 = \pi\hbar$, tj. odpovídající příspěvky $\langle \vec{x}_f, t_f | \vec{x}_0, t_0 \rangle$ se vyruší ($e^{i\pi} = -1$).
Z makroskopického hlediska k dráhovému integrálu proto přispívají hlavně trajektorie blízké extremálám $x_{cl}(t)$ určeným $\delta S[x_{cl}(t)] = 0$ (trajektorie blízké x_{cl} mají dílky $\delta S[x_{cl}(t)] = 0$ hodnoty akce velmi blízké $S[x_{cl}(t)] \Rightarrow$ jejich příspěvky se nemají s čím odečíst). Proto lze hradit, že v klasické situaci pohyb probíhá po trajektoriích velmi blízkých extremálám akce.

Volná částice

Pozn:
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda\left[(x_1-a)^2+(x_2-x_1)^2+\dots+(b-x_n)^2\right]}\, dx_1 \dots dx_n = \sqrt{\frac{\pi^n}{(n+1)\lambda^n}}\, e^{-\frac{\lambda}{n+1}(b-a)^2}$$

Dk indukcí

1) $n=1$ $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda[(x_1-a)^2+(b-x_1)^2]}dx_1 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda(a^2+b^2+2x_1^2-2(a+b)x_1)}dx_1 = e^{-\lambda(a^2+b^2)} e^{\lambda\frac{(a+b)^2}{2}}\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} = \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}}e^{-\lambda\frac{(a-b)^2}{2}}$ o

2) $n\to n+1$ $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda[(x_1-a)^2+(x_2-x_1)^2+\dots+(b-x_{n+1})^2]}dx_1\dots dx_{n+1} \overset{\text{ind. pp.}}{=} \sqrt{\frac{\pi^n}{(n+1)\lambda^n}}\int e^{-\frac{\lambda}{n+1}(x_{n+1}-a)^2-\lambda(b-x_{n+1})^2}$ c

$= \sqrt{\frac{\pi^n}{(n+1)\lambda^n}}\int e^{-\lambda\frac{n+2}{n+1}x_{n+1}^2 - \frac{\lambda}{n+1}a^2 - \lambda b^2 + 2x_{n+1}(\frac{\lambda}{n+1}a+\lambda b)}dx_{n+1}$

$= \sqrt{\frac{\pi^n}{(n+1)\lambda^n}}\sqrt{\frac{\pi(n+1)}{(n+2)\lambda}}\, e^{-\frac{\lambda}{n+1}a^2-\lambda b^2+\left(\frac{\lambda}{n+1}a+\lambda b\right)^2\frac{n+1}{(n+2)\lambda}}$

$-\frac{\lambda}{n+1}a^2-\lambda b^2+\frac{\lambda a^2}{(n+1)(n+2)}+\frac{2\lambda ab}{n+2}+\lambda b^2\frac{(n+1)}{n+2} = -\frac{\lambda}{n+2}\left(a^2\frac{n+2-1}{n+1}-2ab+b^2(n+1)\right)$

$= \sqrt{\frac{\pi^{n+1}}{(n+2)\lambda^{n+1}}}\, e^{-\frac{\lambda}{n+2}(a-b)^2}$ o.k. QED

$K_{vol}(\vec{x},t_f;\vec{x}_0,t_0) = \lim_{N\to\infty}\int\prod_{k=1}^{N} d^3x_k \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{3(N+1)} e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{N+1}\frac{m}{2\Delta t}(\vec{x}_k-\vec{x}_{k-1})^2}$

regularizujeme $m\to m+i\varepsilon$ $\Rightarrow$ ve výsledku $\lambda = -\frac{i(m+i\varepsilon)}{2\hbar\Delta t}\Big|_{\varepsilon=0} = -\frac{im}{2\hbar\Delta t}$ $\Rightarrow$

$K_{vol}(\vec{x},t_f;\vec{x}_0,t_0) = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{3(N+1)}{2}}\left(\frac{i^N\pi^N}{(N+1)\frac{m^N}{2^N\hbar^N(\Delta t)^N}}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im(\vec{x}-\vec{x}_0)^2}{2\hbar\underbrace{\Delta t(N+1)}_{t_f-t_0}}}$

$= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\underbrace{(N+1)\Delta t}_{t_f-t_0}}\right)^{3/2} e^{\frac{im(\vec{x}-\vec{x}_0)}{2\hbar(t_f-t_0)}} = \boxed{\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_0)}\right)^{3/2} e^{i\frac{m(\vec{x}-\vec{x}_0)^2}{2\hbar(t_f-t_0)}}}$

v souladu s důvěrným výpočtem v operátorovém formalismu

případě, že $H = \frac{\vec{p}^2}{2m}+V(\vec{x})$, lze V chápat jako poruchu εV a rozvinout

$K(\vec{x},t_f;\vec{x}_0,t_0) = K_{vol}(\vec{x},t_f;\vec{x}_0,t_0) + \varepsilon K_1(\vec{x},t_f;\vec{x}_0,t_0) + \varepsilon^2 K_2(\vec{x},t_f;\vec{x}_0,t_0)+\dots$

označíme $\mathcal{N} = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{3/2}$ a rozvineme $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\sum_k V(x_k)\Delta t\right)$ do Taylorovy řady

$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\sum_k V(x_k)\Delta t\right) = 1-\frac{i}{\hbar}\sum_k V(x_k)\Delta t - \frac{1}{2\hbar^2}\sum_{jk} V(x_j)V(x_k)(\Delta t)^2+\dots$

Derivujeme

$K_1 = \dots$ $K_2 = \dots$ $\dots$

Odvozeni propagatoru 1D harmonickeho oscuilatoru z drahoveho integralu

L=1/2*m*diff(x,t)^2-1/2*m*omega^2*x^2

Nejprve rozdelime popis trajektorie na "klasickou cast"-reseni klasickych pohyb. rovnic s danymi okrajov. podminkami, a kovant. korekci:

x(t)=x_cl(t)+y(t).

Po dosazeni do akce a roznasobeni kvadratu diky pohybovym rovnicim vypadne clen obsahujici souciny x_cl a x(t) (x_cl(t) je extremalou)-> S se rozpada na soucet dvou casti, exp(I/hbar*S_cl) vytkneme pred drahovy integral (nezavisi na x(t)), v drahovem integralu integrujeme pres trajektorie zacinajici v y(t0)=0 a koncici v y(t1)=0..drahovy integral je jiz funkce jen casu, z invarianci L vuci cas. translacim = F(t1-t0). Dale urcime hodnotu akce na klasicke trajektorii a F(t1-t0).

```
> restart;
> interface(showassumed=0);
> assume(x1,real);assume(x0,real);assume(t1,real);assume(t0,real);
  assume(omega,real);assume(hbar,real);assume(m,real);assume(x0t,r
  eal);
```

Akce podel klasicke trajektorie

```
> x:=t->a*sin(omega*t)+b*cos(omega*t);
```

$$x := t \to a \sin(\omega\, t) + b \cos(\omega\, t)$$

```
> x(t1)=x1,x(t0)=x0;
```

$$a \sin(\omega\, t1) + b \cos(\omega\, t1) = x1,\ a \sin(\omega\, t0) + b \cos(\omega\, t0) = x0$$

```
> solve({x(t1)=x1,x(t0)=x0},{a,b});
```

$$\left\{b = \frac{\sin(\omega\, t1)\, x0 - x1 \sin(\omega\, t0)}{\sin(\omega\, t1)\cos(\omega\, t0) - \cos(\omega\, t1)\sin(\omega\, t0)},\ a = \frac{\cos(\omega\, t0)\, x1 - x0 \cos(\omega\, t1)}{\sin(\omega\, t1)\cos(\omega\, t0) - \cos(\omega\, t1)\sin(\omega\, t0)}\right\}$$

```
> subs(%,a*sin(omega*t)+b*cos(omega*t));
```

$$\frac{(\cos(\omega\, t0)\, x1 - x0 \cos(\omega\, t1))\sin(\omega\, t)}{\sin(\omega\, t1)\cos(\omega\, t0) - \cos(\omega\, t1)\sin(\omega\, t0)} + \frac{(\sin(\omega\, t1)\, x0 - x1 \sin(\omega\, t0))\cos(\omega\, t)}{\sin(\omega\, t1)\cos(\omega\, t0) - \cos(\omega\, t1)\sin(\omega\, t0)}$$

```
> x:=t->(cos(omega*t0)*x1-x0*cos(omega*t1))*sin(omega*t)/(sin(omeg
  a*t1)*cos(omega*t0)-cos(omega*t1)*sin(omega*t0))-(-sin(omega*t1)
  *x0+x1*sin(omega*t0))*cos(omega*t)/(sin(omega*t1)*cos(omega*t0)-
  cos(omega*t1)*sin(omega*t0));
```

$$x := t \to \frac{(\cos(\omega\, t0)\, x1 - x0 \cos(\omega\, t1))\sin(\omega\, t)}{\sin(\omega\, t1)\cos(\omega\, t0) - \cos(\omega\, t1)\sin(\omega\, t0)} - \frac{(-\sin(\omega\, t1)\, x0 + x1 \sin(\omega\, t0))\cos(\omega\, t)}{\sin(\omega\, t1)\cos(\omega\, t0) - \cos(\omega\, t1)\sin(\omega\, t0)}$$

Kontrola okrajovych podminek

```
> simplify({x(t1)-x1,x(t0)-x0});
```

$$\{0\}$$

Lagrangian podel skutecne trajektorie

```
> L:=t->1/2*m*diff(x(t),t)^2-1/2*m*omega^2*x(t)^2;
```

$$L := t \to \frac{1}{2} m\, \mathrm{diff}(\mathrm{x}(t), t)^2 - \frac{1}{2} m\, \omega^2\, \mathrm{x}(t)^2$$

Akce podel skutecne trajektorie

```
> S_cl:=simplify(convert(int(L(t),t=t0..t1),exp));
```

$$S\_cl := \frac{\frac{1}{2} I (e^{(2 I \omega t1)} x0^2 + e^{(2 I \omega t1)} x1^2 - 4\, x0\, x1\, e^{(I \omega (t0+t1))} + e^{(2 I \omega t0)} x0^2 + e^{(2 I \omega t0)} x1^2)\, \omega\, m}{-e^{(2 I \omega t0)} + e^{(2 I \omega t1)}}$$

Jeste upravime

```
> S_cl:=simplify(numer(S_cl)/exp(I*omega*(t0+t1)))/simplify(denom(
  S_cl)/exp(I*omega*(t0+t1)));
```

$$S\_cl := \frac{1}{2} \frac{\omega\, m\, (\cos(\omega\,(t1-t0))\, x0^2 + \cos(\omega\,(t1-t0))\, x1^2 - 2\, x0\, x1)}{\sin(\omega\,(t1-t0))}$$

```
> S_cl:=(x1,x0)->m*omega/2/sin(omega*(t1-t0))*((x1^2+x0^2)*cos(ome
  ga*(t1-t0))-2*x0*x1);
```

$$S\_cl := (x1, x0) \to \frac{1}{2} \frac{m\, \omega\, ((x1^2 + x0^2) \cos(\omega\,(t1-t0)) - 2\, x0\, x1)}{\sin(\omega\,(t1-t0))}$$

Dale napiseme tvar propagatoru
(neuvadim explicitne casy v K(..), spravne ma byt K(x1,t1;x0,t0))

```
> K:=(x1,x0)->exp(I/hbar*S_cl(x1,x0))*F(t1-t0);
```

$$K := (x1, x0) \to e^{\left(\frac{I\, S\_cl(x1, x0)}{hbar}\right)} F(t1-t0)$$

|F(t1=t0)| urcime z podminky unitarity, tj. casovy vyvoj nemeni normu ->
int(psi(x1,t1) *conjugate(psi(x1,t1),x1) = int(K(x1,x0) *conjugate(K(x1,x0t)) *psi(x0,t0) *conjugate(psi(x0t,t0), x0,x0t,x1) =>
int(K(x1,x0)*conjugate(K(x1,x0t),x1)=delta(x0-x0t)

```
> simplify(K(x1,x0)*conjugate(K(x1,x0t)));
```

$$e^{\left(\frac{1/2\, I m \omega\, (x0 - x0t)\, (\cos(\omega\,(t1-t0))\, x0 - 2\, x1 + \cos(\omega\,(t1-t0))\, x0t)}{hbar \sin(\omega\,(t1-t0))}\right)} \left| F(t1-t0) \right|^2$$

presubstituji z=x1*m*omega/hbar/sin(...) ->dx1= (m*omega/hbar/sin(...))^(-1) dz, v integralu pak mam 2*Pi*integralni reprezentace delta funkce ->

```
> 1=2*Pi*abs(F(t1-t0))^2*(m*omega/hbar/sin(omega*(t1-t0)))^(-1);
```

$$1 = 2 \frac{\pi \left| F(t1-t0) \right|^2 hbar \sin(\omega\,(t1-t0))}{m\, \omega}$$

```
> abs(F(t1-t0))=sqrt(m*omega/(2*Pi*hbar*sin(omega*(t1-t0))));
```

$$\left| F(t1-t0) \right| = \frac{1}{2} \sqrt{2} \sqrt{\frac{m\, \omega}{\pi\, hbar \sin(\omega\,(t1-t0))}}$$

Provedenim limity omega->0 a porovnanim s volnou castici dostavame I do jmenovatele pod odmocninu

```
> F(t1-t0) :=
  1/2*sqrt(2)*sqrt(m*omega/(I*Pi*hbar*sin(omega*(t1-t0))));
```

$$F(t1-t0) := \frac{1}{2} \sqrt{2} \sqrt{\frac{-I m \omega}{\pi\, hbar \sin(\omega\,(t1-t0))}}$$

```
> 'K(x1,x0)'=K(x1,x0);
```

$$K(x1, x0) = \frac{1}{2} e^{\left(\frac{1/2\, I m \omega\, ((x0^2 + x1^2) \cos(\omega\,(t1-t0)) - 2\, x0\, x1)}{hbar \sin(\omega\,(t1-t0))}\right)} \sqrt{2} \sqrt{\frac{-I m \omega}{\pi\, hbar \sin(\omega\,(t1-t0))}}$$

```
>
```

$$K_1 = -\frac{i}{\hbar}\lim_{N\to\infty} n^{N+1}\sum_{k=1}^{N}\Delta t\int e^{\frac{im}{2\hbar\Delta t}\sum_{j=1}^{N+1}(x_j-x_{j-1})^2}\,V(\vec{x}_k,t_k)\,d^3x_1\dots d^3x_N$$

(poloha V závisí explicitně na čase)

$$= -\frac{i}{\hbar}\lim_{N\to\infty}\sum_{k=1}^{N}\Delta t\int d^3x_k\Big(\underbrace{n^{N-k+1}\int e^{\frac{im}{2\hbar\Delta t}\sum_{j=k+1}^{N+1}(x_j-x_{j-1})^2}d^3x_{k+1}\dots d^3x_N}_{\to K_{vol}(\vec{x},t_f;\vec{x}_k,t_k)}\Big)V(x_k,t_k)\Big(\underbrace{n^{k}\int e^{\frac{im}{2\hbar\Delta t}\sum_{j=1}^{k}\dots}d^3x_{k-}}_{\to K_{vol}(\vec{x}_k,t\ \vec{x}_0,t_0}\Big)$$

$$\sum_{k=1}^{N}\Delta t\int dx_k \longrightarrow \int_{t_0}^{t_f}dt\int d^3x$$

$$\Rightarrow\quad \boxed{K_1(\vec{x},t_f;\vec{x}_0,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\int d^3x_1\int_{t_0}^{t_f}dt_1\;K_{vol}(\vec{x},t_f;\vec{x}_1,t_1)\,V(\vec{x}_1,t_1)\,K_{vol}(\vec{x}_1,t_1;\vec{x}_0,t_0)}$$

obdobně

$$K_2 = -\frac{1}{2\hbar^2}\int d^3x_1\int_{t_0}^{t_f}dt_1\int d^3x_2\int_{t_0}^{t_f}dt_2\;K_{vol}(\vec{x},t_f;\vec{x}_2,t_2)\,V(\vec{x}_2,t_2)\,K_{vol}(\vec{x}_2,t_2;\vec{x}_1,t_1)\cdot$$
$$\cdot V(\vec{x}_1,t_1)\,K_{vol}(\vec{x}_1,t_1;\vec{x}_0,t_0)$$

Indukcí dokážeme

$$\boxed{K_N = \frac{(-i)^N}{N!\,\hbar^N}\Big(\prod_{k=1}^{N}\int d^3x_k\int_{t_0}^{t_f}dt\Big)\,K_{vol}(\vec{x},t_f;\vec{x}_k,t_k)V(\vec{x}_k,t_k)K_{vol}(\vec{x}_k,t_k;\vec{x}_{k-1},t_{k-1})\cdot V(\vec{x}_{k-1},t_{k-1})\cdot\dots\cdot V(\vec{x}_1,t_1)\,K_{vol}(\vec{x}_1,t_1;\vec{x}_0,t_0)}$$

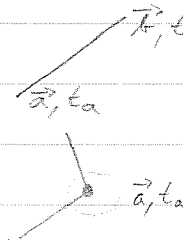
Je vhodné si povšimnout, že $K_2 = -\frac{1}{2\hbar^2}\int\dots\int dt^2\{\theta(t_1-t_2)[\dots]+\theta(t_2-t_1)[\dots]\}$

$\Rightarrow$ po přejmenování integr. proměnných máme $K_2 = -\frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t_f}dt_1\int_{t_1}^{t_f}dt_2\int d^3x_1\int d^3x_2\,[\dots]$.

Obecně odstraníme faktor $\frac{1}{N!}$ uspořádáním $t_0\le t_1\le t_2\le\dots\le t_N\le t_f$. Toto uspořádání je zavedeno automaticky při použití retardovaných propagátorů $\Rightarrow$

$$\boxed{K_N^{(+)}(\vec{x},t_f;\vec{x}_0,t_0) = \Big(\frac{-i}{\hbar}\Big)^N\Big(\prod_{k=1}^{N}\int d^3x_k\int_{t_0}^{t_f}dt\Big)\,K_{vol}^{(+)}(\vec{x},t_f;\vec{x}_k,t_k)V(\vec{x}_k,t_k)K_{vol}^{(+)}(\vec{x}_k,t_k;\vec{x}_{k-1},t_{k-1},\cdot V(\vec{x}_{k-1},t_{k-1})\cdot\dots\cdot V(\vec{x}_1,t_1)\,K_{vol}^{(+)}(\vec{x}_1,t_1;\vec{x}_0,t_0}$$

Feynmanovy diagramy



$\longleftrightarrow\quad K_{vol}^{+}(\vec{x},t_f;\vec{a},t_a)$

$\longleftrightarrow\quad -\frac{i}{\hbar}V(\vec{a},t_a)$

$K_N^{(+)}$ nelze nic lepšího než nakreslit lomenou čáru s N vrcholy, na konce připíšeme $\vec{x}_0,t_0$ resp. $\vec{x},t_f$), k vrcholům $\vec{x}_k,t_k$, provedeme výše uvedené přiřazení výrazů K_{vol}^{+}, $-\frac{i}{\hbar}V$ a integrujeme přes všechny

souřadnice přirazené vrcholům.

Pozn: v QFT je situace zajímavější, mohou zde interagovat různé druhy částic ⇒ různé druhy pacek, dle konkrétního potenciálu různé počty pacek u vrcholů ⇒ pro dané N může existovat několik (často velmi mnoho) různých diagramů. Diagramy pak slouží jako užitečná pomůcka pro nalezení všech příspěvků do propagátoru.

Použití dráhových integrálů pro popis rozptylu

Předpokládáme, že počáteční podmínkou pro popis rozptylu je stav s přesně určenou hybností a energií, tj. rovinná vlna

$$\psi_{in}(\vec{x}, t_{in}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar} - \frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}t_{in}}$$

Očekáváme, že částice je v počátečním stavu dostatečně daleko od oblasti interakce, takže vliv potenciálu na ni lze zanedbat. Rovinná vlna je však zcela delokalizovaná, proto, abychom se nedostali do rozporu, předpokládáme adiabatickou hypotézu

$$V(\vec{x}, t) \to 0 \quad \text{pro} \quad t \to \pm\infty$$

Pozn: tento a další předpoklady plynou z použití idealizovaných stavů, pokud by ψ_{in} byl vlnový balík, řada problémů by nevyvstala. Na druhou stranu by bylo podstatně obtížnější získat konkrétní předpovědi porovnatelné s experimenty.

Použitím dříve uvedeného vztahu pro časový vývoj vlnové funkce nalézáme

$$\psi^{(+)}(\vec{x}_f, t_f) = \int K^{(+)}(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_{in}, t_{in})\, \psi_{in}(\vec{x}_{in}, t_{in})\, d^3x_{in} =$$

$$= \underbrace{\int K^{(+)}_{vol}(\ldots)\, \psi_{in}(\ )\, d^3x_{in} - \frac{i}{\hbar}\int K_0^{(+)}(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_1, t_1)\, V(\vec{x}_1, t_1)\, K_0^{(+)}(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0)\, \psi_{in}(\vec{x}_{in}, t_{in})\, d^3x_{in} + \ldots}_{\text{tzv. Bornovské aproximace či Bornovská řada}}$$

Obvykle nás zajímá pravděpodobnost nalezení částice s danou hodnotou hybnosti $\vec{p}_f$ v čase $t_f \to \infty$

$$\psi_{out}(\vec{x}_f, t_f) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar} - \frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}t_f}$$

Matice rozptylu, též S-matice (ve Schrödingerově repr.)

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t_f \to \infty}} \hat{U}(t_f, t_0)$$

maticový element S-matice, amplituda rozptylu

$$\langle \vec{p}_f | \hat{S} | \vec{p}_0 \rangle = S_{\vec{p}_f \vec{p}_0} = \lim_{t_f \to \infty} \int \psi_{out}^*(\vec{x}_f, t_f)\, \psi^{(+)}(\vec{x}_f, t_f)\, d^3x_f$$

Evidentně $\langle \vec{p}_f | \hat{S} | \vec{p}_0 \rangle$ nemá dobře def. fázi ($\langle p_f, t_f + \Delta t | = e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t \frac{\vec{p}_f^2}{2m}} \cdot \langle p_f, t_f |$), pokud by bylo potřeba tuto fázi brát do úvahy, bez např. do lin. složit $e^{-\frac{i}{\hbar}t_f \frac{\vec{p}_f^2}{2m}} \dots e^{+\frac{i}{\hbar}t_0 \frac{\vec{p}_0^2}{2m}}$. Je to však jedno, protože měřitelné předpovědi jsou určeny $|\langle \vec{p}_f | \hat{S} | \vec{p}_0 \rangle|^2$ na fázi nezávisejícím.

Pomocí Bornovské řady dostáváme

$$S_{\vec{p}_f \vec{p}_0} = \lim_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t_f \to +\infty}} \int \psi_{out}^*(\vec{x}_f, t_f)\, K_0^{(+)}(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0)\, \psi_{in}(\vec{x}_0, t_0)\, d^3x_f\, d^3x_0$$
$$- \frac{i}{\hbar} \int \psi_{out}^*(\vec{x}_f, t_f)\, K_0^{(+)}(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_1, t_1)\, V(\vec{x}_1, t_1)\, K_0^{(+)}(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0)\, \psi_{in}(\vec{x}_0, t_0)$$
$$\cdot d^3x_f\, d^3x_1\, d^3x_0\, dt_1$$
$$+ \dots$$

První člen po dosazení $K_0^{(+)}$ je evidentně roven konst. $e^{-\frac{i}{\hbar}(t_f - t_0)\frac{\vec{p}_0^2}{2m}} \delta^{(3)}(\vec{p}_f - \vec{p}_0)$, odpovídá situaci, kdy částice prošla bez interakce a není pro další úvahy zajímavý (ve směru dopadajícího svazku částic obvykle z důvodu velkého počtu nedetekujeme).

Je vidět, že Feynmanova pravidla lze pro výpočet amplitud rozptylu modifikovat tak, že koncům krajních "paclat" přiřadíme vynásobení vlnovými funkcemi ψ_{in}, resp. ψ_{out}^* a vyintegrujeme přes jejich prostorové souřadnice.

Též je zřejmé, že výpočty se zjednodušují provedením Fourierovy transformace (přechodem do p-reprezentace):

$$\psi_{in}(\vec{p}, t_0) = \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_0^2}{2m}t_0}, \quad \psi_{out}(\vec{p}, t_f) = \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}_f)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_f^2}{2m}t_f}$$

$$K_{vol}^{(+)}(\vec{p}_1, t_1; \vec{p}_0, t_0) = \theta(t_1 - t_0)\, \delta^{(3)}(\vec{p}_1 - \vec{p}_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_0^2}{2m}(t_1 - t_0)}$$

$$\Rightarrow \boxed{S_{\vec{p}_f\vec{p}_0} = \theta(t_f-t_i)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_0^{\,2}}{2m}(t_f-t_0)}\,\delta^{(3)}(\vec{p}_f-\vec{p}_0) - \frac{i}{\hbar}\int dt\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}(t_f-t)}\,\tilde{V}(\vec{p}_f-\vec{p}_0,t)\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_0^{\,2}}{2m}(t-t_0)} + \dots}$$

(... již obsahují p-integrace)

kde $\tilde{V}(\vec{p},t) = \int \frac{d^3x}{(2\pi\hbar)^3}\, V(x,t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}$ (při této volbě normalizace $\tilde{V}$ máme správný fyz. rozměr $S_{\vec{p}_f\vec{p}_0}$)

Dále je možné provést též Fourierovu transformaci času (běžné hlavně v QFT)

$$\boxed{K^{(+)}_{vol}(\vec{p}_1,E_1;\vec{p}_0,E_0)} = \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar}E_1t_1}}{1}\, K^{(+)}_{vol}(\vec{p}_1,t_1;\vec{p}_0,t_0)\, \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t_0}}{1}\, dt_0\, dt_1$$

$$= \delta^{(3)}(\vec{p}_1-\vec{p}_0) \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)t_1}}{1}\, e^{\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\vec{p}_0^{\,2}}{2m}+E_0\right)(t_1-t_0)}\, \theta(t_1-t_0)\, dt_0\, dt_1$$

$$= \delta^{(3)}(\vec{p}_1-\vec{p}_0)\,\delta(E_1-E_0) \int e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_0-\frac{\vec{p}_0^{\,2}}{2m}\right)t}\,\theta(t)\,dt\ (2\pi\hbar)$$

regularizace $E_0 - \frac{\vec{p}_0^{\,2}}{2m} + i\varepsilon$

$$= \boxed{2\pi\hbar\,\delta^{(3)}(\vec{p}_1-\vec{p}_0)\,\delta(E_1-E_0)\,\frac{i\hbar}{E_1-\frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m}+i\varepsilon}}$$

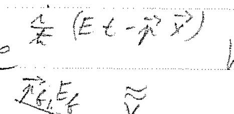
Pozn: výpočet integrálu $\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega+i\varepsilon)t}\,\theta(t)\,dt = \int_0^{\infty} e^{i(\omega+i\varepsilon)t}\,dt = \frac{1}{i(\omega+i\varepsilon)}\left[e^{i(\omega+i\varepsilon)t}\right]_0^{\infty} = -\frac{1}{i(\omega+i\varepsilon)} = \frac{i}{\omega+i\varepsilon}$

lze i korektněji $e^{i(\omega+i\varepsilon)t} = e^{-\varepsilon t}\cos\omega t + i e^{-\varepsilon t}\sin\omega t$

$$\int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t}\cos\omega t\,dt = -\frac{1}{\varepsilon}\left[e^{-\varepsilon t}\cos\omega t\right]_0^{\infty} - \frac{\omega}{\varepsilon}\int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t}\sin\omega t\,dt = \frac{1}{\varepsilon} + \underbrace{\frac{\omega}{\varepsilon^2}\left[e^{-\varepsilon t}\sin\omega t\right]_0^{\infty}}_{0} - \frac{\omega^2}{\varepsilon^2}\int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t}\cos\omega t\,dt$$

$$\Rightarrow \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t}\cos\omega t\,dt = \frac{1}{\varepsilon\left(1+\frac{\omega^2}{\varepsilon^2}\right)} = \frac{\varepsilon}{\omega^2+\varepsilon^2} = \mathrm{Re}\,\frac{i\omega - i^2\varepsilon}{(\omega+i\varepsilon)(\omega-i\varepsilon)} = \mathrm{Re}\,\frac{i}{\omega+i\varepsilon}$$, podobně pro $\sin(\,)e^{-\varepsilon t}$

Zavedeme-li $\tilde{\tilde{V}}(\vec{p},E) = \int \frac{d^3x\,dt}{(2\pi\hbar)^4}\, e^{\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\vec{x})}\, V(\vec{x},t)$, lze elementy matice rozptylu $S_{\vec{p}_f\vec{p}_0}$ daného řádu vyjádřit pomocí diagramů, např.



, v nichž úsečce s přiřazenými $\vec{p}, E$ odpovídá propagátor $\frac{i\hbar}{E-\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}+i\varepsilon}$, každému vrcholu odpovídá $-\frac{i}{\hbar}\tilde{\tilde{V}}(\vec{p},E)$, kde $\vec{p}(E)$ je rozdíl hybnosti (energií) vystupující a vstupující úsečky, integrujeme přes vnitřní hybnosti a energie tzv. off-shell, tj. není žádný vztah mezi E a $\vec{p}$ na dané vnitřní úsečce. Naopak dosadíme $E_f = \frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}$, $E_0 = \frac{\vec{p}_0^{\,2}}{2m}$.

Po provedení integrálů vymizí ε nutné k obcházení pólů (které leží bez přidání $i\varepsilon$ na reálné energetické ose). Integrace obvykle využívají reziduovou větu.

Pozn.: fyzikální rozměry $[\psi_p] = [\hbar]^{-\frac{3}{2}}$, $[S_{\vec{p}_f\vec{p}_0}] = \frac{[x]^3}{[\hbar]^{3/2\cdot 2}} = [p]^{-3}$, $[K(x,\cdot)] = m^{-3}$, v rozvoji $[S_{\vec{p}_f\vec{p}_0}] = [\hbar]^{-k}\frac{[J\cdot s]^k}{[\hbar]^3}\cdot m^{2} = [p]^{-3}$

v p-repr.: $[\delta^{(3)}(\vec{p})] = [p]^{-3}$, $[S_{pp}] = \frac{1}{[\hbar]^k}\frac{[J\cdot s]^k}{[\hbar]^{3k}}[x]^{3k}[p]^{3(k-1)} = [p]^{-3}$ O.K.

$\psi = \int \delta(\,)\,\psi\, d^3p$

Př. Coulombův rozptyl $V = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

$$\tilde{V}(\vec{p},t) = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\int \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{r}d^3x \xrightarrow[\cdot e^{-ar}]{\text{regularizace}} \frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)}\int \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}-ar}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{r}d^3x$$

$$\xrightarrow[\text{vel. vektoru } \vec{p}]{\text{sfer. souřadnice}} \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta - ar}\frac{1}{r}r\sin\theta\, d\theta\, dr\, d\varphi =$$

$$= \frac{2\pi}{4\pi}\frac{Ze^2}{(2\pi\hbar)^3\varepsilon_0}\int_0^{\pi}\Big(\underbrace{[\quad]_0^{\infty}}_{0} + \frac{1}{a+\frac{i}{\hbar}p\cos\theta}\int_0^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta - ar}dr\Big)\Big|_{a=0}\sin\theta\, d\theta$$

$$= \frac{1}{2}\frac{Ze^2}{(2\pi\hbar)^3\varepsilon_0}\int_0^{\pi}\frac{\sin\theta\, d\theta}{\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 p^2\cos^2\theta} = -\frac{Ze^2\hbar^2}{2\varepsilon_0(2\pi\hbar)^3\vec{p}^2}\int_0^{\pi}\frac{-d(\cos\theta)}{\cos^2\theta} = \frac{Ze^2\hbar^2}{2\varepsilon_0(2\pi\hbar)^3\vec{p}^2}\left[-\frac{1}{\cos\theta}\right]_0^{\pi}$$

$$= \boxed{\frac{Ze^2\hbar^2}{\varepsilon_0(2\pi\hbar)^3\cdot\vec{p}^2}}$$

Po dosazení je tedy

$\vec{p}_f \pm \vec{p}_{in}$

$$S_{\vec{p}_f\vec{p}_0} = -\frac{i}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{\hbar^3}\,\delta\Big(\frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m\hbar} - \frac{\vec{p}_0^{\,2}}{2m\hbar}\Big)\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}(t_f - t_0)}\,\frac{Ze^2\hbar^2}{\varepsilon_0(\vec{p}_f - \vec{p}_0)^2} + \dots$$

(2 časové integrace)

tj.

$$\boxed{S_{\vec{p}_f\vec{p}_0} = -i\,\frac{1}{(2\pi\hbar)^2}\,\delta\Big(\frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m\hbar} - \frac{\vec{p}_0^{\,2}}{2m\hbar}\Big)\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m}(t_f - t_0)}\,\frac{Ze^2}{\varepsilon_0(\vec{p}_f - \vec{p}_0)^2} + \dots}$$

Účinný průřez

$$\sigma = \frac{\text{počet rozptýlených částic za 1s}}{\text{intenzita dopadajících částic}}\,, \quad [\sigma] = m^2$$

pravděp., že částice s hybností $\vec{p}_0$ se rozptýlí do stavu s hybností $\vec{p}_f$ je $|S_{\vec{p}_f\vec{p}_0}|^2$.
σ je pak úměrná $\int |S|\, d^3p \cdot |\vec{p}_0|\,\hbar^2$ (z rozměrových důvodů).
$|S_{\vec{p}_f\vec{p}_0}|^2$ však obsahuje $|\delta(\,)|^2 \Rightarrow$ je nutno nějak regularizovat (opět dán na pravé straně nenormalizovatelných vlastních stavů $\vec{p}$, při použití vlnových balíků bude problémy eliminovat).
Po provedení regularizace

$$\boxed{\sigma = \frac{m^2Z^2e^4}{4\pi^2\varepsilon_0^2}\int \frac{1}{|\vec{p}_0|}\frac{1}{(\vec{p}_f - \vec{p}_0)^4}\,\delta(E_f - E_0)\,d^3p_f}\,, \quad E_{f,0} = \frac{\vec{p}_{f,0}^{\,2}}{2m}$$

$$\Rightarrow \quad \sigma = \frac{m^2 z^2 e^4}{4\pi^2 \varepsilon_0^2} \int \frac{1}{|\vec{p}_0|} \frac{1}{|\vec{p}_0 - \vec{p}_f|^4} |p_f|^2 d|p_f| \, \delta(E_f - E_0) \, d\Omega$$

$$E_f = \frac{\vec{p}_f^{\,2}}{2m} \Rightarrow \quad dE_f = \frac{|p_f| d|p_f|}{m} \Rightarrow \quad |p_f|^2 d|p_f| = m (2m E_f)^{1/2} dE_f$$

$$\Rightarrow \quad \sigma = \int \frac{m^2 z^2 e^4}{4\pi^2 \varepsilon_0^2} \frac{m (2m E_f)^{1/2}}{(2m E_0)^{1/2}} \frac{d\Omega}{4 p_0^4 \sin^2 \frac{\theta}{2}}, \quad \text{pri čemer} \quad |\vec{p}_0 - \vec{p}_f|^2 = 4 \vec{p}_0^{\,2} \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

$$\theta = \sphericalangle (\vec{p}_0, \vec{p}_f)$$

$$\text{ker} \quad |\vec{p}_0| = m v \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{z e^2}{(8\pi \varepsilon_0 m v^2)^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}}$$

Rutherfordova formula

Partiční suma

jestliže $\hat{H}$ není explicitní funkcí času, lze případě definici propagátoru

$$K(\vec{x}_1,t_1;\vec{x}_0,t_0) = K(\vec{x}_1;\vec{x}_0;t_1-t_0) = \langle \vec{x}_1,t_1 | \vec{x}_0,t_0\rangle =$$

$\uparrow \hat{H}|\psi_m\rangle = E_m|\psi_m\rangle$, $\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}$

$$= \sum_m \langle \vec{x}_1,t_1|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\vec{x}_0,t_0\rangle =$$

$$= \sum_m e^{-\frac{i}{\hbar}E_m(t_1-t_0)} \psi_m(\vec{x}_1)\psi_m(\vec{x}_0)$$

dosadíme-li formálně $t_1 - t_0 = -i\beta\hbar$

$$\Rightarrow \boxed{K(\vec{x}_1,\vec{x}_0;-i\beta\hbar) = \sum_n e^{-\beta E_n}\psi_n(\vec{x}_1)\psi_n(\vec{x}_0)}$$

maticové hustoty Gibbsova rozdělení v x-reprezentaci

$\Rightarrow$ partiční suma systému o termodyn. teplotě T ($\beta = \frac{1}{kT}$) lze psát

$$\boxed{Z(\beta) = \int d^3x\ K(\vec{x},\vec{x},-i\hbar\beta) = \sum_m e^{-\beta E_m}}$$

Pozn: ze znalosti partiční sumy lze určit střední hodnotu energie, její střední kvadr. odchylku a další momenty:

$$\langle E\rangle = Z(\beta)^{-1}\cdot\sum_m E_m e^{-\beta E_m} = -Z(\beta)^{-1}\frac{d}{d\beta}Z(\beta) = -\frac{d}{d\beta}\ln Z(\beta)$$

$$\langle E^2 - \langle E\rangle^2\rangle = \frac{d^2}{d\beta^2}\ln Z(\beta) \quad \text{atd.}$$

V kvantové mechanice či QFT je často zapotřebí vypočítat střední hodnoty pozorovatelných v základním stavu systému, tzv. vakuu (vakuové střední hodnoty, VEVy). K tomu lze využít následujícího triku:

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \lim_{\beta\to\infty} \frac{\sum_m e^{-\beta E_m}\langle m|\hat{A}|m\rangle}{\sum_n e^{-\beta E_m}} \quad \text{(protože } e^{-\beta E_m},\ \beta>0 \text{ klesají rychleji než } e^{-\beta E_0}\text{)}$$

za předpokladu, že A je funkcí pouze souřadnic, lze psát $\langle m|\hat{A}|n\rangle = \int \psi_n(\vec{x})\psi_m^*(\vec{x})A(\vec{x})d^3x$

$\Rightarrow$

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{Z(\beta)}\int d^3x\ K(\vec{x},\vec{x},-i\hbar\beta)A(\vec{x}) = \lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{Z(\beta)}\int_{\text{uzavřené trajektorie}} d\vec{x}\ A(\vec{x}(0))e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta}\mathcal{L}_E(\vec{x}(\tau))d\tau}$$

de integrace přes Euklidovské trajektorie znamená integraci přes $\forall \vec{x}: \langle 0, \tau \rangle \to \mathbb{R}^3 : \vec{x}(0) = \vec{x}(\tau)$,
$\mathcal{L}_E$ získáme z $\mathcal{L}(x(t))$ tak, že nahradíme $t = -i\tau \Rightarrow \frac{1}{dt} = i \frac{d}{d\tau}$, $dt = -i\, d\tau$

ro výpočet podobných výrazů je vhodné zavést vybrušující funkcionál

$$Z[\vec{\eta}] = \int_{\text{Euklid. trajektorie}} \mathcal{D}\vec{x}\; e^{\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\mathcal{L}_E(\vec{x}(\tau)) + \vec{\eta}(\tau)\vec{x}(\tau)\right]}$$

a zavést funkcionální derivaci $\frac{\delta}{\delta\eta(\tau)} F[\eta]$ následujícím způsobem:

Je-li $F[\eta] = \int G(\eta, \eta', \eta'', \ldots, \tau)\, d\tau \Rightarrow \delta F[\eta(\tau)] = \int \frac{\delta F[\eta]}{\delta \eta(\tau)} \cdot \delta\eta(\tau)\, d\tau$

Často bude platit $\frac{\delta}{\delta\eta(\tau)} F[\eta] = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{F[\eta + \varepsilon\delta(\tau)] - F[\eta]}{\varepsilon}$

Pro rozvinutí $A = \sum_{\vec{k}(0)}^{\infty} a_{\vec{k}} X_1^{k_1} X_2^{k_2} X_3^{k_3}$ bude platit

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \lim_{\beta\to\infty} Z^{-1}(\beta) \sum a_{\vec{k}} \int_{\text{uzavř. tr.}} \mathcal{D}\vec{x}\; x_1^{k_1}(0)\, x_2^{k_2}(0)\, x_3^{k_3}(0)\; e^{\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\mathcal{L}_E + \vec{\eta}\vec{x}\right]} \Big|_{\vec{\eta}=0}$$

$$= \lim_{\beta\to\infty} Z^{-1}(\beta) \sum a_{\vec{k}} \int_{\text{uzavř. tr.}} \mathcal{D}\vec{x} \left(\hbar \frac{\delta}{\delta\eta_1(0)}\right)^{k_1} \cdots \left(\hbar \frac{\delta}{\delta\eta_3(0)}\right)^{k_3} e^{\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\mathcal{L}_E + \vec{\eta}\vec{x}\right]} \Big|_{\vec{\eta}=0}$$

$$= \lim_{\beta\to\infty} Z^{-1}(\beta) \sum a_{\vec{k}} \left(\hbar \frac{\delta}{\delta\eta^{\vec{k}}(0)}\right) Z[\vec{\eta}] \Big|_{\vec{\eta}=0}$$

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \lim_{\beta\to\infty} \left(Z(\beta)\right)^{-1} \left(A\left(\hbar \frac{\delta}{\delta\vec{\eta}(0)}\right) Z[\vec{\eta}]\right)\Big|_{\vec{\eta}=0}$$

Reprezentace vícečásticových stavů pomocí obsazovacích čísel, kreační a anihilační operátory

Je nejasné, že pro popis stavů nerozlišitelných částic stačí udat kolik částic je v jakém stavu. K tomuto účelu se zavádějí tzv. obsazovací čísla:

Nechť máme ÚMP, jejíž vlastní vektory nějak uspořádáme a označíme $\psi_a(x)$ ($a \in \mathbb{N}$ nebo $a \in \mathbb{R}$ apod., pro jednoduchost zápisu pp. $a \in \mathbb{N}$).
Pak bázi prostoru n-částicových stavů můžeme zapsat v podobě vektorů
$|n_1, n_2, \dots\rangle$, $n = \sum_{k=1}^{\infty} n_k$, $n_k \geq 0$ definovaných vztahem

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{\mathcal{S}\left(\psi_1(x_1) \otimes \psi_1(x_2) \otimes \dots \otimes \psi_1(x_{n_1}) \otimes \psi_2(x_{n_1+1}) \dots \otimes \psi_2(x_{n_1+n_2}) \otimes \dots\right)}{\| \mathcal{S}\left(\psi_1(x_1) \otimes \psi_1(x_2) \otimes \dots \otimes \psi_1(x_{n_1}) \otimes \psi_2(x_{n_1+1}) \dots \otimes \psi_2(x_{n_1+n_2}) \otimes \dots\right) \|}$$

kde $\mathcal{S}$, resp. $\mathcal{A}$, značí symetrizaci, resp. antisymetrizaci (pro bosony resp. fermiony). Normou dělíme proto, aby $\| |n_1, n_2, \dots\rangle \| = 1$. Z definice je vidět, že pravá strana obsahuje funkci n proměnných $x_1, \dots, x_n$, lze ji tedy interpretovat jako vlnovou funkci n bosonů, resp. fermionů. Pokud uvažujeme případ fermionů, pak je vidět, že pokud $\exists k: n_k \geq 2 \Rightarrow$ pro antisymetrizaci $|n_1, n_2, \dots\rangle = \vec{0}$ ... Pauliho vylučovací princip.

Chceme najít formalismus vhodný pro popis systémů, v nichž je počet částic proměnný (např. fotony interagující s látkou) $\Rightarrow$ nejprve potřebujeme vhodný prostor stavů takového systému ... tzv. Fockův prostor

pp. pouze 1 druh částic, 1-částicový Hilbertův prostor $\mathcal{H}$,

$$\Rightarrow \mathcal{F}(\mathcal{H}) = \underbrace{\mathbb{C}}_{\text{vakuum -- stav neobsahující žádné částice}} \oplus \underbrace{\mathcal{H}}_{\text{1-částicové stavy}} \oplus \underbrace{\mathcal{S}_a(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})}_{\text{2-částicové stavy bosonů resp. fermionů}} \oplus \dots \oplus \mathcal{S}_a(\mathcal{H}^{\otimes k}) \oplus \dots$$

tj. $\mathcal{F}_B(\mathcal{H}) = \sum_{k=0}^{\infty} \oplus \mathcal{S}(\mathcal{H}^{\otimes k})$ pro bosony

$\mathcal{F}_F(\mathcal{H}) = \sum_{k=0}^{\infty} \oplus \mathcal{A}(\mathcal{H}^{\otimes k})$ pro fermiony

Pozn: pokud $\dim \mathcal{H} < +\infty \Rightarrow \dim \mathcal{F}_B(\mathcal{H}) = +\infty$, $\dim \mathcal{F}_F(\mathcal{H}) = 2^{\dim \mathcal{H}}$

Pozn: je-li $\mathcal{H}$ separabilní Hilbertův prostor, pak $\mathcal{F}_{B,F}(\mathcal{H})$ jsou separabilní Hilbertovy prostory, skalární součin na $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ je určen:

$$k_1 \neq k_2 \quad |\psi\rangle \in \mathcal{H}^{\otimes k_1}, |\varphi\rangle \in \mathcal{H}^{\otimes k_2} \Rightarrow \langle\psi|\varphi\rangle = 0$$

$$|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_k\rangle, |\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_k\rangle \in \mathcal{H} \Rightarrow (\langle\psi_1| \otimes \dots \otimes \langle\psi_k|)(|\varphi_k\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_1\rangle) = \langle\psi_1|\varphi_1\rangle \cdot \ldots \cdot \langle\psi_k|\varphi_k\rangle$$

Pro výpočty ve Fockově prostoru je vhodné zavést kreační a anihilační operátory

a) bosony

$$\hat{a}_j : \mathcal{F}_B(\mathcal{H}) \to \mathcal{F}_B(\mathcal{H}) \qquad \forall k \in \mathbb{N}: \ \hat{a}_j : \mathcal{S}(\mathcal{H}^{\otimes k}) \to \mathcal{S}(\mathcal{H}^{\otimes (k-1)})$$

$$\boxed{\hat{a}_j |n_1, \dots, n_j, \dots\rangle = \alpha_{n_j} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots\rangle \text{ resp. } \vec{0} \text{ jestliže } n_j = 0 \quad \sum_{i=1}^{\infty} n_i = k}$$

Konstantu α_k, která je stejná $\forall j: n_j = k$ určíme tak, aby takto definované anihilační operátory měly vhodné vlastnosti.

$$\hat{a}_j^+ : \quad \overbrace{\langle m_1, \dots, m_j, \dots}^{\sum m_i = \tilde{k}} | \hat{a}_j^+ | \overbrace{n_1, \dots, n_j, \dots}^{\sum n_i = k} \rangle = \overline{\langle n_1, \dots, n_j, \dots | \hat{a}_j | m_1, \dots, m_j, \dots \rangle}$$

$$= \overline{\alpha_{m_j} \langle n_1, \dots, n_j | m_1, \dots, m_j - 1, \dots \rangle} = \alpha^*_{\tilde{k}} \underbrace{\delta_{n_1, m_1} \dots \underbrace{\delta_{n_j, m_j - 1}}_{\delta_{n_j+1, m_j}} \dots}_{\text{aby mohlo být nenulové, musí být } \sum n_i = k = \sum m_i - 1 = \ \Rightarrow \boxed{\tilde{k} = k+1}}$$

$$= \alpha^*_{n_j+1} \langle m_1, \dots, m_j, \dots | n_1, \dots, n_j + 1, \dots \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{a}_j^+ |n_1, \dots, n_j, \dots\rangle = \alpha^*_{n_j+1} |n_1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle \quad \sum_{i=1}^{\infty} n_i = k}$$ kreační operátor

definice již můžeme počítat komutační relace kreačních a anihilačních operátorů

$$\sum n_i = k: \quad [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle \overset{i<j}{=} \alpha^*_{n_i+1} \alpha^*_{n_j+1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle - \alpha^*_{n_j+1} \alpha^*_{n_i+1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle$$

$$= 0, \text{ resp. } = (\alpha^*_{n_i+2} \alpha^*_{n_i+1} - \text{dtto}) |n_1, \dots, n_i + 2, \dots\rangle = 0 \text{ pro } i$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0}, \text{ obdobně ukažte, že } \boxed{[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0}$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle \overset{i \neq j}{=} \alpha_{n_i} \alpha^*_{n_j+1} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1\rangle - \alpha^*_{n_j+1} \alpha_{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1\rangle$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i^+] |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \alpha_{n_i+1} \alpha^*_{n_i+1} |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle - \alpha^*_{n_i} \alpha_{n_i} |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (\alpha_{n_i+1} \alpha^*_{n_i+1} - \alpha_{n_i} \alpha^*_{n_i}) |n_1, \dots$$

je výhodné zavést kreační a anihilační operátory tak, že $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij} \mathbb{1}$ (viz harmon. oscilátor)

$\Rightarrow \alpha_{n_i+1} \alpha^*_{n_i+1} = \alpha_{n_i} \alpha^*_{n_i} + 1 \Rightarrow$ indukcí nalezneme řešení určené až na fáze $(\alpha_{k+1} \alpha^*_{k+1} = k+1)$

fáze zafixujeme reálné $\Rightarrow \alpha_k = \sqrt{k}$

Takže pro bosony známe

$$\hat{a}_j |m_1, \dots, m_j, \dots\rangle = \begin{cases} \sqrt{m_j}\, |m_1, \dots, m_j - 1, \dots\rangle & m_j > 0 \\ 0 & m_j = 0 \end{cases}$$

$$\hat{a}_j^+ |m_1, \dots, m_j, \dots\rangle = \sqrt{m_j + 1}\, |m_1, \dots, m_j + 1, \dots\rangle$$

Vidíme, že lze psát

$$|m_1, m_2, \dots\rangle = \underbrace{\frac{(a_1^+)^{m_1}}{\sqrt{m_1!}} \frac{(a_2^+)^{m_2}}{\sqrt{m_2!}} \cdots}_{\text{celkem konečně mnoho členů různých od 1}} |0\rangle$$

kde stav $|0\rangle$, tzv. vakuum, vyhovuje (ve maticové formě lze $|0\rangle \equiv |0, 0, \dots\rangle$)

$$\hat{a}_j |0\rangle = 0, \quad \forall j$$

Celý Fockův prostor lze psát

$$\mathcal{F}_B(\mathcal{H}) = \text{span}\left\{ \frac{(a_1^+)^{m_1}}{\sqrt{m_1!}} \frac{(a_2^+)^{m_2}}{\sqrt{m_2!}} \cdots |0\rangle \;\middle|\; \sum_{i=1}^{\infty} m_i < +\infty \right\}$$

Z komutačních relací $[a_i^+, a_j^+] = 0$ je vidět, že stavy jsou symetrické vůči záměně
$\Rightarrow$ jedná se skutečně o bosony, pro fermiony budeme muset mít jiné komut. relace.

Zavádíme operátor počtu částic v j-tém stavu
a operátor celkového počtu částic

$$\hat{N}_j = a_j^+ a_j$$
$$\hat{N} = \sum_{j=1}^{\infty} a_j^+ a_j$$

Cvičení $\hat{N}_j \frac{(a_1^+)^{m_1}}{\sqrt{m_1!}} \cdots \frac{(a_j^+)^{m_j}}{\sqrt{m_j!}} \cdots |0\rangle = \frac{(a_1^+)^{m_1}}{\sqrt{m_1!}} \cdots \frac{1}{\sqrt{m_j!}} a_j^+ a_j (a_j^+)^{m_j} \cdots |0\rangle =$

$$= \frac{(a_1^+)^{m_1}}{\sqrt{m_1!}} \cdots \frac{1}{\sqrt{m_j!}} a_j^+ \left(a_j^+ a_j (a_j^+)^{m_j - 1} + 1 (a_j^+)^{m_j - 1} \right) \cdots |0\rangle =$$

$$= \cdots = \frac{(a_1^+)^{m_1}}{\sqrt{m_1!}} \cdots \frac{1}{\sqrt{m_j!}} a_j^+ \left((a_j^+)^{m_j} a_j + m_j (a_j^+)^{m_j - 1} \right) \cdots |0\rangle$$

$$= 0 + m_j \frac{(a_1^+)^{m_1}}{\sqrt{m_1!}} \cdots \frac{(a_j^+)^{m_j}}{\sqrt{m_j!}} \cdots |0\rangle = m_j |m_1, \dots, m_j, \dots\rangle$$

neboli $\hat{N} |m_1, m_2, \dots\rangle = \left(\sum_{j=1}^{\infty} m_j \right) |m_1, m_2, \dots\rangle$

$\Rightarrow$ Vlastní vektory N .. stavy s přesně určeným počtem částic, spol. vlastní vektory N_i .. stavy

s určeným počtem částic v jednotlivých 1-částicových stavech $\{N_i \mid i=1,\dots,+\infty\}$, evidentně tvoří ÚMP na $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$.

Hamiltonián na $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$: je nutné vzít do úvahy experimentálně nalezený charakter interakce

Nejjednodušší případ: neinteragující částice $\Rightarrow$ $\hat{H}$ na $\mathcal{S}(\mathcal{H}\otimes\dots\otimes\mathcal{H})$ je součtem 1-částicových hamiltoniánů $\hat{H}_0$: $\hat{H}|_{\mathcal{S}(\mathcal{H}\otimes\dots\otimes\mathcal{H})} = \hat{H}_0\otimes\mathbb{1}\otimes\dots\otimes\mathbb{1}+\mathbb{1}\otimes\hat{H}_0\otimes\mathbb{1}\otimes\dots\otimes\mathbb{1}+\dots$

Pokud původně zvolená ÚMP pro konstrukci kreačních a anihilačních operátorů obsahovala $\hat{H}$ lze s výhodou psát: $\hat{H}\psi_a = \varepsilon_a\psi_a$

$$\Rightarrow \hat{H}|n_1,n_2,\dots\rangle = \sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon_k n_k |n_1,n_2,\dots\rangle = \sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon_k \hat{N}_k |n_1,n_2,\dots\rangle$$

protože tato rovnost platí $\forall n_1,n_2,\dots$, tj. pro bázi $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$, platí i jako operátorová identita

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon_k\hat{N}_k = \sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon_k a_k^+ a_k}$$

Pokud částice interagují, v $\hat{H}$ se objeví nové další členy, obvykle též zapsané pomocí kreačních a anihilačních

Pokud $[\hat{H},\hat{N}]=0$ $\rightarrow$ v teorii se zachovává celkový počet částic.

Jestliže využijeme jinou ÚMP, např. pro volnou částici se spinem 1 (P_x,P_y,P_z,S_z)

$\Rightarrow$ změní se trochu značení, ale podstata zůstává stejná

$$\hat{a}_{\vec{p},\xi},\quad \hat{a}^+_{\vec{p},\xi} \qquad \psi_{\vec{p},\xi}(\vec{x}) = \hat{a}^+_{\vec{p},\xi}|0\rangle$$

$$[\hat{a}_{\vec{p},\xi},\hat{a}^+_{\vec{p}',\xi'}] = \delta_{\xi\xi'}\delta^3(\vec{p}-\vec{p}')$$

$$\psi_{\vec{p},\xi}(\vec{x})\psi_{\vec{p},\xi}(\vec{y}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+_{\vec{p},\xi})^2|0\rangle \quad \text{apod.}$$

Obecný vektor z $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})$:

$$\boxed{|\varphi\rangle = \sum_{k=0}^{\infty}\left(\prod_{j=1}^{k}\int d^3p_j\sum_{\xi_j=-1}^{1}\right)\alpha_{\substack{p_1,\dots,p_k\\ \xi_1,\dots,\xi_k}}\prod_{j=1}^{k}\hat{a}^+_{p_j,\xi_j}|0\rangle}$$

Fermiony

Obdobnou konstrukci tvořících a anihilačních operátorů lze provést též pro fermiony. V důsledku rozdílů v chování bosonů a fermionů se budou výsledné vztahy poněkud lišit, zavedeme proto raději jiné označení operátorů.

$$\hat{b}_j^+ : \quad \hat{b}_j^+ |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\rangle = \hat{b}_j^+ \frac{a(\psi_1(x_1)\dots\psi_1(x_{n_1})\psi_2(x_{n_1+1})\dots)}{\sqrt{n_1!\,n_2!\dots}} =$$

$$= \sqrt{n_j+1}\,\frac{a(\psi_j(x_1)\psi_1(x_2)\dots\psi_1(x_{n_1+1})\psi_2(x_{n_1+2})\dots)}{\sqrt{n_1!\,(n_j+1)!\dots}}$$

Je nutné si uvědomit, že v tomto případě je důležité pořadí 1-částicových vlnových funkcí v definici $|n_1, n_2, \dots\rangle$, protože provádíme antisymetrizaci.

$$\Rightarrow \boxed{\hat{b}_j^+ |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_j+1}\,(-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} n_k} |n_1, n_2, \dots, n_j+1, \dots\rangle}$$ tvořící operátor

$$\boxed{\hat{b}_j |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_j}\,(-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} n_k} |n_1, n_2, \dots, n_j-1, \dots\rangle, \quad n_j > 0}$$
$$= 0 \qquad n_j = 0$$

anihilační operátor

Pro takto zavedené $\hat{b}_j$, $\hat{b}_j^+$ platí

$j<k$ $\hat{b}_j^+ \hat{b}_k^+ |n_1, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_j}\sqrt{n_k}\,(-1)^{\sum_{i=1}^{j-1} n_i}(-1)^{\sum_{i=1}^{k-1} n_i} |n_1, n_2, \dots, n_j+1, \dots, n_k+1, \dots\rangle$

$(-1)^{\sum_{i=j}^{k-1} n_i}$

$\hat{b}_k^+ \hat{b}_j^+ |\dots\rangle = \sqrt{n_k}\sqrt{n_j}\,(-1)^{\sum_{i=1}^{j-1} n_i + 1}(-1)^{\sum_{i=1}^{k-1} n_i} |n_1, n_2, \dots, n_j+1, \dots, n_k+1, \dots\rangle$

$(-1)^{\sum_{i=j}^{k-1} n_i + 1}$

$\Rightarrow \hat{b}_j^+ \hat{b}_k^+ |\dots\rangle = -\hat{b}_k^+ \hat{b}_j^+ |\dots\rangle \quad \forall |\dots\rangle$ $\hat{b}_j^+$ generátory $\Rightarrow$

$$\boxed{\{\hat{b}_j^+, \hat{b}_k^+\} \equiv \hat{b}_j^+ \hat{b}_k^+ + \hat{b}_k^+ \hat{b}_j^+ = 0}$$ (podobně lze odvodit i $j=k \Rightarrow$ platí $\forall j,k$)

$\Rightarrow$ pro fermiony komutátory tvořících a odpovídajících anihilačních operátorů nahrazujeme antikomutátory

Dále platí $\boxed{\{\hat{b}_j, \hat{b}_k\} = 0 \qquad \{\hat{b}_j^+, \hat{b}_k\} = \delta_{jk}\,\mathbb{1}}$

$\Rightarrow$

$$\boxed{|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{(\hat{b}_1^+)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(\hat{b}_2^+)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots |0\rangle}$$

Z antikomutačních relací též vidíme, že $\boxed{(\hat{b}_i^+)^2 = \frac{1}{2}\{\hat{b}_i^+, \hat{b}_i^+\} = 0}$ tak, jak vyžaduje Pauliho vylučovací princip.

Dále zavádíme operátory počtu částic v k-tém stavu a operátor celkového počtu částic

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{N}_k &= \hat{b}_k^+ \hat{b}_k \\ \hat{N} &= \sum_{k=1}^{\infty} \hat{b}_k^+ \hat{b}_k \end{aligned}}$$

Pokud máme neinteragující částice, $\hat{H}_0 \psi_k = \varepsilon_k \psi_k$, $\hat{H}_0$ jednočásticový Hamiltonián

$\Rightarrow$ celkový Hamiltonián

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon_k \hat{N}_k = \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon_k \hat{b}_k^+ \hat{b}_k}$$

Pokud potřebujeme teorii popisující více druhů částic, je odpovídající Fockův prostor tensorovým součinem Fockových prostorů jednotlivých druhů částic:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_B(\mathcal{H}^1) \otimes \mathcal{F}_B(\mathcal{H}^2) \otimes \dots \otimes \mathcal{F}_B(\mathcal{H}^\Lambda) \otimes \mathcal{F}_F(\tilde{\mathcal{H}}^1) \otimes \dots \otimes \mathcal{F}_F(\tilde{\mathcal{H}}^\Sigma)$$

pro Λ druhů bosonů a Σ druhů fermionů. Obecný vektor pak lze vyjádřit (s_λ, s_σ spiny přísl. čás

$$|\varphi\rangle = \sum \prod_{\lambda=1}^{\Lambda} \sum_{k_\lambda=0}^{\infty} \left(\prod_{j_\lambda=1}^{k_\lambda} \int d^3 p_{j_\lambda} \right) \sum_{\xi_{j_\lambda}=-s_\lambda}^{s_\lambda} \prod_{j_\lambda=1}^{k_\lambda} \hat{a}^+_{p_{j_\lambda}\xi_{j_\lambda}} \cdot \prod_{\sigma=1}^{\Sigma} \sum_{\tilde{k}_\sigma=0}^{\infty} \left(\prod_{\tilde{j}_\sigma=1}^{\tilde{k}_\sigma} \int d^3 \tilde{p}_{\tilde{j}_\sigma} \right) \sum_{\tilde{\xi}_{j_\sigma}=-s_\sigma}^{s_\sigma} \prod_{\tilde{j}_\sigma=1}^{\tilde{k}_\sigma} \hat{b}^+_{\tilde{p}_{\tilde{j}_\sigma}\tilde{\xi}_{j_\sigma}}$$

$$\cdot\, \alpha_{\substack{p, \tilde{p} \\ \xi, \tilde{\xi}}} \cdot |0\rangle$$

jako multiindexy

Komutační relace operátorů přísl. různým částicím (částečně konvence, tj. mohou být vybrány i jiné):

$$\{\hat{b}^+_{\sigma_1, \vec{p}_1, \xi_1}, \hat{b}^+_{\sigma_2, \vec{p}_2, \xi_2}\} = 0 = \{\hat{b}_{\sigma_1, \vec{p}_1, \xi_1}, \hat{b}_{\sigma_2, \vec{p}_2, \xi_2}\}$$

$$\{\hat{b}^+_{\sigma_1, \vec{p}_1, \xi_1}, \hat{b}_{\sigma_2, \vec{p}_2, \xi_2}\} = \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\xi_1 \xi_2} \delta^{(3)}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)$$

$$[\hat{a}^+_{\lambda_1, \dots} \hat{a}^+_{\lambda_2, \dots}] = 0 = [\hat{a}_{\lambda_1, \dots}, \hat{a}_{\lambda_2, \dots}], \quad [\hat{a}^+_{\lambda_1, p_1, \xi_1}, \hat{a}_{\lambda_2, p_2, \xi_2}] = \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\xi_1 \xi_2} \delta^{(3)}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)$$

$$[\hat{a}^+_{\dots}, \hat{b}^+] = [\hat{a}^+_{\dots}, \hat{b}_{\dots}] = [\hat{a}, \hat{b}^+] = [\hat{a}, \hat{b}] = 0$$

Korekce $\hat{H}$ pro systémy s proměnným počtem částic

1) zahrnutí interakce na základě rozboru fyzikální situace

např.: pro nejhrubší popis emise a absorpce záření:

např. atom popsaný hamiltoniánem $\hat{H}_p$, pak lze jako modelový popis v nejhrubším přiblížení použít

$$\hat{H} = \hat{H}_p + \sum_a U_a \hat{a}_a^+ + \bar{U}_a \hat{a}_a + \sum_{ab} U_{ab} \hat{a}_a^+ \hat{a}_b + \dots$$

(členy zanedbané v přiblížení)

U_a … obecné funkce "atomových" proměnných; součet v tomto tvaru kvůli hermitovosti; $U_{ab} = U_{ba}^*$, např. U_{aa} čísla, $a \neq b \Rightarrow U_{ab}$ fce "atomových" proměnných

situaci budeme zkoumat poruchově, např. známe spektrum $\hat{H}_p$ … $|\xi\rangle$, $\hat{H}_p|\xi\rangle = \xi|\xi\rangle$

$$\boxed{\hat{H}_0 = \hat{H}_p + \sum_a U_{aa} \hat{a}_a^+ \hat{a}_a}$$

$\Rightarrow$ vlastní stavy $\hat{H}_0$ jsou $\prod_a \frac{(\hat{a}_a^+)^{m_a}}{\sqrt{m_a!}} |0\rangle \otimes |\xi\rangle \equiv \prod_a \frac{(\hat{a}_a^+)^{m_a}}{\sqrt{m_a!}} |0\rangle|\xi\rangle$

$\Rightarrow$ při poruchovém výpočtu pravděp. přechodů mezi stavy tohoto tvaru zjišťujeme, že pravděp. přechodu ze stavu $\prod_a \frac{(\hat{a}_a^+)^{m_a}}{\sqrt{m_a!}} |0\rangle|\xi\rangle$ do stavu $\prod_a \frac{(\hat{a}_a^+)^{m'_a}}{\sqrt{m'_a!}} |0\rangle|\xi'\rangle$ je v 1. řádu úměrná

$$W \sim \left| \langle\xi'|\langle 0| \prod_a \frac{(\hat{a}_a)^{m'_a}}{\sqrt{m'_a!}} \left(\sum_b U_b \hat{a}_b^+ + \bar{U}_b \hat{a}_b + \sum_{b \neq d} U_{bd} \hat{a}_b^+ \hat{a}_d \right) \prod_c \frac{(\hat{a}_c^+)^{m_c}}{\sqrt{m_c!}} |0\rangle|\xi\rangle \right|^2$$

jednotlivé členy v H_I lze interpretovat jako

$U_b \hat{a}_b^+$ … způsobuje vyzáření 1 fotonu a přísl. změnu stavu atomu z $|\xi\rangle$ na $|\xi'\rangle$

$U_b^* \hat{a}_b$ — // — pohlcení — //

$U_{bd} \hat{a}_b^+ \hat{a}_d$ … způsobuje pohlcení fotonu ve stavu d a současné vyzáření fotonu v jiném stavu b, zároveň dochází k přechodu atomu ze stavu $|\xi\rangle$ do $|\xi'\rangle$, obvykle zanedbatelné ve srovnání s $U_b \hat{a}_b^+$, $U_b^* a_b$

Lze snadno nalézt nutné podmínky pro nenulovost W. Např. pravděp. vyzáření 1 fotonu ve stavu b je nenulové pouze pokud $m'_a = m_a$, $\forall a \neq b$, $m'_b = m_b + 1$ (Důkaz: překomutování $\hat{a}_b^+$ doleva:

$$W_{emise} \sim \left| \langle\xi'|\langle 0| \prod_a \left(\frac{(\hat{a}_a)^{m'_a}}{\sqrt{m'_a!}}\right) U_b a_b^+ \prod_c \frac{(a_c^+)^{m_c}}{\sqrt{m_c!}} |0\rangle|\xi\rangle \right|^2 = \left| \langle\xi'|\langle 0| \prod_{a \neq b} (\;) \frac{1}{\sqrt{m'_b!}} \left((\hat{a}_b)^{m'_b - 1} a_b^+ a_b + \hat{a}_b^{m'_b - 1} \right) \prod_c \frac{(a_c^+)^{m_c}}{\sqrt{m_c!}} |0\rangle \right.$$

$$= \left| \langle\xi'|\langle 0| \hat{a}_b^+ \overset{=0}{\dots} \rangle + m'_b \langle\xi'|U_b|\xi\rangle \cdot \langle 0| \prod_{a \neq b} \frac{(\hat{a}_a)^{m'_a}}{\sqrt{m'_a!}} \cdot \frac{(\hat{a}_b)^{m'_b - 1}}{\sqrt{m'_b!}} \cdot \prod_c \frac{(\hat{a}_c^+)^{m_c}}{\sqrt{m_c!}} |0\rangle \right|^2$$

$$= \left| \sqrt{m'_b} \cdot \prod_{a \neq b} \delta_{m'_a m_a} \, \delta_{m'_b - 1, m_b} \langle\xi'|U_b|\xi\rangle \right|^2 \Longrightarrow m'_b = m_b + 1,\ m'_a = m_a,\ \forall a \neq b, \text{ jinak } W = 0$$

$W_{emise} \sim (n_b+1) \cdot |\langle \xi' | U_b | \xi \rangle|^2$ ... pravděp. emise fotonu do stavu b s n_b fotony je (n_b+1)-krát větší než pravděp. emise fotonu do téhož stavu b, pokud ve stavu b žádné fotony nejsou

$\Rightarrow$ toho $n_b |\langle \rangle|^2$ odpovídá pravděp. stimulované emise, $1 \cdot |\langle \rangle|^2$ pravděp. spontánní emise

Obdobně lze uvažovat absorpci (pravděp.) $\Rightarrow$ $W_{abs.}$ je nenulová pouze pokud $n_b' = n_b - 1$, $n_a' = n_a$, $\forall a$
(komplexně $\hat{a}_b$ dopraví)

$$W_{abs.} \sim n_b \cdot |\langle \xi' | U_b^* | \xi \rangle|^2 = n_b \cdot |\langle \xi | U_b | \xi' \rangle|^2$$

$\Rightarrow$ pravděpodobnost absorpce je úměrná počtu fotonů v příslušném stavu b

Pozn.: pozorujeme se opačného pořadí v $\langle \xi | U_b | \xi' \rangle$!

Pro konkrétní výpočty je nutné najít konkrétní tvar $U_{ab}, U_a, \hat{H}_p$ .. obvykle pomocí principu korespondence s klasické teorie. Fotony jsou popsány Maxwellovou polní teorií $\Rightarrow$ <u>kvantování polí</u>

<u>Kvantování klasické polní teorie</u>

Postup: 1) neinteragující (volná) klasická polní teorie, např. $\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{1}{2} m^2 \phi^2$

2) nalezení obecného řešení pohybových rovnic jako superpozice rovinných vln

definujeme obecnou hybnost $\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_0 \phi}$ a postulujeme Poissonovy závorky v daném čase

$$[\phi(\vec{x},t), \pi(\vec{y},t)] = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y})$$

hledáme klasické objekty a_a, a_a^*, že jejich Pois. záv. jsou $[a_a, a_{a'}^*] = K \delta(a-a')$

.. obvykle Fourierovy koef. v rozvoji do rovinných vln

pocházíme $\mathcal{H} = \pi \partial_0 \phi - \mathcal{L} \Rightarrow H = \int d^3x \mathcal{H}$ a ověříme, že

$H = \sum \varepsilon_a a_a^* a_a$ je energií uvažované superpozice rovinných vln

3) kvantování: postulujeme kanonické komut. relace mezi operátory $\hat{\phi}(\vec{x},t)$ a $\hat{\pi}(\vec{x},t)$

$$[\hat{\phi}(\vec{x},t), \hat{\pi}(\vec{y},t)] = i\hbar \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y})$$

dle principu korep. $\hat{a}_a, \hat{a}_a^+$ vyhovují komut. relacím pro kreační a anihilační operátory, hamiltonián má také strukturu jako hamiltonián systému nerozlišitelných neinteragujících částic

$\Rightarrow$ postulujeme $\exists$ stav s nejnižší energií .. vakuum $|0\rangle$, Fockův prostor pak generujeme působením operátorů $\hat{a}_a^+$ na vakuum $|0\rangle$. Stavy $\hat{a}_{i_1}^+ \dots \hat{a}_{i_m}^+ |0\rangle$ pak interpretujeme jako stavy obsahující v kvant. poli ϕ. Tyto stavy mají energii, resp. hybnosti, které jsou součtem energií, resp. hybností stavů $\hat{a}_{i_k}^+ |0\rangle$. Proto stav $\hat{a}_{i_k}^+ |0\rangle$ interpretujeme jako částici příslušného pole ϕ (např. foton) a stav $\hat{a}_{i_1}^+ \dots \hat{a}_{i_m}^+ |0\rangle$ jako m-částicový stav.

4) interakční členy v lagrangiánu $\mathcal{L}$ vyjádříme pomocí $\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\alpha^+$, původem pomocí principu korespondence do kvantové teorie a napočítáme poruchově

Př: Volné reálné Klein-Gordonovo pole (př. $c=1, \hbar=1$)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - \frac{1}{2}m^2\phi^2$$

$$\Rightarrow \boxed{\Box\phi + m^2\phi = 0} \quad \text{pohyb. rce} \Rightarrow \phi(\vec{x},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\left(\frac{a_{\vec{k}}\, e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}}{\sqrt{2\omega_k}} + \frac{a_{\vec{k}}^*\, e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}}{\sqrt{2\omega_k}}\right)$$

aby bylo reálné

chceme $[\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{k}'}^+] = \delta(\vec{k}-\vec{k}')$

dosazení do pohyb. rce $\Rightarrow$ $\omega_{\vec{k}} = \sqrt{\vec{k}^2+m^2}$

$$\pi(\vec{x},t) = \dot{\phi}(\vec{x},t) = -i\int d^3k \sqrt{\frac{\omega_k}{2}}\left(a_{\vec{k}}\, e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} - a_{\vec{k}}^*\, e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{a_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}\int \frac{d^3x}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}\left[\omega_k\phi(x,t) + i\pi(x,t)\right]} = \frac{i}{\sqrt{2\omega_k}}\int \frac{d^3x}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} \overleftrightarrow{\partial_0}\phi$$

kde $A \overleftrightarrow{\partial_0} B = A\partial_0 B - \partial_0 A B$

Ověření

$$a_{\vec{k}} \stackrel{?}{=} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}\int \frac{d^3x\, d^3\ell}{(2\pi)^3}\, e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}\left[\omega_{\vec{k}}\frac{a_{\vec{\ell}}\, e^{i(\vec{\ell}\vec{x}-\omega_{\vec{\ell}}t)}}{\sqrt{2\omega_{\vec{\ell}}}} + \omega_{\vec{k}}\frac{a_{\vec{\ell}}^*\, e^{-i(\vec{\ell}\vec{x}-\omega_{\vec{\ell}}t)}}{\sqrt{2\omega_{\vec{\ell}}}}\right.$$

$$\left. + \omega_{\vec{\ell}}\frac{a_{\vec{\ell}}\, e^{i(\vec{\ell}\vec{x}-\omega_{\vec{\ell}}t)}}{\sqrt{2\omega_{\vec{\ell}}}} - \omega_{\vec{\ell}}\frac{a_{\vec{\ell}}^*\, e^{-i(\vec{\ell}\vec{x}-\omega_{\vec{\ell}}t)}}{\sqrt{2\omega_{\vec{\ell}}}}\right]$$

zápisem integrací

integrace $\delta^{(3)}(\vec{k}\pm\vec{\ell}) = \int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} e^{i\vec{x}(\vec{k}\pm\vec{\ell})}$ vyintegrováním přes $\vec{\ell}$

$$= \frac{\omega_{\vec{k}}+\omega_{\vec{k}}}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}}\, a_{\vec{k}} + \frac{\omega_{\vec{k}}-\omega_{\vec{k}}}{\sqrt{\ }\sqrt{\ }}\, a_{\vec{k}}^* e^{2i\omega t} = a_{\vec{k}}$$

Analogicky

$$a_{\vec{k}}^* = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}\int \frac{d^3x}{(2\pi)^{3/2}} e^{+i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}\left[\omega_k\phi(x,t) - i\pi(x,t)\right] = -\frac{i}{\sqrt{2\omega_k}}\int \frac{d^3x}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_k t)} \overleftrightarrow{\partial_0}\phi$$

Pozn: KG pole bylo původně chápáno jako kvantově mechanická vlnová funkce pro relativistickou částici. Tato teorie však byla nekonzistentní. Z historických důvodů se pro nahrazení $\phi \to \hat{\phi}$, $\pi \to \hat{\pi}$ všechny používá název "druhé kvantování". Lepší označení je však kvantování polí.

$$\left[\hat{\phi}(\vec{x},t), \hat{\pi}(\vec{y},t)\right] \stackrel{!}{=} i\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y}) \Rightarrow \quad [\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{k}'}] = 0 = [\hat{a}_{\vec{k}}^+, \hat{a}_{\vec{k}'}^+], \; [\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{k}'}^+] = \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}')$$

$(\hat{a}_k^*)$

Ověření: $[\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{k}'}^+] = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}\sqrt{2\omega_{k'}}}\int \frac{d^3x\, d^3y}{(2\pi)^3}\, e^{-i\vec{k}\vec{x}+i\omega_k t}\, e^{+i\vec{k}'\vec{y}-i\omega_{k'}t}\left[\omega_k\hat{\phi}(\vec{x},t) + i\hat{\pi}(\vec{x},t), \omega_{k'}\hat{\phi}(\vec{y},t)\right.$

$$\left. - i\hat{\pi}(\vec{y},t)\right] =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}\sqrt{2\omega_{k'}}}\int \frac{d^3x\, d^3y}{(2\pi)^3}\, e^{\cdots}\, e^{\cdots}\left(\omega_{k'}\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y}) + \omega_k\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y})\right) = \frac{\omega_{k'}+\omega_k}{\sqrt{2\omega_k}\sqrt{2\omega_{k'}}}\int \frac{d^3x}{(2\pi)^3}\, e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{x}+i\omega_k-\omega_{k'}}$$

$= \frac{\omega_k + \omega_{k'}}{\sqrt{2\omega_k}\sqrt{2\omega_{k'}}} \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}') e^{i(\omega_k-\omega_{k'})t} = \frac{2\omega_k}{2\omega_k} e^0 \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}') = \delta^{(3)}(k-\vec{k}')$ o.k.

dalším ověření obdobně

$\hat{H} = \int (\hat{\pi}\,\partial_t\hat{\phi} - \hat{\mathcal{L}})\, d^3x = \int d^3x \left[\frac{1}{2}\hat{\pi}^2(x,t) + \frac{1}{2}\partial_i\hat{\phi}\,\partial_i\hat{\phi} + \frac{m^2}{2}\hat{\phi}^2\right] = \int d^3x \left(\hat{a}_k, \hat{a}_k^+\right)$

$= \ldots = \int d^3k \left(\omega_k \frac{\hat{a}_{\vec{k}}^+\hat{a}_{\vec{k}} + \hat{a}_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}}^+}{2}\right) = \int d^3k \left(\omega_k(\hat{a}_{\vec{k}}^+\hat{a}_{\vec{k}} + \frac{1}{2})\right)$

↑ odstraníme posunutí nulové hladiny energie (blížící se nekonečnu)

$\Rightarrow$ $\boxed{\hat{H} = \int d^3k\ \omega_k\, \hat{a}_{\vec{k}}^+\hat{a}_{\vec{k}}}$ podobně $\hat{\vec{P}} = \int d^3k \left(\vec{k}\,\hat{a}_{\vec{k}}^+\hat{a}_{\vec{k}}\right)$ hybnost

$\Rightarrow$ máme Fockův prostor a jeho bázi tvořenou vl. vektory hybnosti a energie neinteragujícího pole.

Případnou interakci zahrneme jako poruchu:

Př. ϕ^4 teorie $\quad \mathcal{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu\phi\,\partial^\mu\phi - \frac{m^2}{2}\phi^2 - \frac{\lambda}{4!}\phi^4$

$\hat{\phi}^4$ = složitý výraz v $\hat{a}_k, \hat{a}_k^+$ → nutné složité technické prostředky

– Aw. normální uspořádání, Wickův teorém, Feynmanovy diagramy, vnější propagátory atd.

Obdobně se provádí kvantování elektromagnetického pole

$\Rightarrow$ dodatečné nároky plynoucí z kalibrační invariance ... v kvantování se jako nezávislá pole a jejich hybnosti mají objevit pouze fyzikální stupně volnosti. K vyřešení těchto obtíží existují různé metody, nejjednodušší je v klasické teorii zafixovat před kalibrací a pak kvantovat (tento postup je však nevhodný pro práci v teorii elementárních částic – QED apod. !)

$A^\mu = (\phi, \vec{A}) \qquad \mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \qquad F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$

$\boxed{\partial_\mu\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu(\partial_\mu A^\mu) = 0}$ vybereme kalibraci $\operatorname{div}\vec{A} = 0$ ("Coulomb v radiation gauge")

Tato kalibrace však není Lorentzovsky invariantní $\Rightarrow$ pracujeme ve vybrané S.S.

Pozn: máme-li $\operatorname{div}\vec{A} = f(\vec{x},t) \neq 0 \Rightarrow A'^\mu = A^\mu + \partial^\mu\chi$: $\nabla\cdot\vec{A}' = \nabla\cdot(\vec{A} + \nabla\chi) = f + \Delta\chi \overset{!}{=} 0$

$\Rightarrow \chi(\vec{x},t) = \frac{1}{4\pi}\int \frac{f(\vec{y},t)}{|\vec{x}-\vec{y}|} d^3\vec{y}$ definuje požadovanou kalibr. transf. a je podm. $A^{0'} \to 0$ pro $|\vec{x}| \to \infty$

určeno jednoznačně

pohyb. rce $\Rightarrow \partial_i\partial^i A^0 = 0 \Rightarrow A^0(\vec{x},t) = 0$ (jediné řešení vyhovující ↘)

$\Rightarrow \boxed{\Box\vec{A} = 0} \Rightarrow$ rovinné vlny $\vec{A}(\vec{x},t) = a\,\vec{\varepsilon}\left(e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} + \text{h.c.}\right)$

s podmínkou $\vec{\varepsilon}\cdot\vec{k} = 0$ (dosazení do $\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$)

$\Rightarrow$ obecné řešení

$$\boxed{\vec{A}(\vec{x},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\alpha=1}^{2} \frac{\vec{\varepsilon}_\alpha(\vec{k})}{\sqrt{2\omega_k}} \left[a_{k\alpha}\, e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega_k t)} + a_{k\alpha}^*\, e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega_k t)}\right]}$$

$\omega_k = |\vec{k}|$

$$\vec{\varepsilon}_\alpha(\vec{k})\cdot\vec{\varepsilon}_\beta(\vec{k}) = \delta_{\alpha\beta}, \quad \vec{k}\cdot\vec{\varepsilon}_\alpha(\vec{k}) = 0$$

Dále vyjádříme energii a hybnost elektromagnetického pole pomocí a, a^*

$$E = \frac{1}{2}\int d^3x\,(\vec{E}^2 + \vec{B}^2) \qquad \text{v jednotkách } c=1,\ \hbar=1$$
$$= \frac{1}{2}\int d^3x\,(\dot{\vec{A}}^2 - \vec{A}\cdot\Delta\vec{A})\,d^3x \qquad \text{v naší kalibraci}$$
$$= \int d^3k\ \omega_{\vec{k}}\ a^*_{\vec{k}\alpha}\, a_{\vec{k}\alpha}$$

podobně $\vec{P} = \int d^3k\ \vec{k}\, a^*_{\vec{k}\alpha}\, a_{\vec{k}\alpha}$ vybrán tak, aby pro vakuum $E = 0 = \vec{P}$

Dále by bylo vhodné najít Poissonovy závorky a, a^*. To je však netriviální úloha ($\{A_i, \Pi_j\}_{P.B.} \neq \delta_{ij}\,\delta(\ )$ kvůli vazbě $\operatorname{div} A_i = 0$)

$\Rightarrow$ konzistentní Poissonovy závorky pro EM pole v Coulombově kalibraci jsou (Pozn: $E^i = -\Pi^i = -\frac{\partial}{\partial}$

$$\{A^i(\vec{x},t), E^j(\vec{x}',t)\} = -\left(\delta^{ij} - \frac{\partial^i\partial^j}{\Delta}\right)\delta^{(3)}(x-x')$$
$$\{A^i, A^j\} = 0 = \{E^i, E^j\} \qquad \left(\frac{1}{\Delta} \text{ ... Greenova fce Laplaceova op.}\right)$$

$\Rightarrow$ po kvantování $[\hat{A}^i(\vec{x},t), \hat{E}^j(\vec{x}',t)] = i\left(\delta^{ij} - \frac{\partial^i\partial^j}{\Delta}\right)\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')\,\mathbb{1}$

$$[\hat{A}^i(\vec{x},t), \hat{A}^j(\vec{x}',t)] = 0 = [\hat{E}^i(\vec{x},t), \hat{E}^j(\vec{x}',t)]$$

$\Rightarrow$ po dosazení vyjádření A^i, E^i pomocí a, a^* lze odvodit Poissonovy závorky a, a^* a po kvantování komutační relace

$$[\hat{a}_{\vec{k}\alpha}, \hat{a}^+_{\vec{k}'\alpha'}] = \delta_{\alpha\alpha'}\,\delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}')\,\mathbb{1} \qquad [\hat{a}_{\vec{k}\alpha}, \hat{a}_{\vec{k}'\alpha'}] = 0 = [\hat{a}^+_{\vec{k}\alpha}, \hat{a}^+_{\vec{k}'\alpha'}]$$

Nyní již v principu máte všechny nástroje potřebné k výpočtu interakce fotonů s látkou: Hilbertův prostor je tenzorovým součinem $\mathcal{H}_{atom}$ (např. elektron v elekt. poli jádra) a Fockova prostoru pro popis fotonů $\mathcal{F}_B(\mathcal{H})^{\otimes 2}$, $\mathcal{H}$ prostor 3-D volné částice ($()^{\otimes 2}$ kvůli $\varepsilon_{\frac{1}{2}}$)

Celkový hamiltonián je součtem

$$\hat{H} = \hat{H}_{atom} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{Q}{r} \qquad \left(\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{P}} - e\hat{\vec{A}})^2}{2m} + e\hat{\varphi} + \frac{1}{2}\int d^3x\,(\hat{\vec{E}}^2 + \hat{\vec{B}}^2)\right)$$

$$+\ \hat{H}_{int} = -e[\hat{P}_i, \hat{A}_i] + e^2\hat{A}_i\hat{A}_j \qquad \text{nutno vyjádřit } \hat{A}_i \text{ pomocí } \hat{a}, \hat{a}^+$$

$$+\ \hat{H}_{EM} = \int d^3k\ \omega_{\vec{k}}\ \hat{a}^+_{\vec{k}\alpha}\,\hat{a}_{\vec{k}\alpha}$$

z toho příspěvek k dynamice systému od $\hat{H}_{atom}$ a $\hat{H}_{EM}$ pp., že umíme spočítat ($\hat{H}_{EM}$ přesně,

$\hat{H}_{atom}$ dle situace), příspěvek od $\hat{H}_{int}$ započítáváme poruchově.
Vzhledem k tomu, že používáme vrstvé poruchovou teorii, pracujeme
v Diracově reprezentaci (tj. vlnová dynamika je v Heisenbergově repr.)
⇒ je možné kombinačně počítat W_{emise}, $W_{abs.}$ v daném systému
(obecné vztahy viz dříve) a určit i opravy ve vyšších řádech
poruchové teorie apod.

Obdobně se postupuje i ve fundamentálních teoriích elementárních částic,
ale v této aplikaci je třeba znát i další problémy navíc

1) Fockův prostor stavů je konstruován pomocí všech $\hat{H}$ volných, neinteragujících částic.
Do jaké míry je opravené jeho použití pro interagující částice?

2) Problémy s kalibračními stupni volnosti se ještě zvětší při použití
nelokálních kalibračních teorií (elektroslabé, silné interakce).

3) divergující členy v poruchových rozvojích → renormalizace atd.