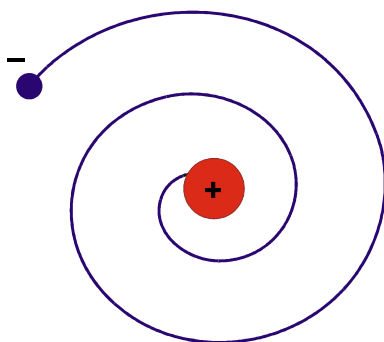


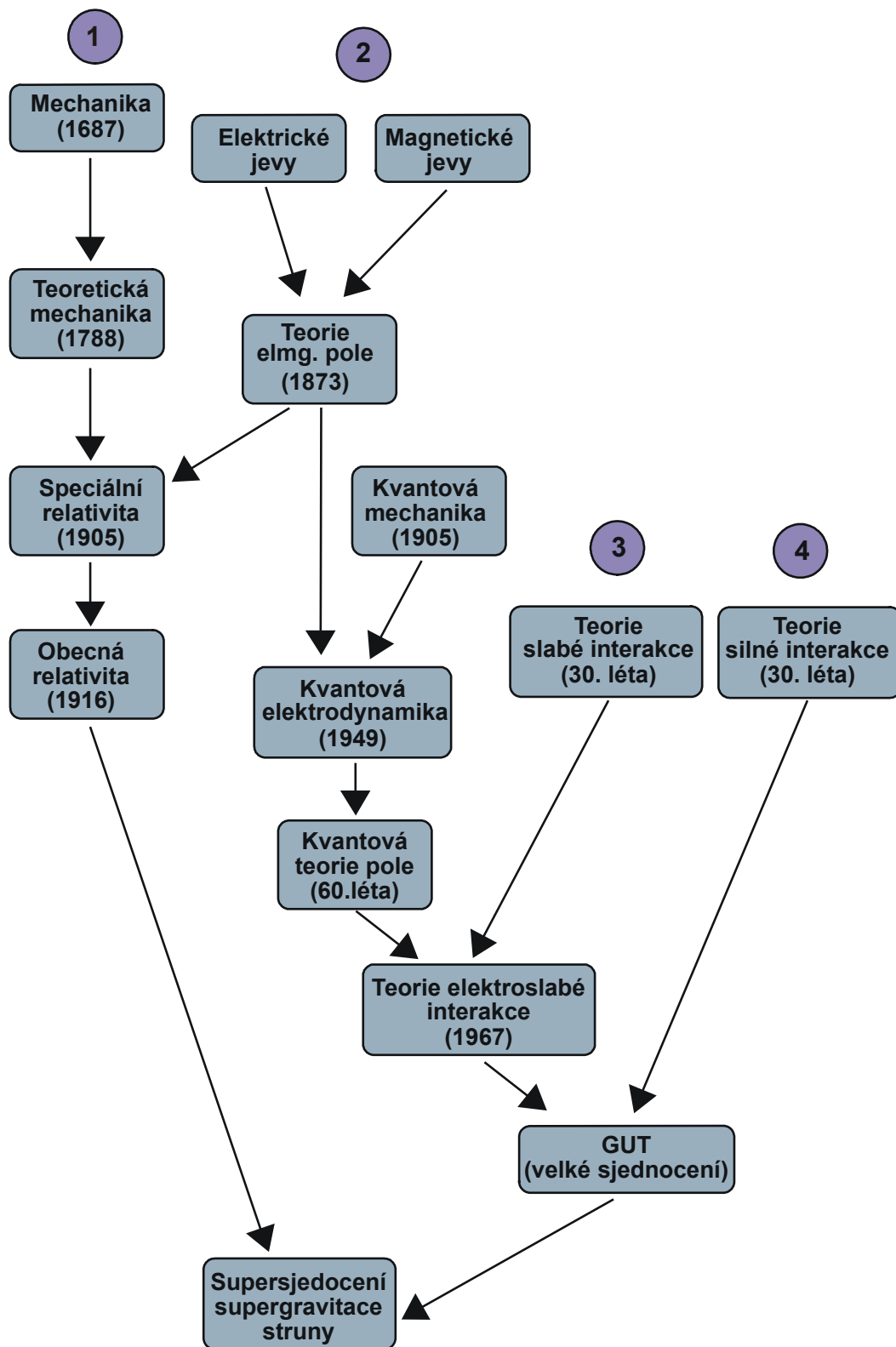
TF2: KVANTOVÁ TEORIE



STUDIJNÍ TEXT PRO DOKTORANDSKÉ STUDIUM

PETR KULHÁNEK

INTEGRAČNÍ TENDENCE VE FYZICE



OBSAH

PŘEDMLUVA	4
2. KVANTOVÁ TEORIE	5
2.1. VZNIK A ROVOJ KVANTOVÉ TEORIE	5
2.2. (M) OPERÁTORY V KVANTOVÉ TEORII	9
2.2.1. UNITÁRNÍ PROSTORY (PROSTORY SE SKALÁRNÍM SOUČINEM)	9
2.2.2. OPERÁTORY	12
2.2.3. PROJEKČNÍ OPERÁTORY	17
2.2.4. ROZVOJ PRVKU DO BÁZE	19
2.2.5. SPEKTRÁLNÍ TEORIE	21
2.3. ZÁKLADNÍ PRINCIPY KVANTOVÉ TEORIE	26
2.3.1. ZÁKLADNÍ AXIOMY A DEFINICE	26
2.3.2. KOMPATIBILITA MĚŘENÍ A HEISENBERGOVY RELACE	29
2.3.3. VLASTNÍ STAVY ENERGIE, SCHRÖDINGEROVA ROVNICE	32
2.4. HARMONICKÝ OSCILÁTOR	35
2.4.1. ŘEŠENÍ POMOCÍ VLNOVÉ MECHANIKY (SCHRÖDINGER)	35
2.4.2. ŘEŠENÍ BEZ VOLBY REPREZENTACE (DIRAC)	39
2.4.3. ŘEŠENÍ POMOCÍ MATICOVÉ MECHANIKY (HEISENBERG)	42
2.5. SYMETRICKÝ POTENCIÁL	44
2.5.1. MOMENT HYBNOSTI	45
2.5.2. ŘEŠENÍ V X REPREZENTACI, KULOVÉ FUNKCE	49
2.5.3. JEDNODUCHÉ SYSTÉMY: OSCILÁTOR, VODÍK, JÁMA	51
2.6. #ASOVÝ ROVOJ	53
2.6.1. EVOLUČNÍ OPERÁTOR	53
2.6.2. ČASOVÁ SCHRÖDINGEROVA ROVNICE	55
2.6.3. EHRENFESTOVY TEORÉMY, VIRIÁLOVÝ TEORÉM	56
2.7. RELATIVISTICKÁ KVANTOVÁ TEORIE, SPIN	58
2.7.1. PROSTOROVÁ ROTACE A LORENTZOVA TRANSFORMACE	58
2.7.2. SPIN	59
2.7.3. KLEIN-GORDONOVA A DIRACOVA ROVNICE	61
2.8. SOUSTAVA STEJNĚCHÝCH PARTICL	63
2.8.1. OPERÁTOR VÝMĚNY DVOU ČÁSTIC	63
2.8.2. BOSONY A FERMIONY, PAULIHO PRINCIP	64
2.8.3. DRUHÉ KVANTOVÁNÍ	65

PŘEDMLUVA

Teoretická mechanika vychází ze zobecněných zkušeností člověka, z toho, jak vnímáme svět kolem sebe v našich měřítkách - v tzv. *makrosvětě*. Snažíme-li se zákony teoretické mechaniky aplikovat na tělesa malých rozměrů (atomy, částice) - tzv. *mikrosvět*, nebudou již předpovědi ve shodě s experimentem. V mikrosvětě platí jiné zákony. Například samotný akt měření může ovlivnit objekty mikrosvěta. Chceme-li určit polohu fotbalového míče, zachytíme okem fotony odražené od míče a informaci zpracujeme. Chceme-li určit polohu elektronu, odražený foton, z kterého na polohu usuzujeme, udělí elektronu nezanedbatelný impuls a změní jeho stav. Asi největší rozdíl mezi jevy v makrosvětě a mikrosvětě souvisí s komutativností. V makrosvětě jsme si zvykli na to, že jevy, které pozorujeme jsou komutativní – nezáleží na pořadí. Je jedno, zda nejprve provedeme měření A a poté měření B nebo naopak. Zkrátka $AB = BA$. V mikrosvětě tomu tak ale není. Akt měření ovlivňuje stav objektů a záleží na tom, které měření provedeme jako první. To je také hlavním důvodem selhání teoretické mechaniky při popisu mikrosvěta. Teoretická mechanika je založena na komutujících matematických objektech. Jedinou nekomutující strukturou jsou Poissonovy závorky, a to navíc ještě pomocnou.

První jevy v mikrosvětě, které byly v příkrém rozporu s teoretickou mechanikou, byly objeveny na počátku 20. století. Jejich analýza vedla ke zrodu kvantové teorie - jedné ze dvou nejúspěšnějších teorií v dějinách lidstva (kvantová teorie, obecná teorie relativity). Základní rovnice a vztahy zůstávají shodné s teoretickou mechanikou, platí však pro zcela jiné objekty. Například Lieova algebra Poissonových závorek je aplikována na jisté operátory představující dynamické proměnné. Předpovědi dnešní kvantové teorie se shodují s experimentem na mnoho platných cifer.

Uvedme nyní základní rozdíly světa malých rozměrů - *mikrosvěta* - oproti situacím, na které jsme zvyklí z našeho okolí - *makrosvěta*:

- 1) ***diskrétní hladiny některých dynamických proměnných*** (například energie, moment hybnosti ...) - v dané situaci můžeme naměřit jen určité hodnoty u sledované veličiny a žádné jiné. V makrosvětě jsou měřené hodnoty spojité.
- 2) ***dualismus vln a částic*** - objekty mikrosvěta se mohou chovat jako vlny i jako částice.
- 3) ***nekomutativnost aktu měření*** - při měření hodnot dvou dynamických proměnných (například polohy a rychlosti) může výsledek záležet na pořadí provedení měření. Akt měření totiž ovlivňuje stav systému, po měření se systém obecně nachází v jiném stavu než před měřením.
- 4) ***relace neurčitosti*** - zvýšení přesnosti měření jedné dynamické proměnné v některých případech sníží přesnost měření jiné dynamické proměnné. Tato měření se navzájem ovlivňují a jsou nekomutativní.
- 5) ***nedeterminismus kvantové teorie*** - dva experimenty připravené za stejných podmínek mohou dopadnout různě. Při provedení mnoha pokusů zjistíme, že výsledky mají pravděpodobnostní charakter. Jsme tedy schopni předpovědět jen s jakou pravděpodobností naměříme ten či onen možný jev, nikoli který jev konkrétně nastane.

Fyzika se tak dostala před úlohu vytvořit takovou teorii, která by souhlasila s experimenty v mikrosvětě a v makrosvětě přecházela v klasickou teoretickou mechaniku. Konstrukci kvantové teorie se budeme zabývat v této části sylabu. Aktuální verzi sylabu naleznete na serveru www.aldebaran.cz v sekci studium.

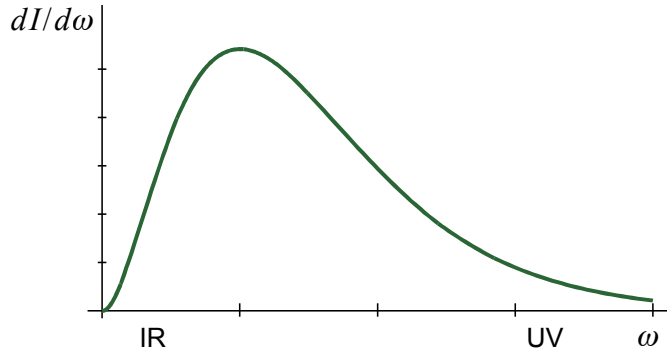
2. KVANTOVÁ TEORIE

2.1. VZNIK A VÝVOJ KVANTOVÉ TEORIE

Shrňme nyní základní experimentální fakta, která vedla ke zrodu kvantové teorie:

Záření absolutně černého tělesa:

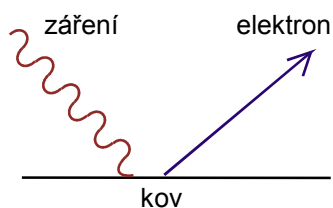
V absolutně černém tělese (lze za ně považovat například každou hvězdu) je v rovnováze látka a záření při nějaké konkrétní teplotě T . Sledujeme-li vyzařování absolutně černého tělesa, zjistíme, že na různých frekvencích vyzařuje s různou intenzitou. Experimentálně pozorovaný průběh energie vyzařené na jednotkovou frekvenci je na obrázku. Teoretické výpočty křivky záření absolutně černého tělesa, které prováděli Rayleigh, Jeans a Wien, vedly k odlišným závislostem. Buď divergovaly v infračervené (IR) nebo v ultrafialové (UV) oblasti spektra. Správnou formuli uhodl až Max Planck v srpnu 1900 tím, že zkoušel porovnávat různé funkce s naměřenými údaji. Jeho výsledek zněl: $dI/d\omega \sim \omega^3 \exp[-\text{const } \omega / T]$. Za další dva měsíce odvodil Planck tuto závislost i teoreticky za předpokladu, že energie světla o určité frekvenci ω se nemění spojitě, ale je celistvým násobkem základního energetického kvanta



$$E = \hbar \omega; \quad \hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad (2.1)$$

Veličina $\hbar$ se nazývá redukovaná Planckova konstanta. Planck původně použil předpoklad o kvantování energie pro zjednodušení matematických výpočtů. Později se ukázalo, že energie elektromagnetického záření určité frekvence je skutečně kvantována, tj. její pozorované hodnoty nejsou spojitě, ale mění se skokem o základní energetické kvantum $\hbar \omega$.

Fotoelektrický jev (fotoefekt):



Při dopadu světla (elektromagnetického záření) na povrch kovu může být z kovu vytržen elektron, který opustí povrch kovu. K uvolňování elektronů z kovu dochází při frekvencích světla vyšších než prahová frekvence ω_0 , která je pro daný kov charakteristická. Máme-li k dispozici světlo s frekvencí nižší než prahovou, emise elektronů nenastane, byť bychom použili světlo se sebevětší intenzitou. Tento experiment je v rozporu s představou o světle jako elektromagnetickém vlnění. K fotoefektu by mělo docházet při každé frekvenci a dostatečnou energii k emisi by mělo jít získat zvýšením intenzity dopadajícího světla.

Řešení podal A. Einstein v roce 1905. Elektromagnetické vlnění se chová při fotoefektu jako částice. Tyto částice nazval *fotony*. Energie jednoho fotonu záření o frekvenci ω je právě energie jednoho energetického kvanta (2.1). Vysvětlení fotoelektrického jevu je nyní velice jednoduché. Na povrchu kovu dochází ke srážce fotonu s elektronem. Aby foton vyrazil elektron, musí mít vyšší energii než je vazbová energie elektronu v kovu: $\hbar \omega \geq E_i$. Prahová frekvence zřejmě je $\omega_0 = E_i / \hbar$. Celková energetická bilance

$$\hbar \omega = E_i + \frac{1}{2} m_e v^2$$

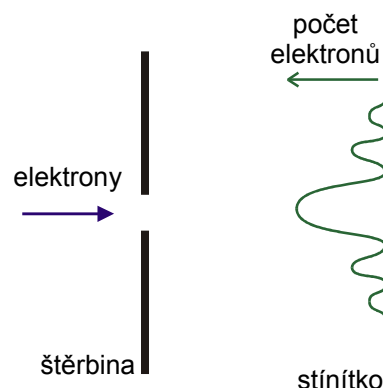
se nazývá Einsteinova rovnice pro fotoefekt. Energie dopadlého fotonu se spotřebuje na vytržení elektronu z kovu a na kinetickou energii vylétávajícího elektronu.

Elektromagnetické vlnění tedy můžeme považovat za soubor fotonů. Proto i při záření absolutně černého tělesa se mění energie záření o dané frekvenci skokem - tento skok představuje přírůstek nebo úbytek jednoho fotonu.

Ohyb elektronů:

Fotoelektrický jev ukázal, že vlnění se může chovat v určitých situacích jako částice. Naopak, někdy se částice chovají jako vlny. Například svazek elektronů procházející štěrbinou po dopadu na stínítko vytvoří typický ohybový obrazec. Nemůžeme předem říci, kam který elektron dopadne, ale při velkém množství elektronů můžeme určit pravděpodobnosti dopadu do konkrétního místa na stínítku. Vzniklý ohybový obrazec je tedy typickým statistickým jevem.

Dnes jsou vlnové vlastnosti elektronů využívány například v elektronových mikroskopech. Elektrony mají výrazně kratší vlnovou délku než viditelné světlo a proto je rozlišovací schopnost elektronového mikroskopu podstatně vyšší než optického.



Poznámka: Částice popisujeme čtveřicí veličin (E , $\mathbf{p}$). Definice energie E a hybnosti $\mathbf{p}$ souvisí se symetriemi při posunutí v čase a v prostoru (teorém Noetherové). Vlnění popisujeme čtveřicí veličin (ω , $\mathbf{k}$). Úhlová frekvence ω je definována jako změna fáze vlnění s časem $\omega = \partial\varphi/\partial t$ a vlnový vektor $\mathbf{k}$ je změna fáze vlnění s prostorovými souřadnicemi $\mathbf{k} = \partial\varphi/\partial\mathbf{x}$. Při periodickém ději s konstantní periodou T v čase a λ v prostoru (vlnová délka) lze psát $\omega = 2\pi/T$, $k = 2\pi/\lambda$. Louis de Broglie vyslovil hypotézu, že objekty mikrosvěta se chovají jako vlny i jako částice (dualismus vln a částic).

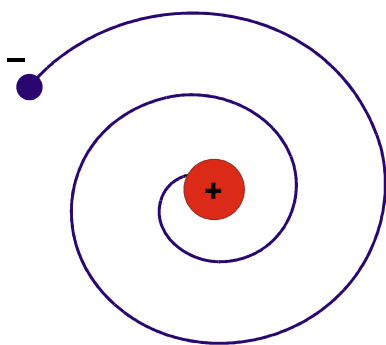
Převodní vztah má tvar:

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (2.2)$$

Často nás zajímá vlnová délka vlnění odpovídajícího konkrétní částici, například elektronu v elektronovém mikroskopu. Ze vztahu (2.2) máme $mv = 2\pi\hbar/\lambda$ a tedy

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} \quad (2.3)$$

Existence atomu:



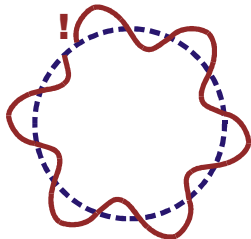
Podle klasického planetárního modelu atomu obíhají záporně nabitě elektrony kolem kladně nabitého jádra tak, jako ve Sluneční soustavě obíhají planety kolem Slunce. Odstředivá síla je vyrovnána přitažlivou Coulombovou silou.

Mezi gravitačními a elektromagnetickými jevy je ale podstatný rozdíl. Z Maxwellovy teorie elektromagnetického pole plyne, že každá nabitá částice, která se pohybuje se zrychlením, vyzařuje elektromagnetické vlnění a ztrácí tak energii. Při kruhovém pohybu elektronu kolem jádra se mění směr rychlosti, zrychlení $d\mathbf{v}/dt$ je nenulové (míří do centra

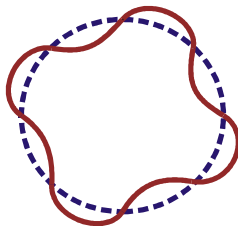
atomu, jde o dostředivé zrychlení) a elektron ztrácí energii zářením. Pohybuje se po spirále až dopadne na jádro atomu. Tento proces trvá například pro vodík 10^{-11} s. Podle klasické teorie by tedy za velice krátkou dobu neměly žádné atomy existovat!! Na tento paradox upozornil poprvé dánský fyzik Niels Bohr.

Niels Bohr vytvořil tzv. *Bohrův model atomu* na základě tří umělých postulátů, které přidal ke klasické teorii:

- 1) elektrony se pohybují jen po tzv. *stacionárních drahách* - tj. po takových drahách, ve kterých je odpovídající de Broglieho vlnová délka ze vztahu (2.3) "namotána" na oběžnou dráhu tj. obvod dráhy je n -násobkem vlnové délky.



Tato dráha není možná



Tato dráha je možná

$$2\pi r_n = n\lambda \quad ; \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv_n} \quad .$$

Index n čísluje možné stavy elektronu v atomu (r_n možný poloměr dráhy, v_n rychlost na n -té dráze, E_n odpovídající energie) podle počtu vlnových délek elektronu na jeho oběžné dráze.

- 2) na stacionární dráze elektron nezáří.
 3) při přeskoku elektronu mezi dvěma stacionárními hladinami dojde k vyzáření fotonu o energii odpovídající rozdílu energií těchto hladin.

Tento jednoduchý Bohrovův model atomu není řešením výše uvedeného paradoxu, jde spíše o postulování nebo konstatování experimentálně známých skutečností. Navíc je tento model aplikovatelný jen na nejjednodušší atomy s jediným elektronem v obalu (H, He⁺). Tento model ale poprvé správně určil hladiny energie elektronu v atomu vodíku a vysvětlil spektrum atomu vodíku.

Heisenbergovy relace neurčitosti:

Při měření polohy a hybnosti objektu mikrosvěta budou nepřesnosti měření Δx , Δp splňovat relaci (přes k se nesčítá)

$$\Delta x_k \Delta p_k \geq \frac{\hbar}{2} \quad ; \quad k = 1, 2, 3 \quad . \quad (2.4)$$

Čím přesněji určíme polohu objektu, tím méně přesně určíme jeho hybnost a naopak. Samotný akt měření ovlivňuje náš objekt, ale relace (2.4) je splněna i tehdy, neprovedeme-li měření vůbec. Jde o principiální hranici danou přírodou, za kterou nelze nahlédnout.

Například obyčejný ohyb světla na štěrbíně lze chápat jako důsledek relací neurčitosti pro fotony. Průchod fotonů štěrbínou není nic jiného než pokus o určení jejich polohy y s přesností Δy (velikost štěrbiny). Fotony, které prošly štěrbínou určitě měly v okamžiku průchodu souřadnici y rovnou souřadnici y štěrbiny. Zmenšíme-li šířku štěrbiny Δy , zvýšíme přesnost měření y ; podle relací (2.4) se ale zvýší nepřesnost Δp_y určení odpovídající komponenty hybnosti. Výsledkem je známý ohybový jev - fotony za štěrbínou vyletují s danou pravděpodobností do různých směrů se střední kvadratickou fluktuací hybnosti Δp_y , danou Heisenbergovými relacemi neurčitosti.



Výčet experimentálních faktů, které jsme uvedli výše není zdaleka úplný. Všechny ale přispěly ke zrodu kvantové teorie, popisující pro nás nezvyklý svět atomů a elementárních částic. Podejme nyní stručný přehled jejího vývoje. V roce 1925 formuloval Werner Heisenberg ve svých 25 letech *maticovou mechaniku* - každé dynamické proměnné přiřadil čtvercovou matici (zpravidla nekonečnou), jejíž vlastní čísla byly měřitelné hodnoty příslušné veličiny. Šlo o teorii pramenící z vynikající intuice, na základě které bylo možné určit například energetická spektra různých atomů (nejen vodíku).

V roce 1926 Erwin Schrödinger formuloval *vlnovou kvantovou mechaniku*. Řešením rovnice

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi = E \psi \quad (2.5)$$

pro vlnovou funkci ψ bylo opět možné určit hodnoty energie E pro objekt v potenciálním poli $V(x, y, z)$. Obě konstrukce - Heisenbergova i Schrödingerova - poskytovaly shodné výsledky. Spíše než o ucelenou teorii šlo v té době o návod, jak určit energetické spektrum.

Obecnou konstrukci kvantové teorie na Hilbertových prostorech provedl P. A. M. Dirac. Ukázalo se, že Heisenbergova a Schrödingerova mechanika se liší jen jinou volbou příslušného Hilbertova prostoru.

Až doposud byla budována nerelativistická kvantová teorie. Zobecnění na relativistický případ provedli Klein a Gordon pro spin částice $s = 0$ a Dirac pro spin částice $s = 1/2$ (Klein-Gordonova rovnice, Diracova rovnice). S *relativistickou kvantovou teorií* byla objasněna podstata spinu, Dirac předpověděl existenci pozitronu, ale především byl postaven základ pro vybudování *kvantové elektrodynamiky* (Dirac - 1949). Odsud byl již jen krůček ke vzniku *kvantové teorie elektromagnetického pole* (Dirac, Feynman), ve které dochází i ke kvantování samotného elektromagnetického pole (tzv. druhé kvantování). Výsledky kvantové teorie pole lze přehledně zapisovat pomocí tzv. Feynmanových diagramů.

Na základě různých symetrií v přírodě se od 60. let bouřlivě vyvíjí *kalibrační teorie*, například *Weinberg-Salamova teorie elektroslabé interakce*, která sjednocuje teoretický pohled na interakci elektromagnetickou a slabou, rozvíjí se *kvantová chromodynamika* - teorie silné interakce, teorie *GUT* sjednocující elektroslabou a silnou interakci a probíhají intenzivní pokusy o formulaci Einstein-Diracových rovnic supersymetrických teorií *SUSY* pokoušejících se o jednotný popis všech čtyř interakcí. Lidstvo stále více poznává svět elementárních částic a jeho zákonitosti.

Následující kapitulu budeme věnovat matematice, kterou je třeba znát pro pochopení kvantové teorie. Vlastní stavbou kvantové teorie se budeme zabývat až v kapitole 2.3 a následujících.

2.2. (M) OPERÁTORY V KVANTOVÉ TEORII

V této kapitole se budeme zabývat nejdůležitější matematikou potřebnou v kvantové teorii. Veškeré úvahy jsou z důvodu jednoduchosti provedeny pro případ, kdy vlastní čísla operátorů jsou navzájem různá a tvoří spočetnou množinu. Obecnější případy vícenásobných vlastních čísel a spojitého spektra jsou krátce diskutovány v závěru kapitoly.

2.2.1. Unitární prostory (prostory se skalárním součinem)

V kapitole 1.4.1. jsme rozšířili pojem vektoru na obecnější objekty než jsou uspořádané trojice a zavedli lineární vektorový prostor. Pozorně si znovu tuto pasáž přečtěte! Nyní analogicky rozšíříme pojem skalárního součinu pro různé lineární vektorové prostory. Budeme důsledně používat Diracovu symboliku, ve které jsou prvky lineárních vektorových prostorů značeny symboly $|\mathbf{f}\rangle, |\mathbf{x}\rangle, |\mathbf{a}\rangle$ a skalární součiny $\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle, \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle, \langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle$, atd.

R^3 prostor reálných trojic

$$|\mathbf{f}\rangle = (f_1, f_2, f_3) \quad , \quad |\mathbf{g}\rangle = (g_1, g_2, g_3) \quad , \\ \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle \equiv f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3 = f_k g_k \quad \text{skalární součin} \quad .$$

Norma vektoru (velikost) se definuje vztahem

$$\|\mathbf{f}\| \equiv \sqrt{\langle \mathbf{f} | \mathbf{f} \rangle} \stackrel{\text{pro } R^3}{=} \sqrt{f_1^2 + f_2^2 + f_3^2} \quad . \quad (2.6)$$

Pro reálné trojice znázorněné jako úsečky opatřené šipkami je norma vektoru rovna délce úsečky a platí $\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = \|\mathbf{f}\| \cdot \|\mathbf{g}\| \cdot \cos \alpha$, kde α je úhel sevřený oběma vektory. Z tohoto vztahu plyne okamžitě *Schwartzovo lemma*:

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle \leq \|\mathbf{f}\| \cdot \|\mathbf{g}\| \quad . \quad (2.7)$$

Výsledkem operace skalárního součinu je číslo, v případě lineárního vektorového prostoru R^3 reálné číslo, v obecném případě bude výhodné uvažovat i o čísle komplexním. Norma vektoru (velikost) musí ale vždy být nezáporné reálné číslo.

R^N prostor reálných N -tic

$$|\mathbf{f}\rangle = (f_1, \dots, f_N) \quad , \quad |\mathbf{g}\rangle = (g_1, \dots, g_N) \quad ; \quad f_l, g_l \in R \quad , \\ \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle \equiv f_1 g_1 + \dots + f_N g_N = \sum_{k=1}^N f_k g_k = f_k g_k \quad .$$

V platnosti zůstávají definice normy i Schwartzovo lemma.

C^N prostor komplexních N -tic

$$|\mathbf{f}\rangle = (f_1, \dots, f_N) \quad , \quad |\mathbf{g}\rangle = (g_1, \dots, g_N) \quad ; \quad f_l, g_l \in C \quad , \\ \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle \equiv f_1^* g_1 + \dots + f_N^* g_N = \sum_{k=1}^N f_k^* g_k = f_k^* g_k \quad .$$

Skalární součin definujeme v jednom z argumentů komplexně sdružený (dohodou v levém). Pro komplexní číslo $z = a + i b$ je velikost (norma) čísla dána vztahem

$$|z| = \sqrt{z^* z} = \sqrt{(a - ib)(a + ib)} = \sqrt{a^2 + b^2} \quad .$$

Právě proto, aby pro komplexní čísla zůstalo v platnosti, že norma vektoru je odmocnina skalárního součinu vektoru se sebou samým, je v definici skalárního součinu komplexní sdružení v jednom z argumentů. Při výše uvedené definici skalárního součinu bude výsledkem sice komplexní číslo, ale norma vektoru zůstane reálná nezáporná:

$$\|\mathbf{f}\| \equiv \sqrt{\langle \mathbf{f} | \mathbf{f} \rangle} = \sqrt{f_1^* f_1 + \dots + f_N^* f_N} = \sqrt{|f_1|^2 + \dots + |f_N|^2} \geq 0.$$

Opět platí Schwartzovo lemma.

l^2 prostor komplexních posloupností (N -tice s $N \rightarrow \infty$)

$$|\mathbf{f}\rangle = \{f_1, \dots, f_n, \dots\} = \{f_l\}_{l=1}^{\infty}, |\mathbf{g}\rangle = \{g_l\}_{l=1}^{\infty}; f_l, g_l \in \mathbb{C},$$

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle \equiv f_1^* g_1 + \dots + f_n^* g_n + \dots = \sum_{k=1}^{\infty} f_k^* g_k = f_k^* g_k.$$

Takto definovaný skalární součin má smysl jen pro konvergentní posloupnosti. Do prostoru l^2 můžeme zahrnout jen takové prvky $|\mathbf{f}\rangle$, pro které je $\|\mathbf{f}\| < \infty$, tj. požadujeme

$$\sum_{k=1}^{\infty} f_k^* f_k < \infty \quad \text{pro } \forall |\mathbf{f}\rangle \in l^2.$$

Potom je

$$|\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle| = \left| \sum_{k=1}^{\infty} f_k^* g_k \right| \leq \|\mathbf{f}\| \cdot \|\mathbf{g}\| < \infty \quad \text{pro } \forall |\mathbf{f}\rangle, |\mathbf{g}\rangle \in l^2,$$

neboť Schwartzovo lemma platí i v případě nekonečných posloupností.

$L^2(-\infty, \infty)$ prostor komplexních funkcí reálné proměnné

Při dalším zobecnění prostoru l^2 si můžeme index k představit spojitý. Místo k budeme psát $x : f_x$. Výraz f_x není ale nic jiného než komplexní funkce reálné proměnné (spojitého indexu), kterou je zvykem zapisovat ve tvaru $f(x)$, tj.

$$|\mathbf{f}\rangle \equiv f_x \equiv f(x), \quad |\mathbf{g}\rangle \equiv g_x \equiv g(x), \quad ; \quad x \in \mathbb{R}, \quad f, g \in \mathbb{C},$$

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) g(x) dx.$$

Analogicky jako v l^2 je třeba do prostoru L^2 zahrnout jen prvky s $\|\mathbf{f}\| < \infty$, tj.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) f(x) dx < \infty \quad \text{pro } \forall f(x) \in L^2.$$

Potom je

$$|\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle| = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) g(x) dx \right| \leq \|\mathbf{f}\| \cdot \|\mathbf{g}\| < \infty \quad \text{pro } \forall |\mathbf{f}\rangle, |\mathbf{g}\rangle \in L^2$$

a skalární součin má smysl. Schwartzovo lemma platí i pro integrály. L^2 se někdy nazývá *prostor funkcí integrovatelných s kvadrátem*. Lze ho definovat i pro jiný definiční obor než $(-\infty, \infty)$, potom píšeme $L^2(M)$, kde M je definiční obor funkcí $f(x) \in L^2(M)$.

Nyní můžeme přistoupit k obecné definici prostorů se skalárním součinem.

UNITÁRNÍ PROSTOR (prostor se skalárním součinem) - unitárním prostorem nazveme lineární vektorový prostor V (s operací $+: V \times V \rightarrow V$ a operací $\cdot: \mathbb{C} \times V \rightarrow V$), na kterém je definována další operace

$$\langle | \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$$

(tzv. skalární součin) s vlastnostmi

- 1) $\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} + \mathbf{h} \rangle = \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle + \langle \mathbf{f} | \mathbf{h} \rangle$,
- 2) $\langle \mathbf{f} | \alpha \mathbf{g} \rangle = \alpha \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle$,
- 3) $\langle \mathbf{g} | \mathbf{f} \rangle = \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle^*$ ($\Rightarrow \langle \alpha \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = \alpha^* \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle$),
- 4) $\langle \mathbf{f} | \mathbf{f} \rangle \geq 0$; $\langle \mathbf{f} | \mathbf{f} \rangle = 0 \Leftrightarrow |\mathbf{f}\rangle = 0$

Poznámky:

- 1) Přidáním operace $[\cdot, \cdot]$ z lineárního vektorového prostoru získáme Lieovu algebru, přidáním operace $\langle | \rangle$ získáme unitární prostor.
- 2) První dvě operace v definici znamenají linearitu v pravém argumentu. Z třetí operace plyne antilinearita v levém argumentu (aditivnost + vytknutí komplexně sdružené konstanty).
- 3) Symbolika zápisu pochází od P. A. M. Diraca. Nazývá se také braketová symbolika nebo brakety (z anglického bracket = závorka).
 $\langle | \rangle$ „bracket“
 $\langle |$ „bra“ (lze matematicky definovat, duál, naznačená operace skalárního součinu)
 $| \rangle$ „ket“ (vektor z V)
- 4) Pro komplexní N -tice lze interpretovat $|\mathbf{f}\rangle$ jako sloupcovou matici, $\langle \mathbf{f} |$ jako transponovanou komplexně sdruženou matici:

$$|\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix} ; \quad \langle \mathbf{f} | = (f_1^* \quad \dots \quad f_N^*)$$

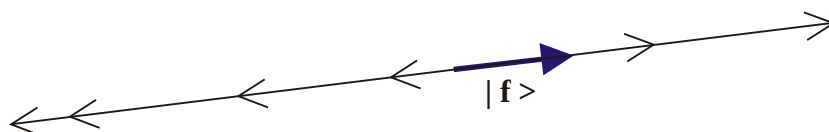
Potom je skalární součin

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = (f_1^* \quad \dots \quad f_N^*) \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix} = f_k^* g_k$$

definován za pomoci maticového násobení. Pro jiné prostory než n -tice není pro naše účely třeba jednotlivé části skalárního součinu $\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle$ nějak interpretovat.

- 5) Pro L^2 lze chápat $\langle \mathbf{f} | = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) \dots dx$ jako naznačenou operaci skalárního součinu. Je jen třeba doplnit příslušnou funkci, na kterou operace působí. Podobná situace je u derivování, napíšeme-li jen d/dx .

Paprsek - necht' V je unitární prostor, $|\mathbf{f}\rangle$ jeho nenulový prvek. Paprskem nataženým na $|\mathbf{f}\rangle$ nazveme množinu prvků $\{|\mathbf{g}\rangle; |\mathbf{g}\rangle = \alpha |\mathbf{f}\rangle; \alpha \in \mathbb{C} \setminus \{0\}, |\mathbf{f}\rangle, |\mathbf{g}\rangle \in V\}$.



Hilbertův prostor - úplný unitární prostor (hranice prostoru je jeho součástí).

Separabilní Hilbertův prostor - Hilbertův prostor se spočetnou bází.

2.2.2. Operátory

Operátorem rozumíme zobrazení

$$\hat{\mathbf{A}}: V \rightarrow V,$$

které prvku $|\mathbf{f}\rangle$ prostoru V přiřazuje prvek $|\mathbf{g}\rangle$ tohoto prostoru:

$$\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{g}\rangle.$$

V platnosti zůstává běžné názvosloví používané pro zobrazení (*vzor, obraz, definiční obor, obor hodnot, ...*).

Příklad 1: R^3 Operátorem na R^3 může být libovolná matice 3×3 , například

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{A}} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}; \quad |\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \\ \hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix} = |\mathbf{g}\rangle, \quad \text{obecně} \\ \hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_3 \\ f_2 + f_3 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Příklad 2: $L^2(-\infty, \infty)$

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{D}} &\equiv \frac{d}{dx}; \quad |\mathbf{f}\rangle = x e^{-x} \Rightarrow \\ \hat{\mathbf{D}}|\mathbf{f}\rangle &= \frac{d}{dx}(x e^{-x}) = (1-x)e^{-x} = |\mathbf{g}\rangle.\end{aligned}$$

Jednotkový operátor: $\hat{\mathbf{1}}|\mathbf{f}\rangle \equiv |\mathbf{f}\rangle$. Pro n -tice je jednotkovým operátorem diagonální matice s jednotkami na diagonále (jednotková matice) - ověřte!

Kvadrát operátoru: Druhou mocninu operátoru můžeme definovat, je-li obor funkčních hodnot operátoru podmnožinou jeho definičního oboru, potom

$$\hat{\mathbf{A}}^2|\mathbf{f}\rangle \equiv \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle).$$

Příklad 3: Operátor derivace

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{D}} &\equiv \frac{d}{dx}; \quad |\mathbf{f}\rangle = e^{-x^2} \Rightarrow \\ \hat{\mathbf{D}}^2|\mathbf{f}\rangle &\equiv \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}e^{-x^2}\right) = \frac{d}{dx}(-2xe^{-x^2}) = (-2 + 4x^2)e^{-x^2}.\end{aligned}$$

Mocnina operátoru: Analogicky definujeme indukci obecnou mocninu operátoru

$$\hat{\mathbf{A}}^n|\mathbf{f}\rangle \equiv \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{A}}^{n-1}|\mathbf{f}\rangle).$$

Funkce operátoru: Necht' $f(x)$ je analytická funkce s Taylorovým rozvojem

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k.$$

Potom můžeme definovat funkci operátoru

$$f(\hat{\mathbf{A}}) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \hat{\mathbf{A}}^k . \quad (2.8)$$

Připomeňme si zde rozvoje některých důležitých funkcí:

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + x^5 + \dots ,$$

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots ,$$

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} + \dots ,$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} - \dots ,$$

$$\operatorname{sh} x = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} + \dots ,$$

$$\operatorname{ch} x = 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} + \dots .$$

Příklad 4: Na prostoru $\mathbb{C}^2$ je zadán maticový operátor $\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$. Určete $\exp(\hat{\mathbf{A}})$.

$$\hat{\mathbf{A}}^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{1}} ,$$

$$\hat{\mathbf{A}}^3 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^2 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{1}} = \hat{\mathbf{A}} ,$$

$$\hat{\mathbf{A}}^4 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^3 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^2 = \hat{\mathbf{1}} ,$$

$$\vdots$$

$$\hat{\mathbf{A}}^{2n-1} = \hat{\mathbf{A}} , \quad \hat{\mathbf{A}}^{2n} = \hat{\mathbf{1}} , \quad n=1,2,\dots$$

Nyní již snadno nalezneme hledanou funkci matice:

$$\begin{aligned} \exp(\hat{\mathbf{A}}) &= 1 + \hat{\mathbf{A}} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^2}{2!} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^3}{3!} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^4}{4!} + \dots = \\ &= \left(1 + \frac{1}{2!} + \frac{1}{4!} + \frac{1}{6!} + \dots\right) \hat{\mathbf{1}} + \left(1 + \frac{1}{3!} + \frac{1}{5!} + \frac{1}{7!} + \dots\right) \hat{\mathbf{A}} = \\ &= \operatorname{ch}(1) \hat{\mathbf{1}} + \operatorname{sh}(1) \hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} 1 & -i \operatorname{sh} 1 \\ i \operatorname{sh} 1 & \operatorname{ch} 1 \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

Takto získají smysl například i výrazy typu $\sin(d/dx)$ a podobně. Později se naučíme funkci operátoru nalézt pomocí spektrálního rozvoje operátoru. Jde o efektivnější způsob než je Taylorův rozvoj.

Inversní operátor: Inversním operátorem k $\hat{\mathbf{A}}$ nazveme takový operátor $\hat{\mathbf{A}}^{-1}$, že

$$\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^{-1} = \hat{\mathbf{A}}^{-1} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{1}} .$$

K danému operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ může být nalezení inverzního operátoru značně obtížné, někdy inverzní operátor neexistuje vůbec.

Sdružený operátor: Sdruženým operátorem k $\hat{\mathbf{A}}$ nazveme takový operátor $\hat{\mathbf{A}}^+$, že

$$\langle \mathbf{f} | \hat{\mathbf{A}} \mathbf{g} \rangle = \langle \hat{\mathbf{A}}^+ \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle .$$

Působení operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ v pravé straně skalárního součinu dopadne stejně jako působení k němu sdruženého operátoru v levé části skalárního součinu. Sdružený operátor k $\hat{\mathbf{A}}$ nemusí vždy existovat.

Příklad 5:

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 2i \\ 0 & i \end{pmatrix} ; \quad \hat{\mathbf{A}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -i \end{pmatrix} ; \quad \hat{\mathbf{A}}^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -2i & -i \end{pmatrix} .$$

Skutečně

$$\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 2i \\ 0 & i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{1}} ,$$

$$\hat{\mathbf{A}}^{-1} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2i \\ 0 & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{1}} ;$$

$$\hat{\mathbf{A}} | \mathbf{g} \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 2i \\ 0 & i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 + 2i g_2 \\ i g_2 \end{pmatrix} ,$$

$$\hat{\mathbf{A}}^+ | \mathbf{f} \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -2i & -i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ -2i f_1 - i f_2 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\langle \mathbf{f} | \hat{\mathbf{A}} \mathbf{g} \rangle = \begin{pmatrix} f_1^* & f_2^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 + 2i g_2 \\ i g_2 \end{pmatrix} = f_1^* g_1 + 2i f_1^* g_2 + i f_2^* g_2 ,$$

$$\langle \hat{\mathbf{A}}^+ \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = \begin{pmatrix} f_1^* & 2i f_1^* + i f_2^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix} = f_1^* g_1 + 2i f_1^* g_2 + i f_2^* g_2 .$$

Poznámka: Nalézt sdružený operátor pro matice je velmi snadné, původní matici stačí komplexně sdružit a transponovat (překlopit kolem diagonály), tj. $\hat{\mathbf{A}}^+ = (\hat{\mathbf{A}}^*)^T$.

Uvedme nyní velmi užitečné vztahy pro výpočet inverzního a sdruženého operátoru pro součin dvou operátorů:

$$(\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{B}})^{-1} = \hat{\mathbf{B}}^{-1} \hat{\mathbf{A}}^{-1} , \quad (2.9)$$

$$(\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{B}})^+ = \hat{\mathbf{B}}^+ \hat{\mathbf{A}}^+ . \quad (2.10)$$

Jejich důkaz je triviální přímo z definice inverzního a sdruženého operátoru:

$$(\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{B}})^{-1} \cdot \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{1}} \quad / \quad \hat{\mathbf{B}}^{-1} \text{ zprava} ,$$

$$(\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{B}})^{-1} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{B}}^{-1} \quad / \quad \hat{\mathbf{A}}^{-1} \text{ zprava} ,$$

$$(\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{B}})^{-1} = \hat{\mathbf{B}}^{-1} \hat{\mathbf{A}}^{-1} .$$

Analogicky postupujeme pro sdružený operátor:

$$\langle (\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^+ \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = \langle \mathbf{f} | \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} \mathbf{g} \rangle = \langle \hat{\mathbf{A}}^+ \mathbf{f} | \hat{\mathbf{B}} \mathbf{g} \rangle = \langle \hat{\mathbf{B}}^+ \hat{\mathbf{A}}^+ \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle .$$

Komutativita operátorů: Pro operátory je obecně $\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} \neq \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}$. Říkáme, že operátory nekomutují. Míru nekomutativnosti můžeme posoudit za pomoci tzv. komutátoru

$$[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] \equiv \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} . \quad (2.11)$$

Je-li komutátor operátorů $\hat{\mathbf{A}}$, $\hat{\mathbf{B}}$ nulový, operátory komutují, je-li různý od nuly nekomutují. Výsledkem komutátoru je opět operátor. Uveďme nejdůležitější vlastnosti komutátorů (dokažte!)

- 1) $[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = -[\hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{A}}]$,
- 2) $[\hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{C}}] = [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{C}}] + [\hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{C}}]$,
- 3) $[\alpha \cdot \hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = \alpha \cdot [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}]$,
- 4) $[\hat{\mathbf{A}}, [\hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{C}}]] + [\hat{\mathbf{B}}, [\hat{\mathbf{C}}, \hat{\mathbf{A}}]] + [\hat{\mathbf{C}}, [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}]] = 0$.

To jsou ale právě definiční vlastnosti Lieovy algebry (1.20) až (1.23). Komutátory tvoří Lieovu algebru na prostoru operátorů.

Příklad 6: Mějme na L^2 dva operátory: $\hat{\mathbf{D}} = d/dx$ a $\hat{\mathbf{X}} = x$, například na prvek $|x^5\rangle$ působí takto

$$\hat{\mathbf{D}}|x^5\rangle = \frac{d}{dx}x^5 = 5x^4 , \quad \hat{\mathbf{X}}|x^5\rangle = x \cdot x^5 = x^6 .$$

Určeme jejich komutátor

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}]|\mathbf{f}\rangle &= (\hat{\mathbf{D}}\hat{\mathbf{X}} - \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{D}})|\mathbf{f}\rangle = \left(\frac{d}{dx}x - x\frac{d}{dx}\right)f(x) = \frac{d}{dx}(xf(x)) - x\frac{d}{dx}f(x) = \\ &= f(x) + xf'(x) - xf'(x) = f(x) = |\mathbf{f}\rangle \Rightarrow \\ [\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}]|\mathbf{f}\rangle &= |\mathbf{f}\rangle = \text{pro } \forall |\mathbf{f}\rangle \in L^2 \Rightarrow \\ [\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}] &= \hat{\mathbf{1}} . \end{aligned}$$

Podobně můžeme určovat i další komutační relace.

V celém tomto textu se budeme zabývat **lineárními operátory**, tj. operátory s lineární odezvou: $\hat{\mathbf{A}}(\alpha|\mathbf{f}\rangle + \beta|\mathbf{g}\rangle) = \alpha\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle + \beta\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{g}\rangle$. Všechny dosud uvedené operátory byly lineární.

V kvantové teorii se setkáme především se dvěma druhy lineárních operátorů - operátory *unitárními* a operátory *Hermitovými*. Uveďme nyní definice těchto operátorů.

UNIT ; RNŮ OPER ; TORY

Definice: unitární operátor zachovává skalární součin, tj.

$$|\mathbf{f}\rangle \rightarrow \hat{\mathbf{U}}|\mathbf{f}\rangle , \quad |\mathbf{g}\rangle \rightarrow \hat{\mathbf{U}}|\mathbf{g}\rangle \Rightarrow \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = \langle \hat{\mathbf{U}}\mathbf{f} | \hat{\mathbf{U}}\mathbf{g} \rangle . \quad (2.12)$$

Skalární součin se před a po působení unitárního operátoru nezmění.

Věta: Pro unitární operátory je sdružený a inverzní operátor totožný, tj.

$$\hat{\mathbf{U}}^+ = \hat{\mathbf{U}}^{-1} . \quad (2.12')$$

Důkaz: Z definice sdruženého operátoru víme, že

$$\langle \hat{U}f | \hat{U}g \rangle = \langle \hat{U}^+ \hat{U}f | g \rangle .$$

Pro zachování skalárního součinu (definice unitárního operátoru) je nutné, aby

$$\hat{U}^+ \hat{U} = \hat{1} ,$$

to ale podle definice inverzního operátoru právě znamená, že $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$.

Příklad 7: operátor $\hat{U} \equiv e^{ix}$ na prostoru L^2 je unitární

$$\begin{aligned} |f\rangle &= f(x) , & \hat{U}|f\rangle &= e^{ix} f(x) , \\ |g\rangle &= g(x) , & \hat{U}|g\rangle &= e^{ix} g(x) , \\ \langle \hat{U}f | \hat{U}g \rangle &= \int (e^{ix} f(x))^* e^{ix} g(x) dx = \int e^{-ix} f^*(x) e^{ix} g(x) dx = \\ &= \int f^*(x) g(x) dx = \langle f | g \rangle . \end{aligned}$$

HERMITOVY OPERÁTORY

Definice: Hermitův operátor působí v obou částech skalárního součinu stejně, tj.

$$\langle \hat{A}f | g \rangle = \langle f | \hat{A}g \rangle . \quad (2.13)$$

Věta: Pro Hermitův operátor je sdružený operátor shodný s operátorem původním, je samosdružený:

$$\hat{A}^+ = \hat{A} . \quad (2.13')$$

Důkaz: Plyne okamžitě z definice sdruženého operátoru.

Poznámka: V přesné matematice se definice samosdruženého a Hermitova operátoru nepatrně liší požadavky na definiční obor, pro naše účely nebudeme samosdružené a Hermitovy operátory rozlišovat. Vzhledem k tomu, že Hermitův operátor působí v obou částech skalárního součinu stejně, často se píše

$$\langle \hat{A}f | g \rangle = \langle f | \hat{A}g \rangle = \langle f | \hat{A} | g \rangle .$$

Centrální pozice $\hat{A}$ naznačuje, že podle vlastního uvážení můžeme operátorem zapůsobit vlevo či vpravo. Tato struktura se někdy nazývá sendvič.

Příklad 8: operátor $\hat{B} = i \frac{d}{dx}$ na prostoru $L^2(-\infty, \infty)$ je hermitovský

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}f | g \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(i \frac{d}{dx} f(x) \right)^* g(x) dx = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d f^*(x)}{dx} g(x) dx \stackrel{p. \text{ partes}}{=} \\ &= -i \left[f^*(x) g(x) \right]_{-\infty}^{\infty} + i \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{d g(x)}{dx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \left(i \frac{d g(x)}{dx} \right) dx = \langle f | \hat{B}g \rangle . \end{aligned}$$

Výraz v hranaté závorce je nulový, neboť funkce z $L^2(-\infty, \infty)$ jsou integrovatelné s kvadrátem na $(-\infty, \infty)$ a proto musí být

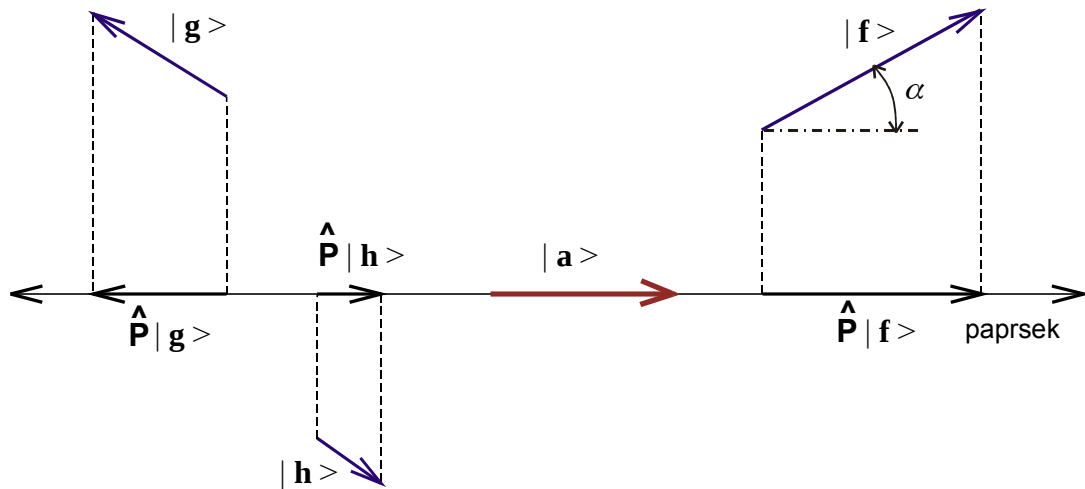
$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x) = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} g(x) = 0 \quad \text{pro } \forall f, g \in L^2 .$$

Samotný operátor derivace $\hat{D} = d/dx$ hermitovský není, při provedení integrace per partes by se zaměnilo znaménko a $\langle \hat{D}f | g \rangle = - \langle f | \hat{D}g \rangle$.

2.2.3. Projekční operátory

Cílem této kapitoly bude naučit se nacházet projekce vektorů do předem zadaného paprsku. Jde o úlohu, která má prvořadý význam nejen pro kvantovou teorii. Rozvoje do různých typů řad (například Fourierova řada) nejsou nic jiného než hledání projekcí zadané funkce do vektorů nějaké báze, které reprezentují paprsek v prostoru.

Z celého paprsku stačí vzít jediný vektor, který paprsek zcela popíše. Vybereme tento „reprezentativní“ vektor jednotkový, tj. tak, aby $\langle a | a \rangle = 1$, tj. $\|a\| = 1$. Snadno představitelná je situace v R^2 . Na obrázku vidíme jednotkový vektor $|a\rangle$, který reprezentuje paprsek a vektory $|f\rangle, |g\rangle, |h\rangle$, které do tohoto paprsku budeme promítat.



Projekce libovolného vektoru $|f\rangle$ má velikost $\|f\| \cdot \cos\alpha$ a směr $|a\rangle/\|a\|$. Znaménko funkce $\cos$ ve velikosti projekce určuje, zda promítaný vektor míří ve směru $|a\rangle$ nebo ve směru opačném. Projekci lze napsat jako součin její velikosti a směru:

$$\hat{P}|f\rangle = \|f\| \cdot \cos\alpha \frac{|a\rangle}{\|a\|} = \|f\| \cdot \frac{\langle a|f\rangle}{\|a\| \cdot \|f\|} \cdot \frac{|a\rangle}{\|a\|} = \frac{\langle a|f\rangle}{\|a\| \cdot \|a\|} |a\rangle = \frac{\langle a|f\rangle}{\langle a|a\rangle} |a\rangle.$$

Povšimněte si, že při úpravách výrazů v Diracově symbolice můžeme libovolně stěhovat čísla (normy vektorů a skalární součiny). Výraz pro projekci se skládá z koeficientu, který určuje velikost projekce a vektoru $|a\rangle$. Zapišeme-li formálně koeficient až za vektor, získáme operátorový tvar:

$$\hat{P}|f\rangle = |a\rangle \frac{\langle a|f\rangle}{\langle a|a\rangle} = \frac{|a\rangle \langle a|f\rangle}{\langle a|a\rangle}.$$

Označme

$$\hat{P} \equiv \frac{|a\rangle \langle a|}{\langle a|a\rangle}. \quad (2.14)$$

Tento výraz se nazývá projekčním operátorem. Sám o sobě význam nemá, jde o naznačenou operaci skalárního součinu, která musí být vykonána. Teprve zapůsobením $\hat{P}$ na nějaký vektor $|f\rangle$ dostaneme smysluplný výraz – projekci vektoru danou koeficientem $\langle a|f\rangle/\langle a|a\rangle$ a směrem vektoru $|a\rangle$. Situace je podobná operátoru d/dx , také jde jen o naznačenou derivaci, která musí být vykonána na konkrétní funkci. Bude-li vektor $|a\rangle$, do kterého promítáme jednotkový, výrazy se ještě zjednoduší:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}} &\equiv |\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|, \\ \hat{\mathbf{P}}|\mathbf{f}\rangle &\equiv |\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle.\end{aligned}\quad (2.15)$$

Koeficient projekce je $\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle$ a směr je $|\mathbf{a}\rangle$.

Příklad 9:

Nalezněte projekci vektoru $|\mathbf{f}\rangle$ do vektorů $|\mathbf{a}\rangle$ a $|\mathbf{b}\rangle$. Vektory jsou dány takto:

$$|\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}; \quad |\mathbf{a}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad |\mathbf{b}\rangle = \begin{pmatrix} -1 \\ +1 \end{pmatrix}.$$

Nejprve nalezneme projekční operátory:

$$\hat{\mathbf{P}}_a \equiv \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \frac{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (1 \ 1)}{(1 \ 1) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{2} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix},$$

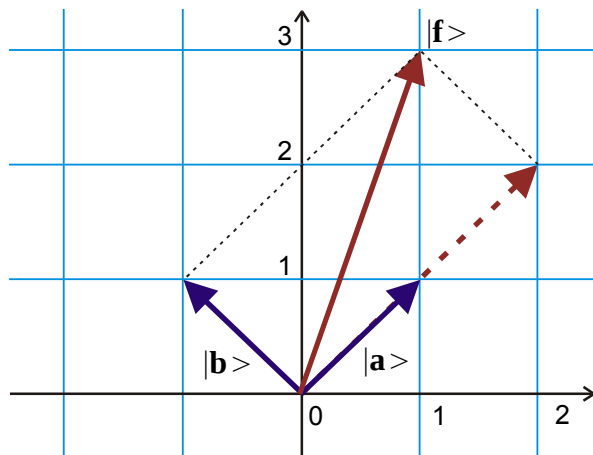
$$\hat{\mathbf{P}}_b \equiv \frac{|\mathbf{b}\rangle\langle\mathbf{b}|}{\langle\mathbf{b}|\mathbf{b}\rangle} = \frac{\begin{pmatrix} -1 \\ +1 \end{pmatrix} \cdot (-1 \ +1)}{(-1 \ +1) \cdot \begin{pmatrix} -1 \\ +1 \end{pmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{pmatrix}}{2} = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Nyní snadno nalezneme hledané projekce:

$$\hat{\mathbf{P}}_a|\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix},$$

$$\hat{\mathbf{P}}_b|\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ +1 \end{pmatrix}.$$

Využijme nyní tohoto příkladu a vyzkoušejte si, že platí jednoduché a užitečné relace. Výpočty jsou natolik snadné, že zde uvedu jen výsledky:



1. $\hat{\mathbf{P}}_a^+ = \hat{\mathbf{P}}_a$; $\hat{\mathbf{P}}_b^+ = \hat{\mathbf{P}}_b$.
2. $\hat{\mathbf{P}}_a^2 = \hat{\mathbf{P}}_a$; $\hat{\mathbf{P}}_b^2 = \hat{\mathbf{P}}_b$.
3. $\hat{\mathbf{P}}_a + \hat{\mathbf{P}}_b = \hat{\mathbf{1}}$.

První relace znamená, že projekční operátory jsou hermitovské. Pro matice je význam jednoduchý: Matice se po překlopení kolem hlavní diagonály a následném komplexním sdružení nezmění. Druhá relace má také velmi jednoduchý význam: Projekce dvakrát provedená po sobě (kvadrát operátoru) je shodná s projekcí provedenou jednou. Obě vlastnosti jsou pro projekční operátory charakteristické a většinou se považují za definici projekčního operátoru:

Definice: Projekčním operátorem nazveme takový lineární operátor, který je hermitovský a platí $\hat{\mathbf{P}}^2 = \hat{\mathbf{P}}$.

Poznámka: Snadno lze ukázat, že obě vlastnosti jsou splněny pro definici 2.14, například pro druhou vlastnost:

$$\hat{\mathbf{P}}^2 = \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} \cdot \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \hat{\mathbf{P}}.$$

V prostředním výrazu jsme zkrátali skalární součin v čitateli (uprostřed) s jedním ze skalárních součinů ve jmenovateli. Jde o prostá komplexní čísla, která lze vytknout před výrazy a krátit.

Význam třetí relace je také snadno pochopitelný: Vektory $|\mathbf{a}\rangle$ a $|\mathbf{b}\rangle$ jsou navzájem kolmé a v rovině tvoří ortonormální bázi (bázi složenou z kolmých a jednotkových vektorů). Projekce do těchto vektorů nejsou ničím jiným než rozkladem původního vektoru do této báze. Zkuste si obě projekce sečíst. Dostanete původní vektor. Právě matematickým vyjádřením faktu, že součet všech projekcí dá původní vektor je třetí relace:

$$\hat{\mathbf{P}}_a + \hat{\mathbf{P}}_b = \hat{\mathbf{1}} \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{P}}_a |\mathbf{f}\rangle + \hat{\mathbf{P}}_b |\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{f}\rangle.$$

Někdy se této relaci říká relace úplnosti. Pokud je daná báze úplná (nechybí v ní žádný vektor), potom je součet všech projekčních operátorů roven jednotkovému operátoru. To znamená, že součet všech projekcí libovolného vektoru dá původní vektor.

2.2.4. Rozvoj prvku do báze

Mějme v unitárním prostoru spočetnou bázi (maximální množinu lineárně nezávislých vektorů) $\{|\mathbf{e}_k\rangle\}$. Vhodnou lineární kombinací jednotlivých prvků můžeme vždy zajistit, aby prvky báze byly navzájem kolmé a měli jednotkovou velikost. Takové prvky budeme označovat jen pořadovým číslem: $|k\rangle$. Báze složená z vektorů $|k\rangle$ má dvě základní vlastnosti:

$$\langle k | l \rangle = \delta_{kl}, \quad (2.16)$$

$$\sum_k |k\rangle\langle k| = \hat{\mathbf{1}}. \quad (2.17)$$

Vlastnost (2.16) je vyjádřením ortonormality. Skalární součin dvou různých vektorů je nulový (jsou navzájem kolmé) a dvou stejných je roven jedné (vektory báze mají jednotkovou velikost). Vlastnost (2.17) je relací úplnosti báze. Součet všech projekčních operátorů dá jednotkový operátor, tj. součet všech projekcí libovolného vektoru dá původní vektor. V relaci úplnosti je možné vynechat sumaci a využít Einsteinovu sumační konvenci. V případě neseperabilních prostorů s nespočetnou bází mají obě relace tvar:

$$\langle x | y \rangle = \delta(x - y), \quad (2.16')$$

$$\int |x\rangle\langle x| dx = \hat{\mathbf{1}}. \quad (2.17')$$

Na pravé straně relace ortonormality je místo Kroneckerova symbolu Diracova δ distribuce a v relaci úplnosti je místo sumace projekčních operátorů integrace.

Rozvoj prvku do báze je v Diracově symbolice mimořádně jednoduchý. Stačí před prvek vsunout relaci úplnosti v podobě jednotkového operátoru:

$$|\mathbf{f}\rangle = \hat{\mathbf{1}} |\mathbf{f}\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k| |\mathbf{f}\rangle = \sum_k c_k |k\rangle, \quad c_k \equiv \langle k | \mathbf{f} \rangle. \quad (2.18)$$

Koeficienty rozvoje jsou dány skalárním součinem rozvíjeného vektoru s prvkem báze.

Příklad 10: Fourierova řada

Uvažujme prostor $L^2(0, 2\pi)$ periodických funkcí integrovatelných s kvadrátem. Díky požadavku $f(0) = f(2\pi)$ tvoří v tomto prostoru úplnou bázi soustava funkcí (viz elementární učebnice z matematiky nebo látka z prvních semestrů):

$$|f_k\rangle = e^{ikx}, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Tyto funkce jsou sice navzájem kolmé, ale nejsou jednotkové:

$$\langle f_k | f_l \rangle = \int_0^{2\pi} e^{-ikx} e^{ilx} dx = \int_0^{2\pi} e^{i(l-k)x} dx = \begin{cases} 0 & \text{pro } l \neq k \\ 2\pi & \text{pro } l = k \end{cases} = 2\pi \delta_{kl}.$$

Nulovost skalárního součinu pro $l \neq k$ plyne z periodičnosti trigonometrických funkcí na intervalu $\langle 0, 2\pi \rangle$. Vydělíme-li prvky báze jejich velikostí, získáme ortonormální bázi

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

pro kterou platí relace ortonormality (2.16) a relace úplnosti (2.17). Rozvoj libovolné funkce z našeho prostoru je potom

$$|\mathbf{f}\rangle = \sum_k c_k |k\rangle, \quad c_k \equiv \langle k | \mathbf{f} \rangle,$$

neboli

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k c_k e^{ikx}, \quad c_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} e^{-ikx} f(x) dx,$$

což jsou známé vztahy pro Fourierovu řadu. Nezapomeňte, že skalární součin je v levém argumentu komplexně sdružený, proto je v koeficientu c_k minus.

Reprezentace

V dané bázi můžeme snadno přepsat operátorovou rovnici $\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{g}\rangle$. Vložíme před vektor jednotkový operátor.

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle &= |\mathbf{g}\rangle \Rightarrow \\ \sum_l \hat{\mathbf{A}}|l\rangle \langle l|\mathbf{f}\rangle &= |\mathbf{g}\rangle \quad / \langle k| \text{ zleva} \Rightarrow \\ \sum_l \langle k|\hat{\mathbf{A}}|l\rangle \langle l|\mathbf{f}\rangle &= \langle k|\mathbf{g}\rangle. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Získaný výraz není ale nic jiného než maticové násobení

$$\begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} & \cdots \\ \vdots & \ddots & & \\ A_{n1} & & A_{nn} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_n \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \hat{\mathbf{A}} &\rightarrow A_{kl} \equiv \langle k|\hat{\mathbf{A}}|l\rangle, \\ |\mathbf{f}\rangle &\rightarrow f_l \equiv \langle l|\mathbf{f}\rangle, \\ |\mathbf{g}\rangle &\rightarrow g_l \equiv \langle l|\mathbf{g}\rangle, \end{aligned}$$

neboli

$$\sum_l A_{kl} f_l = g_k. \quad (2.20)$$

Jestliže operátoru přiřadíme čtvercovou matici $\hat{\mathbf{A}} \rightarrow A_{kl} \equiv \langle k|\hat{\mathbf{A}}|l\rangle$ a vektoru sloupcovou matici $|\mathbf{f}\rangle \rightarrow f_l \equiv \langle l|\mathbf{f}\rangle$, můžeme s operátorovými výrazy zacházet jako s obyčejným násobením matic. Hovoříme o tom, že jsme zvolili reprezentaci daného prostoru. Ve skutečnosti nejde o nic jiného než o volbu konkrétní báze. Má-li báze nekonečný spočetný počet členů, budou vektorům odpovídat posloupnosti a operátorům nekonečné matice. Vidíme, že v libovolném separabilním Hilbertově prostoru existuje jednoznačné zobrazení

prvků na prostor posloupností l^2 (isomorfismus). V případě neseparabilních prostorů s nespočetnou bází získáme obdobnou relaci:

$$\int \langle x | \hat{\mathbf{A}} | y \rangle \langle y | \mathbf{f} \rangle dy = \langle x | \mathbf{g} \rangle, \quad (2.19')$$

což není nic jiného než integrální transformace.

$$\int A(x, y) f(y) dy = g(x); \quad (2.20')$$

$$A(x, y) \equiv \langle x | \hat{\mathbf{A}} | y \rangle, \quad f(y) \equiv \langle y | \mathbf{f} \rangle, \quad g(x) \equiv \langle x | \mathbf{g} \rangle$$

s jádrem $A(x, y)$. Veličiny x, y hrají úlohu spojitého indexu.

Přechod mezi bázemi

Máme-li k dispozici dvě sady bázových vektorů $\{|k\rangle\}$ a $\{|k'\rangle\}$, bude mezi koeficienty rozvoju platit jednoduchý vztah, který opět odvodíme jen vložením relace úplnosti:

$$f'_k \equiv \langle k' | \mathbf{f} \rangle = \sum_k \langle k' | k \rangle \langle k | \mathbf{f} \rangle = \sum_k S_{k'k} f_k, \quad S_{k'k} \equiv \langle k' | k \rangle.$$

Matice $\mathbf{S}$ se nazývá matice přechodu.

2.2.5. Spektrální teorie

V teorii operátorů patří k základním úlohám nalézt směry, ve kterých se působení daného operátoru projevuje jako komplexní natahování:

$$\hat{\mathbf{A}} | \mathbf{f} \rangle = \lambda | \mathbf{f} \rangle; \quad \lambda \in \mathbb{C}. \quad (2.21)$$

Vektor $| \mathbf{f} \rangle$ se nazývá *vlastním vektorem* (charakteristickým vektorem) operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ a koeficient natahování λ *vlastním číslem* (charakteristickým číslem). Například u tenzoru setrvačnosti leží vlastní vektory ve směru os, ve kterých těleso při rotaci nehází. U lineárních operátorů je i každý násobek vlastního vektoru vlastním vektorem se stejným vlastním číslem. Jde tedy o celý paprsek v Hilbertově prostoru, neboli *vlastní směr*. Takových vlastních směrů a čísel může existovat u lineárních operátorů celá řada, jejich maximální počet je roven *dimenzi prostoru* (počtu prvků báze). U separabilních prostorů můžeme tedy úlohu nalezení vlastních čísel a vektorů formulovat rovnicemi:

$$\hat{\mathbf{A}} | \mathbf{f}_k \rangle = \lambda_k | \mathbf{f}_k \rangle; \quad k = 1, 2, \dots; \quad \lambda_k \in \mathbb{C}. \quad (2.21')$$

Množina všech vlastních čísel $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n, \dots\}$ se nazývá *spektrum operátoru* $\hat{\mathbf{A}}$.

Nalezneme-li spektrum operátoru a jeho vlastní vektory, můžeme relativně snadno řešit rovnice obsahující tento operátor. Pomocí vlastních čísel a vektorů lze například řešit soustavy obyčejných lineárních diferenciálních rovnic (viz kapitola 1.5 první části sylabu).

Věta: Hermitovský operátor má reálná vlastní čísla a vlastní vektory dvou různých vlastních čísel jsou navzájem kolmé.

Důkaz: Při výpočtu skalárního součinu využijeme hermitovosti operátoru a ponecháme operátor jednou působit v pravé části skalárního součinu a podruhé v levé části. Výsledek musí být stejný:

$$\langle \mathbf{f}_k | \hat{\mathbf{A}} \mathbf{f}_k \rangle = \begin{cases} \langle \mathbf{f}_k | \lambda_k \mathbf{f}_k \rangle = \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_k \rangle \\ \langle \hat{\mathbf{A}} \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_k \rangle = \lambda_k^* \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_k \rangle \end{cases} \Rightarrow \lambda_k = \lambda_k^* \Rightarrow \lambda_k \in \mathbb{R}.$$

Vlastní čísla jsou tedy reálná. V druhé části budeme postupovat obdobně. Pro vlastní číslo z levé části skalárního součinu využijeme první části důkazu:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{f}_k | \hat{\mathbf{A}} \mathbf{f}_l \rangle &= \begin{cases} \langle \mathbf{f}_k | \lambda_l \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_l \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \\ \langle \hat{\mathbf{A}} \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_k^* \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \end{cases} \\
 &\Downarrow \\
 \lambda_l \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \\
 &\Downarrow \\
 (\lambda_l - \lambda_k) \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= 0 \\
 &\Downarrow \\
 \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= 0 \text{ pro } k \neq l .
 \end{aligned}$$

Věta: Vlastní čísla unitárního operátoru leží na komplexní jednotkové kružnici a vlastní vektory dvou různých vlastních čísel jsou navzájem kolmé.

Důkaz: Při důkazu vyjdeme s definice unitárního operátoru:

$$\langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_k \rangle = \langle \hat{\mathbf{U}} \mathbf{f}_k | \hat{\mathbf{U}} \mathbf{f}_k \rangle = \lambda_k^* \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_k \rangle .$$

Porovnáním prvního a posledního výrazu je zřejmé, že

$$\lambda_k \lambda_k^* = 1 \quad \Rightarrow \quad |\lambda_k| = 1.$$

Zbývá dokázat kolmost vektorů. Budeme postupovat analogicky jako v případě hermitovského operátoru. V levé části skalárního součinu využijeme opět první části důkazu:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{f}_k | \hat{\mathbf{U}} \mathbf{f}_l \rangle &= \begin{cases} \langle \mathbf{f}_k | \lambda_l \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_l \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \\ \langle \hat{\mathbf{U}}^{-1} \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle = \frac{1}{\lambda_k^*} \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \end{cases} \\
 &\Downarrow \\
 \lambda_l \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \\
 &\Downarrow \\
 (\lambda_l - \lambda_k) \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= 0 \\
 &\Downarrow \\
 \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= 0 \text{ pro } k \neq l .
 \end{aligned}$$

Poznámky:

1. Reálné vlastní hodnoty hermitovských operátorů budou v kvantové teorii využity jako možné výsledky měření dynamické proměnné, které odpovídá operátor $\hat{\mathbf{A}}$. Ani kolmost vlastních vektorů není bez užitku. Vhodný hermitovský operátor nám může v podobě svých vlastních vektorů „porodit“ výhodnou ortonormální bázi v Hilbertově prostoru.
2. Unitární operátory se v kvantové teorii využívají k popisu časového vývoje stavu objektu.

Příklad 11: Určeme vlastní čísla a vektory matice $\hat{\mathbf{A}}$ z příkladu 4:

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ,$$

$$\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle = \lambda|\mathbf{f}\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Rovnice má netriviální řešení jen pokud je determinant roven nule. Z této podmínky plynou dvě možné hodnoty vlastního čísla λ . Pro každou z nich potom již snadno učíme příslušný vlastní vektor. Pozor! Podmínka pro determinant činí rovnice pro složky vlastního vektoru závislé. To je ale v pořádku, řešení rovnic musí mít jeden volný parametr, tak aby představovalo celý paprsek v prostoru. K vlastním vektorům můžeme najít normované vlastní vektory a příslušné projekční operátory. Výsledek je:

$$\lambda_1 = -1, \quad |\mathbf{f}_1\rangle = c \begin{pmatrix} +i \\ +1 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} +i \\ +1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{P}}_1 = |1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & +i \\ -i & 1 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_2 = +1, \quad |\mathbf{f}_2\rangle = c \begin{pmatrix} -i \\ +1 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ +1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{P}}_2 = |2\rangle\langle 2| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ +i & 1 \end{pmatrix}.$$

Povšimněte si, že matice $\mathbf{A}$ byla hermitovská (matice překlopená kolem diagonály a komplexně sdružená je shodná s původní maticí). Proto má reálná vlastní čísla a vlastní vektory tvoří ortonormální soustavu:

$$\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1, \quad \langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = 0.$$

Tato soustava vektorů je úplná, tvoří bázi v prostoru komplexních dvojic:

$$|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| = \hat{\mathbf{P}}_1 + \hat{\mathbf{P}}_2 = \hat{\mathbf{1}}.$$

Věta o spektrálním rozvoji: Nechť $\hat{\mathbf{A}}$ je lineární operátor s množinou vlastních vektorů, která tvoří úplnou ortonormální bázi v Hilbertově prostoru. Potom můžeme pro analytickou funkci operátoru definovanou Taylorovým rozvojem (2.8) psát

$$f(\hat{\mathbf{A}}) = \sum_k f(\lambda_k) |k\rangle\langle k| = \sum_k f(\lambda_k) \hat{\mathbf{P}}_k. \quad (2.22)$$

Důkaz: Nejprve si povšimněme působení mocnin operátoru na vlastní vektory:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}_k\rangle &= \lambda_k |\mathbf{f}_k\rangle, \\ \hat{\mathbf{A}}^2|\mathbf{f}_k\rangle &= \lambda_k \hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}_k\rangle = \lambda_k^2 |\mathbf{f}_k\rangle, \\ &\vdots \\ \hat{\mathbf{A}}^n|\mathbf{f}_k\rangle &= \lambda_k^n |\mathbf{f}_k\rangle, \\ &\Downarrow \\ f(\hat{\mathbf{A}})|\mathbf{f}_k\rangle &= \sum_n c_n \hat{\mathbf{A}}^n |\mathbf{f}_k\rangle = \sum_n c_n \lambda_k^n |\mathbf{f}_k\rangle = f(\lambda_k) |\mathbf{f}_k\rangle. \end{aligned}$$

V další fázi důkazu budeme funkcí operátoru působit již na obecný vektor. Provedeme ale jeho rozklad do báze složené z vlastních vektorů, kde působení známe z poslední rovnosti:

$$\underset{\uparrow}{f(\hat{\mathbf{A}})}|\mathbf{f}\rangle = \sum_k f(\hat{\mathbf{A}}) |k\rangle\langle k| \mathbf{f}\rangle = \sum_k f(\lambda_k) |k\rangle\langle k| \mathbf{f}\rangle.$$

To je ale přesně rovnost, kterou jsme chtěli dokázat. Vynecháme-li ve výrazech libovolný vektor $|\mathbf{f}\rangle$, na který operátory působí, dostáváme větu o spektrálním rozvoji.

Poznámky:

- 1) Má-li operátor vícenásobné vlastní číslo stupně N , není to na závadu. Vlastní vektory k vícenásobnému vlastnímu číslu tvoří celý podprostor P dimenze N a lze zvolit N nezávislých kolmých vlastních vektorů odpovídajících tomuto vícenásobnému číslu.

- 2) Je-li prostor neseperabilní, bude za některých dalších předpokladů možné větu o spektrálním rozvoji modifikovat do tvaru:

$$f(\hat{\mathbf{A}}) = \int f(\lambda_x) |x\rangle \langle x| dx \quad .$$

- 3) Pro vyjádření funkce operátoru je často mnohem jednodušší použít místo Taylorova rozvoje větu o spektrálním rozvoji. Příslušná řada probíhá jen přes vlastní čísla operátoru.
- 4) Známe-li spektrum operátoru a jeho vlastní vektory, můžeme snadno napsat jeho libovolnou funkci a řešit tak rovnice, ve kterých se tato funkce operátoru vyskytuje. Speciálně inverzní operátor je dán formulí

$$\hat{\mathbf{A}}^{-1} = \sum_k \frac{1}{\lambda_k} |k\rangle \langle k| = \sum_k \frac{1}{\lambda_k} \hat{\mathbf{P}}_k \quad .$$

Vidíme, že pro jeho existenci je kromě předpokladů věty nutná nenulovost všech vlastních čísel.

Příklad 12: Na prostoru C^2 je zadán maticový operátor $\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$. Určete $\exp(\hat{\mathbf{A}})$.

Tento příklad jsme již řešili pomocí Taylorova rozvoje jako příklad 4. Z příkladu 11 známe vlastní čísla, vektory i projekční operátory tohoto maticového operátoru. Z věty o spektrálním rozvoji můžeme proto napsat:

$$e^{\hat{\mathbf{A}}} = e^{\lambda_1} \hat{\mathbf{P}}_1 + e^{\lambda_2} \hat{\mathbf{P}}_2 = e^{-1} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & +i \\ -i & 1 \end{pmatrix} + e^{+1} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ +i & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{ch } 1 & -i \text{ sh } 1 \\ i \text{ sh } 1 & \text{ch } 1 \end{pmatrix} \quad .$$

Na rozdíl od Taylorova rozvoje má řada nyní jen dva členy.

Příklad 13: Nalezněte časový vývoj průběhu teploty tyče délky L , jejíž oba konce jsou udržovány na nulové teplotě. Počáteční teplota tyče je dána funkcí $T_0(x)$.

Úkolem je najít řešení rovnice teplotní difúze

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad , \quad T = T(t, x)$$

s počátečními a okrajovými podmínkami

$$T(t_0, x) = T_0(x) \quad , \quad T(t, 0) = T(t, L) = 0 \quad .$$

Přeformulujme nyní úlohu do Diracovy symboliky. Zaveďme nejprve Hilbertův prostor

$$H = \left\{ f(x) : f \in L^2(0, L) \wedge f(0) = f(L) = 0 \right\}.$$

Jde o prostor funkcí definovaných na intervalu $\langle 0, L \rangle$, periodických a integrovatelných s kvadrátem. Okrajová podmínka původní rovnice je přesunuta do definice prostoru. Kdyby byly okrajové hodnoty na obou stranách různé, mohli bychom teplotní funkci zrcadlově rozšířit (tím bychom získali stejnou hodnotu teploty na obou koncích tyče). Jestliže by hodnota teploty tyče na obou koncích byla nenulová, můžeme posunout počátek teplotní stupnice. Vzhledem k derivacím v rovnici teplotní difúze to na tvar rovnice nemá vliv. Požadavek nulové teploty na obou koncích tyče tedy není na újmu obecnosti řešení. Úloha má nyní tvar:

$$\frac{d}{dt} |T\rangle = -\kappa \hat{\mathbf{A}} |T\rangle \quad , \quad |T\rangle \in H \quad , \quad \hat{\mathbf{A}} \equiv -\frac{d^2}{dx^2}. \quad (2.23)$$

Z příkladu 8 víme, že operátor $\hat{\mathbf{B}} = i \frac{d}{dx}$ je hermitovský (má reálná vlastní čísla a kolmou soustavu vlastních vektorů). Proto i kvadrát tohoto operátoru $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{B}}^2$ je hermitovský.

Znaménko minus zde není podstatné, jen zajistí nezáporná vlastní čísla operátoru $\hat{\mathbf{A}}$. Řešení úlohy můžeme formálně napsat okamžitě (!!):

$$|T(t)\rangle = e^{-\kappa \hat{\mathbf{A}}(t-t_0)} |T(t_0)\rangle. \quad (2.24)$$

Skutečně: dosadíme-li počáteční čas, dá řešení počáteční podmínku. Derivujeme-li řešení podle času, zjistíme, že řešení (2.24) splňuje výchozí rovnici (2.23):

$$\frac{d}{dt} |T(t)\rangle = \frac{d}{dt} e^{-\kappa \hat{\mathbf{A}}(t-t_0)} |T(t_0)\rangle = -\kappa \hat{\mathbf{A}} e^{-\kappa \hat{\mathbf{A}}(t-t_0)} |T(t_0)\rangle = -\kappa \hat{\mathbf{A}} |T(t)\rangle.$$

Jediný problém je, že v nalezeném řešení (2.24) vystupuje funkce operátoru $\hat{\mathbf{A}}$. Abychom ji mohli určit, musíme znát spektrum a vlastní vektory operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ na prostoru H . Řešme tedy nejprve úlohu

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}} |f\rangle &= \lambda |f\rangle, & |f\rangle &\in H &\Rightarrow \\ f'' + \lambda f &= 0, & f(0) &= f(L) = 0. \end{aligned}$$

Řešení této obyčejné lineární diferenciální rovnice s okrajovými podmínkami je:

$$\lambda_k = \frac{\pi^2 k^2}{L^2}, \quad |f_k\rangle = c \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \quad |k\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \quad k=1,2,\dots$$

Vlastní čísla jsou reálná ($\hat{\mathbf{A}}$ je hermitovský operátor), vlastní vektory jsou navzájem kolmé a tvoří přirozenou bázi v H . Napsat řešení (2.24) je nyní již jen jednoduchou aplikací věty o spektrálním rozvoji:

$$\begin{aligned} |T(t)\rangle &= e^{-\kappa \hat{\mathbf{A}}(t-t_0)} |T(t_0)\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\lambda_k \kappa (t-t_0)} |k\rangle \langle k| T(t_0)\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} c_k e^{-\frac{\pi^2 k^2 \kappa}{L^2}(t-t_0)} |k\rangle; \\ |k\rangle &\equiv \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \quad c_k \equiv \langle k| T(t_0)\rangle. \end{aligned}$$

Řešení můžeme samozřejmě zapsat i standardně, bez použití Diracovy symboliky:

$$T(t,x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{k=1}^{\infty} c_k e^{-\frac{\pi^2 k^2 \kappa}{L^2}(t-t_0)} \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right); \quad c_k \equiv \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right) T_0(x) dx.$$

Pro $t = t_0$ máme Fourierovu řadu pro počáteční podmínku. Pro $t \neq t_0$ nejde o nic jiného než o rozvoj do jednotlivých Fourierových modů. Každá Fourierova komponenta ubývá exponenciálně s časem.

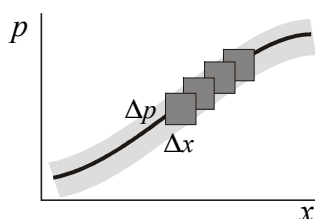
Vidíme, že věta o spektrálním rozvoji nám může být užitečná i při řešení parciálních diferenciálních rovnic.

2.3. ZÁKLADNÍ PRINCIPY KVANTOVÉ TEORIE

Jak už víme, klasická mechanika selhala při popisu dějů mikrosvěta zejména proto, že je postavena na komutujících objektech. V mikrosvětě děje ale nekomutují. Základním cílem bude tedy místo dynamických proměnných používat nekomutující objekty (operátory) a nalézt vztah mezi operátory a reálnými měřitelnými veličinami.

2.3.1. Základní axiomy a definice

I. Redefinice stavu



V klasické mechanice je stav částice určen polohou a hybností. Vzhledem k tomu, že v mikrosvětě nelze současně tyto veličiny měřit a měření jedné ovlivní měření druhé, je nutné pojem stavu definovat novým způsobem. Fázové trajektorie již nelze v mikrosvětě popsat křivkami. Vnímáme je s přesností danou relacemi neurčitosti $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$. Můžeme si představit, že fázovou

trajektorii vidíme jako rozmazanou čáru s rozlišením daným čtverečkem o ploše $\hbar/2$ (sledujeme-li jednu souřadnici a jí odpovídající zobecněnou hybnost).

Kompatibilita: Řekneme, že dvě dynamické proměnné jsou kompatibilní, jestliže měření jedné veličiny neovlivní měření veličiny druhé. Příkladem kompatibilních proměnných jsou (x, y) , příkladem nekompatibilních proměnných jsou (x, p_x) . Kompatibilita je symetrická vlastnost, ale není transitivní.

$$(A \text{ komp } B) \Rightarrow (B \text{ komp } A) ,$$

$$(A \text{ komp } B) \wedge (B \text{ komp } C) \not\Rightarrow (A \text{ komp } C) .$$

Příklad 14: $(x \text{ komp } y) \wedge (y \text{ komp } p_x) \not\Rightarrow (x \text{ komp } p_x)$.

Úplná množina pozorovatelných (ÚMP): Maximální nezávislá množina vzájemně kompatibilních dynamických proměnných. Jakákoli další dynamická proměnná už s nimi není kompatibilní. Například v nerelativistické teorii jsou nejznámější ÚMP (x, y, z) , (p_x, p_y, p_z) a pro centrální pole ještě energie, kvadrát momentu hybnosti a jeho jedna komponenta (E, L^2, L_3) . Současně lze tedy změřit všechny tři souřadnice nebo všechny tři složky hybnosti. Nelze již ale současně změřit všechny tři složky momentu hybnosti.

Stav systému: Řekneme, že známe stav systému, známe-li výsledek měření některé ÚMP. Stavem tedy nazveme jen to, co lze ve skutečnosti současně změřit.

Základním rysem nové teorie musí být nekomutující objekty – operátory. Místo dynamických proměnných z klasické mechaniky (souřadnice, hybnost, energie, moment hybnosti, ...) budeme používat operátory (operátor souřadnice, hybnosti, ...). Nekomutativnost těchto operátorů bude vyjadřovat nekomutativnost aktu měření dynamických proměnných v mikrosvětě. Veličiny naměřené přístrojem v mikrosvětě jsou reálná čísla, někdy spojitá (poloha částice), někdy diskrétní (například jednotlivé hladiny energie elektronu vázaného v atomu). Jak získat z operátoru dynamické proměnné sadu reálných čísel spojitého nebo diskrétního charakteru? Takovou sadou je právě spektrum hermitovských operátorů. *Dynamickým proměnným budeme tedy přiřazovat hermitovské operátory.*

Každý operátor působí na prvky nějakého Hilbertova prostoru H . Musíme se tedy ptát, jaký význam bude v naší teorii mít sám Hilbertův prostor a také prvky, na které operátory působí. Později uvidíme, že příliš nezáleží na volbě Hilbertova prostoru. Podstatné jsou spíše vztahy mezi dynamickými proměnnými, nyní operátory. Kvantová mechanika založená na

prostoru L^2 funkcí integrovatelných s kvadrátem je známá Schrödingerova vlnová mechanika vedoucí na Schrödingerovu rovnici a vlnové funkce. Kvantová teorie založená na prostoru l^2 posloupností sčitatelných s kvadrátem je Heisenbergova maticová mechanika. Obě teorie se na první pohled zdají naprosto odlišné. Přesto vlastní čísla operátorů v obou teoriích jsou stejná a obě teorie tak dávají stejné předpovědi. Hilbertův prostor se všemi svými prvky a s operátory, které na prvky působí koresponduje s vlastnostmi celého systému z klasické mechaniky. *Místo systému budeme proto v kvantové teorii hovořit o Hilbertově prostoru daného systému* (například Hilbertův prostor elektronu).

Zbývá rozluštit poslední hádanku – k čemu jsou prvky Hilbertova prostoru? Již v úvodu jsme si řekli, že v mikrosvětě sám akt měření ovlivní stav systému. Před měřením je systém v jiném stavu než po měření. Akt měření dynamické proměnné zastupuje v kvantové teorii hermitovský operátor této proměnné. Působením tohoto operátoru na prvek prostoru dostáváme jiný prvek tohoto prostoru. A to je přesně to, co hledáme. *Prvky (vektory) prostoru tedy představují stav systému*. Akt měření je působení příslušného operátoru na stav (prvek prostoru) a nový stav je prvek, který vznikl působením operátoru.

Vlastní číslo operátoru prezentuje naměřenou hodnotu a vypovídá tak o stavu systému. Víme už, že násobky každého vlastního vektoru jsou opět vlastním vektorem. V H tedy existuje k danému vlastnímu číslu celý vlastní směr (paprsek). Stav systému proto musí odpovídat celý paprsek v H , nikoli jen jeden jediný vektor. Přicházíme tak ke třem základním axiomům kvantové teorie:

- | | |
|---|---------------------------------|
| ■ systému přiřadíme Hilbertův prostor H | systém $\rightarrow H$ |
| ■ stavu systému přiřadíme paprsek $\psi\rangle \in H$ | stav $\rightarrow \psi\rangle$ |
| ■ dynamické proměnné přiřadíme hermitovský operátor A na H | $A \rightarrow \hat{A}$ |

S linearitou budované teorie se pojí velmi důležitý princip:

- **Princip superpozice:** Necht' $|\varphi\rangle \in H$ a $|\psi\rangle \in H$ reprezentují dva různé stavy systému. Potom je každý vektor $\alpha_1|\varphi\rangle + \alpha_2|\psi\rangle$ je také fyzikálně realizovatelný stav.

Bez tohoto požadavku by nebylo možné vybudovat lineární teorii.

II. Měření v kvantové teorii

Akt měření dynamické proměnné A v nějakém stavu znamená aplikaci operátoru $\hat{A}$ této dynamické proměnné na daný stav $|\psi\rangle$. Operátorem $\hat{A}$ a stavem $|\psi\rangle$ musí tedy být zcela jednoznačně dáno, co je a co není možné na systému naměřit. Odpověď na tuto otázku poskytují tzv. *interpretační postuláty*:

- **Postulát A.** Měříme-li dynamickou proměnnou A , mohu na systému naměřit jen některou z vlastních hodnot $\{a_j\}$ operátoru $\hat{A}$ této dynamické proměnné: $\hat{A}|j\rangle = a_j|j\rangle$.
- **Postulát B.** Pozorování dynamické proměnné A na systému, který byl připraven ve vlastním stavu $|j\rangle$ operátoru $\hat{A}$, vede zcela jistě k naměření vlastní hodnoty a_j .
- **Postulát C.** Je-li systém připraven v obecném stavu $|\psi\rangle \in H$, vede opakované měření veličiny A k různým výsledkům a_j . Střední hodnota těchto opakovaných měření bude rovna $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$.

Poznámky:

- 1) Opakovaná měření si nemusíme představovat tak, že bychom na stejném systému opakovali neustále tatáž měření. V praxi by to nebylo proveditelné. Těžko můžeme na jednom jediném elektronu zopakovat nějaké měření. Musíme mít připraveno velké množství systémů ve stejném stavu (například svazek elektronů) a opakovat měření na různých elektronech (systémech).
- 2) Výraz pro střední hodnotu je nejjednodušším možným výrazem složeným z operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ a stavu $|\psi\rangle$, který dá jako výsledek reálné číslo. Střední hodnotu bývá zvykem označovat $\langle A \rangle$ nebo $\overline{A}$.
- 3) Automaticky předpokládáme, že stavové vektory jsou normovány k jedné. Není-li stavový vektor normován, musíme výraz pro střední hodnotu vydělit ještě kvadrátem normy stavového vektoru:

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

- 4) Výraz pro střední hodnotu rozepsaný v prostoru $L^2(R^3)$ dá:

$$\langle A \rangle = \frac{\int \psi^*(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{A}} \psi(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x}}{\int \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x}}.$$

- 5) Jsou-li všechny systémy připraveny ve vlastním stavu $|j\rangle$ operátoru $\hat{\mathbf{A}}$, dá střední hodnota daná postulátem C samozřejmě příslušnou vlastní hodnotu podle postulátu B a všechna měření dají v tomto výjimečném případě stejný výsledek (přes j se nesčítá):

$$\langle A \rangle = \frac{\langle j | \hat{\mathbf{A}} | j \rangle}{\langle j | j \rangle} = \frac{a_j \langle j | j \rangle}{\langle j | j \rangle} = a_j.$$

III. Princip korespondence

Posledním ze základních principů kvantové teorie je princip korespondence. Vymezuje, které části z teoretické mechaniky je možné převzít v kvantové teorii.

- **Princip korespondence pro základní relace.** Základní relace mezi dynamickými proměnnými v teoretické mechanice a příslušnými operátory v kvantové mechanice se mohou lišit jen pořadím operátorů.
- **Princip korespondence pro algebru Poissonových závorek.** Struktura Poissonových závorek v teoretické mechanice je identická se strukturou komutátorů v kvantové teorii:

$$\begin{aligned} A &\rightarrow \hat{\mathbf{A}} \\ B &\rightarrow \hat{\mathbf{B}} \quad \Rightarrow \quad \{A, B\} = C \rightarrow [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = k \hat{\mathbf{C}} \\ C &\rightarrow \hat{\mathbf{C}} \end{aligned}$$

První část principu korespondence platí pro jednoduché relace mezi dynamickými proměnnými, které neobsahují derivace. Například definice Hamiltonovy funkce v potenciálním poli V

$$H \equiv \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z)$$

přejde v definici Hamiltonova operátoru

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}_x^2 + \hat{\mathbf{P}}_y^2 + \hat{\mathbf{P}}_z^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{Y}}, \hat{\mathbf{Z}}). \quad (2.25)$$

Výraz pro potenciální energii je typickou funkcí operátoru, kterou jsme probírali v kapitole o operátorech. Pro výrazy typu $A = xp$ nelze kvantový analog jednoznačně určit. Může jím být buď $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{P}}$ nebo $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{X}}$. Operátory nekomutují a proto záleží na jejich pořadí. Správná varianta z obou možných musí být vybrána na základě experimentu. Stejně tak můžeme

z různých Lagrangeových funkcí téhož systému obdržet různé kvantové teorie a správnou variantu je třeba opět vybrat na základě experimentu.

Druhá část principu korespondence se týká Poissonových závorek – výrazů, které v klasické mechanice obsahují derivace dynamických proměnných. Poissonovým závorkám v kvantové teorii odpovídají komutátory dynamických proměnných. Nelze však položit rovnost mezi komutační relací a Poissonovou závorkou. Důvody jsou hned dva:

- 1) *rozměrový*: Poissonova závorka obsahuje derivace, které do výrazů vnášejí fyzikální rozměr, komutátory nikoli $\Rightarrow$ je třeba použít rozměrový převodní koeficient k .
- 2) *principiální*: Dynamickým proměnným v kvantové teorii můžeme přiřazovat jen hermitovské operátory (mají reálná vlastní čísla, která interpretujeme jako naměřitelné hodnoty). Jsou-li operátory odpovídající A a B hermitovské, musí být operátor odpovídající C také hermitovský. To lze opět zajistit pomocí konstanty k .

Určeme nyní podmínku na konstantu k , která plyne z požadavku hermitovosti operátorů:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= k \hat{C} \\ \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} &= k \hat{C} \quad / + \\ \hat{B}^+ \hat{A}^+ - \hat{A}^+ \hat{B}^+ &= k^* \hat{C}^+ \quad / \hat{O}^+ = \hat{O} \\ \hat{B} \hat{A} - \hat{A} \hat{B} &= k^* \hat{C} \\ -[\hat{A}, \hat{B}] &= k^* \hat{C} \end{aligned}$$

Porovnáme-li počáteční a koncový výraz, musí platit $k^* = -k$. To ale splňují jen ryze imaginární čísla. Převodní konstanta tedy musí mít tvar:

$$k = i \hbar \quad (2.26)$$

Konstanta $\hbar$ je nějaké reálné číslo a je jedinou fundamentální konstantou kvantové teorie. Tato konstanta se bude vyskytovat ve všech předpovědích kvantové teorie (například v energetickém spektru elektronu vázaného v atomech, ve vztazích pro záření absolutně černého tělesa, v Heisenbergových relacích neurčitosti, atd. ...). Její hodnotu je možné změřit experimentálně na základě těchto předpovědí a je rovna:

$$\hbar = 1.0545887 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad (2.27)$$

Princip korespondence pro Poissonovy závorky můžeme stručně zapsat jako

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] \quad (2.28)$$

Tím jsme zakončili přehled základních principů kvantové teorie. Jelikož jde o základní neodvoditelné principy, na kterých teorii stavíme, bylo by možné jen stroze vypsát axiomy, postuláty a principy označené v této kapitole čtverečkem. Doplnující texty se snaží jen poukázat na to, že právě tato volba základních axiomů je přirozená a povede k cíli. O správnosti základních principů však mohou rozhodnout jedině experimenty ověřující výpovědi z těchto principů plynoucí.

2.3.2. Kompatibilita měření a Heisenbergovy relace

Rozhodnout o tom, zda se měření dvou dynamických proměnných ovlivňují či nikoli, je jednoduché. Stačí znát komutátor operátorů těchto proměnných. Je-li tento komutátor nulový, je $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ a měření se neovlivňují. Základní komutátory pro souřadnice a hybnosti můžeme odvodit z principu korespondence, ostatní už pak z vlastností komutátorů. Pro Poissonovy závorky mezi souřadnicemi a hybnostmi platí (1.55):

$$\{x_k, x_l\} = \{p_k, p_l\} = 0 \quad , \quad \{x_k, p_l\} = \delta_{kl} \quad .$$

Tomu odpovídají podle principu korespondence komutační relace:

$$\{\hat{\mathbf{X}}_k, \hat{\mathbf{X}}_l\} = \{\hat{\mathbf{P}}_k, \hat{\mathbf{P}}_l\} = 0 \quad , \quad \{\hat{\mathbf{X}}_k, \hat{\mathbf{P}}_l\} = i\hbar \hat{\mathbf{1}} \delta_{kl} \quad . \quad (2.29)$$

Z nich je zřejmé, že současně lze u objektu změřit všechny tři souřadnice nebo hybnosti. Také se vzájemně neovlivní měření například souřadnice x a hybnosti p_y . *Jediná měření, která se vzájemně ovlivňují a u kterých záleží na pořadí měření (nenulový komutátor) je měření zobecněné souřadnice a jí příslušné zobecněné hybnosti.*

Rovnice (2.29) jsou základními komutačními relacemi v kvantové teorii. Bylo by samozřejmě možné hledat ostatní složitější komutační relace také z Poissonových závorek. Výhodnější je odvozovat je ze základních relací (2.29) a vlastností Lieovy algebry komutátorů. Tím se oprostíme od klasické mechaniky a nemusíme se k ní při každé komutační relaci vracet. Kvantová mechanika začíná „žít vlastním životem“. To, co přebrala z klasické mechaniky prostřednictvím principu korespondence jsou jen relace (2.29).

Odvoďme nyní komutační relaci mezi první a druhou komponentou momentu hybnosti:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}_1, \hat{\mathbf{L}}_2] &= [\hat{\mathbf{X}}_2 \hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{P}}_1 - \hat{\mathbf{X}}_1 \hat{\mathbf{P}}_3] = \\ &= [\hat{\mathbf{X}}_2 \hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{P}}_1] - [\hat{\mathbf{X}}_2 \hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1 \hat{\mathbf{P}}_3] - [\hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{P}}_1] + [\hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1 \hat{\mathbf{P}}_3] = \\ &= \hat{\mathbf{X}}_2 [\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{P}}_1] + [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{P}}_1] \hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_2 [\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1 \hat{\mathbf{P}}_3] - [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1 \hat{\mathbf{P}}_3] \hat{\mathbf{P}}_3 - \\ &\quad - \hat{\mathbf{X}}_3 [\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{P}}_1] - [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{P}}_1] \hat{\mathbf{P}}_2 + \hat{\mathbf{X}}_3 [\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1 \hat{\mathbf{P}}_3] + [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1 \hat{\mathbf{P}}_3] \hat{\mathbf{P}}_2 = \\ &= \hat{\mathbf{X}}_2 \hat{\mathbf{X}}_3 [\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{P}}_1] + \hat{\mathbf{X}}_2 [\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3] \hat{\mathbf{P}}_1 + \hat{\mathbf{X}}_3 [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{P}}_1] \hat{\mathbf{P}}_3 + [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3] \hat{\mathbf{P}}_3 \hat{\mathbf{P}}_1 - \\ &\quad - \hat{\mathbf{X}}_2 \hat{\mathbf{X}}_1 [\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{P}}_3] - \hat{\mathbf{X}}_2 [\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1] \hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_1 [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{P}}_3] \hat{\mathbf{P}}_3 - [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1] \hat{\mathbf{P}}_3 \hat{\mathbf{P}}_3 - \\ &\quad - \hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{X}}_3 [\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{P}}_1] - \hat{\mathbf{X}}_3 [\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3] \hat{\mathbf{P}}_1 - \hat{\mathbf{X}}_3 [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{P}}_1] \hat{\mathbf{P}}_2 - [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3] \hat{\mathbf{P}}_1 \hat{\mathbf{P}}_2 + \\ &\quad + \hat{\mathbf{X}}_3 \hat{\mathbf{X}}_1 [\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{P}}_3] + \hat{\mathbf{X}}_3 [\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1] \hat{\mathbf{P}}_3 + \hat{\mathbf{X}}_1 [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{P}}_3] \hat{\mathbf{P}}_2 + [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1] \hat{\mathbf{P}}_3 \hat{\mathbf{P}}_2 = \\ &= 0 - \hat{\mathbf{X}}_2 [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{P}}_3] \hat{\mathbf{P}}_1 + 0 + 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 + 0 + \hat{\mathbf{X}}_1 [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{P}}_3] \hat{\mathbf{P}}_2 + 0 = \\ &= -i\hbar \hat{\mathbf{X}}_2 \hat{\mathbf{1}} \hat{\mathbf{P}}_1 + i\hbar \hat{\mathbf{X}}_1 \hat{\mathbf{1}} \hat{\mathbf{P}}_2 = i\hbar (\hat{\mathbf{X}}_1 \hat{\mathbf{P}}_2 - \hat{\mathbf{X}}_2 \hat{\mathbf{P}}_1) = i\hbar \hat{\mathbf{L}}_3 \quad . \end{aligned}$$

Je jasné, že postup je velmi zdoluhavý, ale přímočarý. Hledanou komutační relaci postupně „rozmělnujeme“ podle pravidel Lieovy algebry až na elementární relace mezi souřadnicemi a hybnostmi. Prakticky všechny symbolicky orientované programy či programovací jazyky bez problémů tuto úlohu řeší za nás a obsahují balíky pro výpočet komutačních relací.

Analogickým postupem můžeme nalézt komutační relace pro ostatní komponenty momentu hybnosti. Není to ale nutné, stačí je získat cyklickou záměnou souřadnicových os. Kompletní komutační relace pro moment hybnosti potom jsou:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}_1, \hat{\mathbf{L}}_2] &= i\hbar \hat{\mathbf{L}}_3 \quad , \\ [\hat{\mathbf{L}}_2, \hat{\mathbf{L}}_3] &= i\hbar \hat{\mathbf{L}}_1 \quad , \\ [\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}_1] &= i\hbar \hat{\mathbf{L}}_2 \quad . \end{aligned} \quad (2.30)$$

Výsledkem je, že současně není možné změřit žádné dvě komponenty momentu hybnosti. Měření každé komponenty ovlivní měření kterékoli jiné komponenty. Zavedme operátor kvadrátu velikosti momentu hybnosti

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \equiv \hat{\mathbf{L}}_1^2 + \hat{\mathbf{L}}_2^2 + \hat{\mathbf{L}}_3^2 \quad (2.31)$$

Stejným postupem jako dříve dopočteme komutační relace kvadrátu momentu s jednotlivými komponentami. Tentokrát při „rozměňování“ komutační relace postačí dostat se jen k relacím (2.30) pro moment hybnosti. Jejich výsledek už známe. Po výpočtu dostaneme:

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_k] = 0 \quad , \quad k = 1, 2, 3 \quad (2.32)$$

Není tedy možné současně změřit dvě různé komponenty momentu hybnosti. Vždy je ale možné změřit kvadrát velikosti momentu hybnosti a jednu z jeho libovolných komponent, zpravidla se používá třetí komponenta. Ze zatím provedených úvah je zřejmé, že současně můžeme měřit dynamické proměnné $\{x, y, z\}$ nebo $\{p_x, p_y, p_z\}$ nebo $\{L^2, L_3\}$. V kapitole 2.5 uvidíme, že v případě sféricky symetrického potenciálu je s poslední množinou kompatibilní ještě energie. Jde o základní tři úplné množiny pozorovatelných (ÚMP) pro nerelativistickou částici.

Nalezli jsme tedy jednoduchý postup, pomocí kterého zjistíme, které veličiny lze současně měřit a které ne. Postačí nalézt komutátor odpovídajících operátorů. Tento postup nám ale umožní odpověď typu ano/ne. V případě, že dynamické proměnné spolu současně měřit nelze, se musíme ptát, jak moc naruší akt měření jedné proměnné akt měření proměnné druhé. Na tuto otázku odpovídají Heisenbergovy relace neurčitosti, které si nyní odvodíme.

Předtím si uveďme přehled základních statistických pojmů a jejich operátorových analogií v kvantové teorii:

statistika		kvantová teorie	
$\bar{a}$	střední hodnota	$\bar{a} \equiv \langle \psi \hat{\mathbf{A}} \psi \rangle$	střední hodnota
$\Delta a \equiv a - \bar{a}$	střední odchylka	$\Delta \hat{\mathbf{A}} \equiv \hat{\mathbf{A}} - \bar{a} \hat{\mathbf{1}}$	operátor odchylky
$\overline{\Delta a} = 0$	vztah pro $\overline{\Delta a}$	$\langle \psi \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi \rangle = 0$	vztah pro $\overline{\Delta a}$
$\overline{(\Delta a)^2} = \overline{a^2} - \bar{a}^2$	vztah pro $\overline{(\Delta a)^2}$ (variance)	$\begin{aligned} \langle \psi \Delta \hat{\mathbf{A}}^2 \psi \rangle &= \\ &= \langle \psi \hat{\mathbf{A}}^2 \psi \rangle - \\ &- \langle \psi \hat{\mathbf{A}} \psi \rangle^2 \end{aligned}$	vztah pro $\overline{(\Delta a)^2}$ (variance)
$\Delta a_{kv} = \sqrt{\overline{(\Delta a)^2}} = \sqrt{\overline{a^2} - \bar{a}^2}$	střední kvadr. odchylka	$\Delta a_{kv} = \sqrt{\langle \psi \Delta \hat{\mathbf{A}}^2 \psi \rangle}$	střední kvadr. odchylka

Zkuste si dokázat oba dva statistické vztahy v klasické statistice i v kvantové teorii. V obou případech stačí jen dosadit z příslušných definic.

Nyní již můžeme přistoupit k odvození relací neurčitosti. Předpokládejme, že máme dvě nekompatibilní proměnné:

$$A, B \quad \rightarrow \quad \hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}} \quad ; \quad [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = \hat{\mathbf{C}} \quad .$$

Nalezneme střední kvadratické chyby měření:

$$\begin{aligned} (\Delta a_{kv})^2 (\Delta b_{kv})^2 &= \langle \psi | (\Delta \hat{\mathbf{A}})^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta \hat{\mathbf{B}})^2 | \psi \rangle \stackrel{(*1)}{=} \langle \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi | \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi \rangle \langle \Delta \hat{\mathbf{B}} \psi | \Delta \hat{\mathbf{B}} \psi \rangle = \\ &= \| \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi \|^2 \cdot \| \Delta \hat{\mathbf{B}} \psi \|^2 \stackrel{(*2)}{\geq} | \langle \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi | \Delta \hat{\mathbf{B}} \psi \rangle |^2 = | \langle \psi | \Delta \hat{\mathbf{A}} \Delta \hat{\mathbf{B}} | \psi \rangle |^2 \stackrel{(*3)}{=} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= |\langle \psi | \frac{1}{2}(\Delta\hat{\mathbf{A}}\Delta\hat{\mathbf{B}} + \Delta\hat{\mathbf{B}}\Delta\hat{\mathbf{A}}) + \frac{1}{2}(\Delta\hat{\mathbf{A}}\Delta\hat{\mathbf{B}} - \Delta\hat{\mathbf{B}}\Delta\hat{\mathbf{A}}) | \psi \rangle|^2 \stackrel{(*4)}{=} \\
&= |\frac{1}{2}\langle \psi | [\Delta\hat{\mathbf{A}}, \Delta\hat{\mathbf{B}}]_+ | \psi \rangle + \frac{1}{2}\langle \psi | [\Delta\hat{\mathbf{A}}, \Delta\hat{\mathbf{B}}]_- | \psi \rangle|^2 \stackrel{(*5)}{\geq} \\
&\geq |\frac{1}{2}\langle \psi | [\Delta\hat{\mathbf{A}}, \Delta\hat{\mathbf{B}}]_- | \psi \rangle|^2 \stackrel{(*6)}{=} |\frac{1}{2}\langle \psi | [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] | \psi \rangle|^2 = |\frac{1}{2}\langle \psi | \hat{\mathbf{C}} | \psi \rangle|^2 .
\end{aligned}$$

Po odmocnění dostáváme konečný tvar Heisenbergových relací:

$$\Delta a_{kv} \Delta b_{kv} \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | \hat{\mathbf{C}} | \psi \rangle| . \quad (2.33)$$

*** Poznámky k odvození:**

- (1) využití hermitovosti operátorů;
- (2) Schwartzovo lemma (2.7);
- (3) rozdělení na symetrickou a antisymetrickou část;
- (4) označení symetrické části jako antikomutátor a antisymetrické jako komutátor;
- (5) symetrická část je pozitivně definitní operátor (nezáporné střední hodnoty);
- (6) jednotkový operátor v definici $\Delta\hat{\mathbf{A}}$ komutuje s čímkoli.

Známe-li výsledek komutační relace operátorů příslušících dvěma dynamickým proměnným, můžeme z Heisenbergových relací určit míru ovlivnění jednoho měření druhým. Toto vzájemné ovlivnění výsledků měření závisí na stavu, ve kterém je systém připraven. Jen jsou-li obě dynamické proměnné ve vztahu *zobecněná souřadnice – zobecněná hybnost*, nezávisí vzájemné ovlivnění na stavu systému:

$$[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] = i\hbar \hat{\mathbf{1}} \quad \Rightarrow \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \psi | \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle| = \frac{\hbar}{2} |\langle \psi | \psi \rangle| = \frac{\hbar}{2} .$$

To je nejznámější tvar relací neurčitosti

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} . \quad (2.34)$$

Jde o první konkrétní měřitelný výsledek z námi budované teorie, který obsahuje jedinou konstantu teorie – Planckovu konstantu.

2.3.3. Vlastní stavy energie, Schrödingerova rovnice

V minulé kapitole jsme se naučili rozhodnout, které dynamické proměnné lze společně měřit a které ne. Pomocí Heisenbergových relací neurčitosti jsme schopni i kvalitativně postihnout míru narušení jednoho měření měřením druhým. Nyní se budeme věnovat druhé základní úloze kvantové mechaniky: Nalézt spektrum operátoru energie – hodnoty energie, které je možné na systému naměřit. Úlohu můžeme zformulovat například takto:

$$\hat{\mathbf{H}} | n \rangle = E_n | n \rangle , \quad (2.35)$$

$$\hat{\mathbf{H}} \equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}) = \frac{\hat{\mathbf{P}}_x^2 + \hat{\mathbf{P}}_y^2 + \hat{\mathbf{P}}_z^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{Y}}, \hat{\mathbf{Z}}) , \quad (2.36)$$

$$\{\hat{\mathbf{X}}_k, \hat{\mathbf{X}}_l\} = \{\hat{\mathbf{P}}_k, \hat{\mathbf{P}}_l\} = 0 , \quad \{\hat{\mathbf{X}}_k, \hat{\mathbf{P}}_l\} = i\hbar \hat{\mathbf{1}} \delta_{kl} . \quad (2.37)$$

Budeme hledat vlastní hodnoty operátoru energie (Hamiltonova operátoru) ze vztahu (2.35). Tato rovnice pro vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru se nazývá *Schrödingerova rovnice*. Operátor energie (Hamiltonův operátor) je dán vztahem (2.36). Základní operátory, ze kterých

je složen Hamiltonův operátor, podléhají komutačním relacím (2.29), resp. (2.37). Nezáleží příliš na tom, jaký Hilbertův prostor zvolíme. V příští kapitole uvidíme řešení harmonického oscilátoru v různých prostorech H , vždy dostaneme stejné spektrum Hamiltonova operátoru. Na daném prostoru je nejpodstatnější zvolit Hermitovy operátory zobecněných souřadnic a hybností tak, aby splňovaly komutační relace (2.37).

Ukažme si nyní přepis Schrödingerovy rovnice v prostoru $L^2(R^3)$ funkcí integrovatelných s kvadrátem na celém prostoru R^3 . Nejjednodušším operátorem na tomto prostoru je operátor násobení souřadnicí. Tento operátor ztotožníme s operátorem souřadnice:

$$\hat{\mathbf{X}} = x \quad ; \quad \hat{\mathbf{Y}} = y \quad ; \quad \hat{\mathbf{Z}} = z \quad . \quad (2.38)$$

Nyní zbývá nalézt hermitovské operátory pro hybnost tak, aby splňovaly komutační relace (2.37). V příkladu 6 jsme si ukázali, že operátor derivace a operátor násobení souřadnicí splňují v jedné dimenzi komutační relaci $[\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}] = \hat{\mathbf{1}}$, neboli $[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{D}}] = -\hat{\mathbf{1}}$. Je zřejmé, že operátor $\hat{\mathbf{P}} \equiv -i\hbar d/dx$ splňuje relaci $[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] = i\hbar \hat{\mathbf{1}}$ a v jedné dimenzi plní úlohu operátoru hybnosti. Sám operátor derivace není hermitovský, ale operátor derivace vynásobený ryze imaginární konstantou již hermitovský je (viz příklad 8). Aby ve třech dimenzích operátor hybnosti splňoval komutační relace (2.37) a platila volba (2.38) pro operátor souřadnice, musí operátor hybnosti mít tvar

$$\hat{\mathbf{P}}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad ; \quad \hat{\mathbf{P}}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad ; \quad \hat{\mathbf{P}}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad , \quad \text{neboli} \quad (2.39)$$

$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad . \quad (2.39')$$

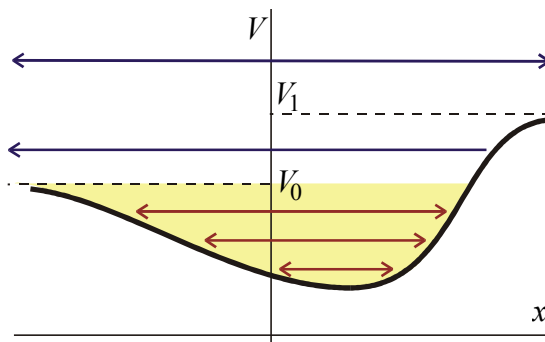
Schrödingerova rovnice (2.35) s operátorem energie (2.36), volbou prostoru $H = L^2(R^3)$ a operátory (2.38) a (2.39) vede potom na slavnou Schrödingerovu rovnici v x reprezentaci:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right] \psi_n(\mathbf{x}) = E_n \psi_n(\mathbf{x}) \quad . \quad (2.40)$$

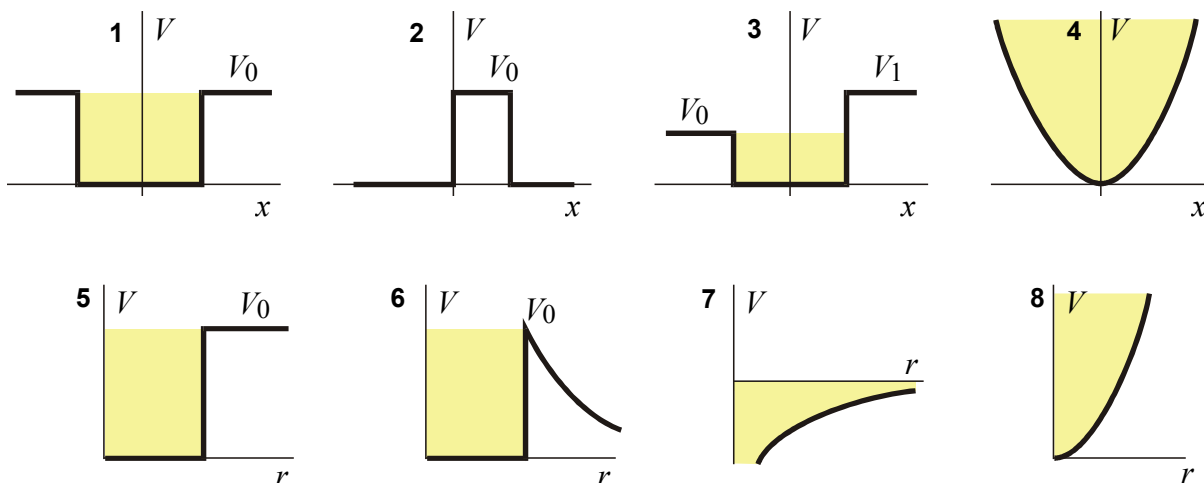
Řešení této rovnice pro konkrétní potenciál V poskytne spektrum operátoru energie $\{E_n\}$ jakožto množinu možných měřitelných hodnot energie.

Poznámka 1: Řešení rovnice (2.40) lze nalézt pro každou hodnotu energie. Ne vždy je však toto řešení z prostoru $L^2(R^3)$. Je proto vždy třeba vybrat z možných řešení jen ta, která jsou integrovatelná s kvadrátem, tj. donekonečna ubývají dostatečně rychle, aby zajistila integrovatelnost.

Poznámka 2: Existuje jednoduchý způsob, jak odhadnout typ spektra pro daný potenciál. Může-li se v klasické mechanice částice vzdálit do nekonečna, je spektrum operátoru energie spojitě. Nemůže-li se ani v jednom směru vzdálit do nekonečna je spektrum operátoru energie diskrétní.



Připomeňme, že v klasické mechanice se částice může pohybovat tam, kde je její celková energie větší než potenciální. To plyne ze vztahu $E = mv^2/2 + V(x)$. Jde vlastně o podmínku nezápornosti kinetické energie. V nakreslené situaci je pro $E < V_0$ spektrum energie diskrétní, pro $E > V_0$ spojitě.

Příklad:

1D potenciály; $x \in (-\infty, +\infty)$

1. *Symetrická pravoúhlá jáma*. Diskrétní spektrum pro $E < V_0$, spojité pro $E > V_0$. Pro nekonečnou jámu ($V_0 \rightarrow \infty$) je spektrum jen diskrétní.
2. *Bariéra*. Spojité spektrum.
3. *Nesymetrická pravoúhlá jáma*. Diskrétní spektrum pro $E < V_0$, spojité pro $E > V_0$.
4. *Harmonický oscilátor*. Diskrétní spektrum.

3D potenciály; $r > 0$

5. *Sférická jáma*. Diskrétní spektrum pro $E < V_0$, spojité pro $E > V_0$. V podobném potenciálu se pohybuje například neutron v atomovém jádře.
6. *Coulombova bariéra* (sférická jáma kombinovaná s Coulombovým odpuzováním). Diskrétní spektrum pro $E < V_0$, spojité pro $E > V_0$. Nenulová pravděpodobnost průniku bariérou, tunelový jev. V podobném potenciálu se pohybuje proton nebo α částice v atomovém jádře.
7. *Coulombův přitažlivý potenciál*. Diskrétní spektrum pro $E < 0$, spojité pro $E > 0$. V podobném potenciálu se pohybuje elektron v atomárním obalu. Stavy se zápornou energií jsou vázané stavy, stavy s kladnou energií jsou volné (elektron není vázán k atomovému jádru).
8. *Sférický harmonický oscilátor*. Diskrétní stavy energie. Systém je při vychýlení do kteréhokoli směru vrácen do počátku podle předpisu $V(r) = 1/2 kr^2$.

Celá kapitola 2.4 bude věnována řešení Schrödingerovy rovnice pro vlastní hodnoty operátoru energie na příkladu harmonického oscilátoru. Harmonický oscilátor je velice důležitým systémem. Jedná se o parabolické přiblížení k jakékoli potenciální energii s minimem a mnoho systémů lze považovat za harmonický oscilátor alespoň v prvním přiblížení. Nakonec i samo elektromagnetické pole je soustavou fotonů – elementárních harmonických oscilátorů. Mohli jsme jistě zvolit příklad jednodušší - pravoúhlou jámu či bariéru. V těchto příkladech je potenciální energie po částech konstantní a řešení Schrödingerovy rovnice je víceméně triviální. Jen je třeba jednotlivé části řešení v místech změny předpisu potenciální energie správně navázat. Tyto elementární úlohy jsou řešeny v každé úvodní učebnici základního kursu fyziky a zvědavý čtenář si je tam jistě najde.

2.4. HARMONICKÝ OSCILÁTOR

Na příkladu harmonického oscilátoru si ukážeme typické řešení úlohy pro vlastní hodnoty operátoru energie. Naše úloha je

$$\begin{aligned}\hat{H}|n\rangle &= E_n |n\rangle, \\ \hat{H} &\equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{\mathbf{X}}^2, \\ [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] &= i\hbar \hat{\mathbf{1}}.\end{aligned}\quad (2.41)$$

Jde o problém vlastních hodnot Hamiltonova operátoru s konkrétním průběhem potenciální energie a zadanými základními komutačními relacemi mezi operátorem polohy a hybnosti.

V kapitole 2.4.1 úlohu vyřešíme v rámci klasické Schrödingerovy vlnové mechaniky. Za Hilbertův prostor zvolíme prostor $L^2(R)$, volba operátorů (2.38) a (2.39) povede na diferenciální rovnici (2.40) v jedné dimenzi. Řešení této rovnice se provádí rozvojem do nekonečných řad, které je třeba „oříznout“ tak, aby řešení bylo z prostoru $L^2(R)$, tj. integrovatelné s kvadrátem. Odsud získáme spektrum operátoru energie.

V kapitole 2.4.2 si ukážeme řešení úlohy (2.41) bez volby reprezentace. Nebudeme vůbec volit konkrétní podobu Hilbertova prostoru. Řešení nalezneme jen z formulace úlohy (2.41). Uvidíme tak, že konkrétní volba Hilbertova prostoru není podstatná. Při tomto přístupu si zavedeme kreační a anihilační operátory, které svým působením posouvají energetické hladiny o jednu výše či níže. Tyto operátory jsou v kvantové teorii velmi užitečné a proto se s nimi seznámíme již nyní u jednoduchého příkladu harmonických oscilací.

V kapitole 2.4.3 si ukážeme řešení úlohy (2.41) na prostoru l^2 nekonečných posloupností sčitatelných s kvadrátem (tzv. Heisenbergova maticová mechanika). Operátory zde budou nekonečné matice. Možná se vám zdá obtížná úloha najít vlastní čísla nekonečných matic. Problém ale není tak složitý. Jestliže za vektory báze zvolíme vlastní vektory příslušného operátoru, bude matice odpovídající tomuto operátoru diagonální. Vlastní čísla diagonálních matic se hledají snadno ... Jsou to právě prvky na diagonále.

Třemi různými způsoby tak uvidíte řešení jednoho a téhož problému. V kvantové teorii jde totiž o vnitřní strukturu teorie, nikoli o konkrétní reprezentaci, ve které výpočet provádíme.

2.4.1. Řešení pomocí vlnové mechaniky (Schrödinger)

Hamiltonova funkce jednodimenzionálního harmonického oscilátoru je dána součtem kinetické a potenciální energie (1.44)

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (2.42)$$

Hamiltonův operátor je v prostoru $L^2(-\infty, +\infty)$ potom dán jednoduchou relací

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (2.43)$$

Odpovídající Schrödingerova rovnice pro vlastní funkci $\psi(x)$ z prostoru $L^2(-\infty, +\infty)$ má tvar

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.44a)$$

Jde o obyčejnou lineární diferenciální rovnici druhého řádu s nelineárním koeficientem u nulté derivace. Standardní tvar této rovnice (s jednotkovým koeficientem u nejvyšší derivace) je:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\omega^2}{\hbar^2} x^2 \right) \psi = 0 \quad . \quad (2.44b)$$

Rovnici budeme řešit ve čtyřech krocích:

1. substituce v nez·vislé proměnné

V nezávislé proměnné budeme volit takovou substituci, která „zbezrozměrní“ rovnici. Přesuňme koeficienty tak, aby byly symetrické u proměnné x

$$\frac{d^2\psi}{\frac{m\omega}{\hbar} dx^2} - \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \psi + \frac{2E}{\hbar\omega} \psi = 0 \quad (2.44c)$$

a provedme substituci

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad , \quad (2.45)$$

po které Schrödingerova rovnice získá bezrozměrný tvar

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2 \psi + \lambda \psi = 0 \quad , \quad \lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \quad . \quad (2.46)$$

2. substituce v závislé proměnné

V závislé proměnné budeme volit takovou substituci, které zohlední chování vlnové funkce pro $\xi \rightarrow \pm\infty$. Pro velká ξ můžeme zanedbat poslední člen v rovnici (2.46) a přibližně platí

$$\xi \rightarrow \pm\infty \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2 \psi \approx 0 \quad \Rightarrow \quad \psi \approx e^{\pm\xi^2/2} \quad .$$

(řešení stačí dosadit do původní rovnice a zanedbat členy s nižšími mocninami ξ). Kladné z nalezených řešení evidentně není z prostoru L^2 , integrál z kvadrátu přes celý prostor by byl nekonečný. Vlnová funkce se tedy pro velká ξ musí chovat jako $\exp[-\xi^2/2]$. To nás přivádí k substituci pro závislou proměnnou

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} u(\xi) \quad , \quad (2.47)$$

po jejímž provedení dostaneme rovnici

$$u'' - 2\xi u' + (\lambda - 1)u = 0 \quad . \quad (2.48)$$

Derivace se automaticky rozumí podle nové proměnné ξ . V principu by z matematického hlediska bylo v pořádku říci „v rovnici (2.44) provedeme substituce (2.45) a (2.47), výsledná rovnice je (2.48)“. V bodech 1 a 2 jsme si jen ukázali, jaké pohyby nás k těmto substitucím vedou, protože postup je obdobný i u jiných průběhů potenciálu.

3. rozvoj řešení do mocninné řady

Řešení rovnice (2.48) budeme hledat ve tvaru mocninné řady

$$u(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k \quad .$$

Snadno nalezneme první a druhou derivaci

$$u'(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k c_k \xi^{k-1} \quad ; \quad u''(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) c_k \xi^{k-2} \quad .$$

Výrazy pro u a její derivace dosadíme do rovnice (2.48):

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) c_k \xi^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} 2k c_k \xi^k + (\lambda-1) \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k = 0 \quad .$$

Jednotlivé členy přeindexujeme tak, aby mocniny ξ byly stejné:

$$\sum_{l=-2}^{\infty} (l+1)(l+2) c_{l+2} \xi^l - \sum_{l=0}^{\infty} 2l c_l \xi^l + (\lambda-1) \sum_{l=0}^{\infty} c_l \xi^l = 0 \quad .$$

První dva členy v prvním výrazu jsou nulové a proto můžeme spodní hranici posunout na $l=0$:

$$\sum_{l=0}^{\infty} [(l+1)(l+2) c_{l+2} - (2l+1-\lambda) c_l] \xi^l = 0 \quad .$$

Má-li být polynomiální výraz identicky nulový pro každou hodnotu ξ , musí být nulové všechny koeficienty, tj. výrazy v hranaté závorce. Získáváme tak rekurentní relaci pro koeficienty c_l naší řady:

$$c_{l+2} = \frac{(2l+1-\lambda)}{(l+1)(l+2)} c_l \quad . \quad (2.49)$$

Budeme-li znát koeficienty c_0 a c_1 , budeme znát celé řešení, protože z rekurentní relace můžeme spočítat

$$\begin{aligned} c_0 &\Rightarrow c_2, c_4, c_6, \dots \\ c_1 &\Rightarrow c_3, c_5, c_7, \dots \end{aligned}$$

Koeficienty c_0 a c_1 tak hrají roli dvou integračních konstant řešení diferenciální rovnice (2.48) druhého řádu. Sudá část řady se počítá z c_0 a lichá z c_1 .

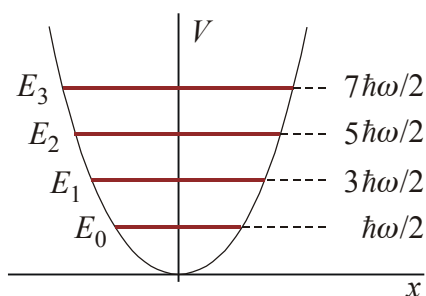
4. oříznutí řady

Nalezené řešení je ve tvaru nekonečné mocninné řady. Řeší sice původní rovnici, ale není z prostoru L^2 . Aby bylo řešení z L^2 (integrovatelné s kvadrátem), musí být řada konečná, tedy polynomiální. Prakticky to znamená, že koeficienty řady musí být od určitého $l=n$ nulové. V rekurentní relaci (2.49) bude čitatel pro toto $l=n$ nulový a veškeré odvozené koeficienty c_l s $l \geq n$ nulové. Vidíme, že nebude možné takto „oříznout“ současně sudé i liché členy řady. Proto jsou možná jen sudá řešení ($c_0 \neq 0, c_1 = 0$) nebo jen lichá řešení ($c_0 = 0, c_1 \neq 0$) představující sudý nebo lichý polynom stupně n . Podmínka oříznutí (nulovost čitatele) v (2.49) je $2l+1-\lambda=0$ a plyne z ní po vyjádření λ spektrum energie harmonického oscilátoru:

$$E_n = (n+1/2) \hbar \omega \quad . \quad (2.50)$$

Poznámky:

- 1) Nezapomínejte, že energie E (vlastní hodnota operátoru $\hat{H}$) je po celou dobu výpočtu schována v bezrozměrné konstantě (vlastním čísle) λ .
- 2) Sama Schrödingerova rovnice má řešení pro každou hodnotu energie. Tato řešení ale nejsou integrovatelná s kvadrátem, až výběr integrovatelných funkcí (oříznutí řady) vede k diskrétnímu spektru operátoru energie (jen pro některé vybrané hodnoty energie ubývá řešení v $\pm\infty$ dostatečně rychle, aby bylo integrovatelné s kvadrátem). Tato situace je typická pro spojitě průběhy potenciální energie s minimem.



- 3) Základní hladina energie $E_0 = \hbar\omega/2$ je nenulová!! I při nulové absolutní teplotě není harmonický oscilátor v klidu a vykonává tzv. nulové kmity (například oscilace krystalové mříže). Při absolutní nule se hmota nachází ve stavu s nejnižší možnou energií, nikoli však v klidu.
- 4) Spektrum operátoru energie je ekvidistantní, rozdíl dvou libovolných sousedních energetických hladin je $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$: To je právě známý Planckův vztah z počátku století. Energie jakýchkoli kmitů se nemůže měnit spojitě, ale po skocích (energetických kvantech)

$$\Delta E = \hbar\omega \quad (2.51)$$

- 5) Zde se také nachází jedna z prvních možností experimentálního určení Planckovy konstanty měřením energetických kvant (například při fotoelektrickém jevu: vyražení elektronů z povrchu kovu kvanty energie elektromagnetického záření – fotony). Zatím byla Planckova konstanta jediným neurčeným parametrem základních postulátů kvantové teorie.
- 6) Polynomiální řešení pro funkci u se nazývají Hermitovy polynomy a označujeme je $H_n(\xi)$. Pro dané n nejprve určíme bezrozměrné vlastní číslo λ_n

$$\lambda_n \equiv \frac{2E_n}{\hbar\omega} = \frac{(n+1/2)\hbar\omega}{\hbar\omega} = n + \frac{1}{2}$$

a z rekurentní formule (2.49) určíme pomocí c_0 nebo c_1 (podle toho zda jde o sudý či lichý polynom) ostatní koeficienty rozvoje. Pro $c_0 = c_1 = 1$ se nalezené polynomy nazývají Hermitovy. Prvních několik Hermitových polynomů vychází:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= c_0, & H_3(\xi) &= c_1(\xi - 2/3\xi^3), \\ H_1(\xi) &= c_1\xi, & H_4(\xi) &= c_0(1 - 4\xi^2 + 4/3\xi^4), \\ H_2(\xi) &= c_0(1 - 2\xi^2), & H_5(\xi) &= c_1(\xi - 4/3\xi^3 + 4/15\xi^5) \dots \end{aligned}$$

Koeficienty c_0 a c_1 se volí rovny jedné. Stupeň polynomu n udává současně počet nulových bodů polynomu (počet průsečíků s osou ξ).

- 7) Hermitovy polynomy se prakticky snadno počítají nenormované z rekurentní formule

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi).$$

Pro první polynomy vychází:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, & H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, \\ H_1(\xi) &= 2\xi, & H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, & H_5(\xi) &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \dots \end{aligned}$$

Normovací koeficienty (i s exponenciální vahou $\exp[-\xi^2]$) jsou dány vztahem

$$\alpha_n = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} n! 2^n}}.$$

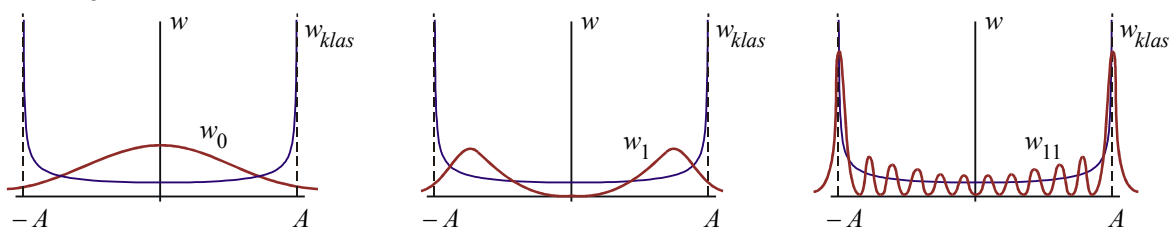
- 8) Celkové řešení spektrálního problému je

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad |n\rangle = \psi_n(\xi) = \alpha_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.52)$$

Vlastní funkce $\psi_n(\xi)$ tvoří přirozený úplný ortonormální systém na prostoru $L^2(-\infty, +\infty)$, který pro $\xi \rightarrow \pm\infty$ „dosti rychle“ ubývá k nule.

- 9) Hustota pravděpodobnosti, že částice kmitající s energií E_n (oscilátor ve stavu $|n\rangle$) se nachází v poloze x (resp. bezrozměrné poloze ξ), je dána výrazem $w_n = \psi_n^* \psi_n$ (uvidíme později). Pro několik prvních stavů je vykreslena na obrázku. Pravděpodobnost má oscilující charakter a existuje malá nenulová pravděpodobnost výskytu oscilátoru i za klasickými body obratu. Tento obraz nastává pro systémy s nízkou teplotou a je zcela odlišný od klasického řešení. Pro velké energie (vysoká n) by se měla křivka blížit klasické pravděpodobnosti výskytu oscilátoru (1.49). Vidíme však, že oscilace jsou sice velmi husté, ale existuje značné množství bodů, ve kterých je kvantová pravděpodobnost nulová. Nic takového však u makroskopických systémů neměříme. Proč? Je to dáno rozlišovací schopností makroskopických přístrojů. Žádný přístroj nebude měřit

polohu s takovou přesností, aby registroval jednotlivá minima pravděpodobnosti u vysokých energetických stavů. Přístroj ve skutečnosti určuje polohu s konečnou přesností, do které se vejde řada minim a registruje jen střední hodnotu hustoty pravděpodobnosti. A tou je právě klasická křivka.



2.4.2. Řešení bez volby reprezentace (Dirac)

Úlohu (2.41) budeme nyní řešit obecně. Hamiltonův operátor nejprve přepíšeme do bezrozměrného tvaru:

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}) \equiv \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{\mathbf{X}}^2 + \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} \quad \rightarrow \quad \frac{\hat{H}}{\hbar \omega} \equiv \frac{m \omega}{2 \hbar} \hat{\mathbf{X}}^2 + \frac{1}{2 m \hbar \omega} \hat{\mathbf{P}}^2 \quad (2.53)$$

Převedení do bezrozměrného tvaru naprosto není nutné, veškeré další úvahy by bylo možné provádět i s rozměrovým hamiltoniánem a všechny následující vztahy by se lišily o konstantu $\hbar \omega$, kterou jsme hamiltonián vydělili. Důvodem je to, že vztahy získané z bezrozměrného hamiltoniánu jsou poněkud názornější. Pro komutující čísla je možné součet kvadrátů „odmocnit“ pomocí vztahu $a^2 + b^2 = (a + ib) \cdot (a - ib)$. U nekomutujících objektů není situace tak jednoduchá. Zavedme operátory:

$$\hat{\mathbf{a}} \equiv \sqrt{\frac{m \omega}{2 \hbar}} \hat{\mathbf{X}} + i \sqrt{\frac{1}{2 m \hbar \omega}} \hat{\mathbf{P}} \quad ; \quad \hat{\mathbf{a}}^+ \equiv \sqrt{\frac{m \omega}{2 \hbar}} \hat{\mathbf{X}} - i \sqrt{\frac{1}{2 m \hbar \omega}} \hat{\mathbf{P}} \quad (2.54)$$

Oba tyto operátory jsou pro kvantovou teorii velmi důležité. Nazývají se anihilační a kreační operátory (smysl tohoto názvu uvidíme za chvíli). Kreační a anihilační operátory, jako jedny z mála v kvantové teorii, nejsou hermitovské a nepůsobí tedy v obou částech skalárního součinu stejně. Platí pro ně některé důležité relace, například:

$$\begin{aligned} (1) \quad & \frac{\hat{H}}{\hbar \omega} = \hat{\mathbf{a}}^+ \hat{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \quad , \\ (2) \quad & \frac{\hat{H}}{\hbar \omega} = \hat{\mathbf{a}} \hat{\mathbf{a}}^+ - \frac{1}{2} \quad , \\ (3) \quad & \hat{\mathbf{X}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2 m \omega}} (\hat{\mathbf{a}}^+ + \hat{\mathbf{a}}) \quad , \\ (4) \quad & \hat{\mathbf{P}} = i \sqrt{\frac{m \hbar \omega}{2}} (\hat{\mathbf{a}}^+ - \hat{\mathbf{a}}) \quad , \\ (5) \quad & [\hat{H}, \hat{\mathbf{a}}] = -\hbar \omega \hat{\mathbf{a}} \quad , \\ (6) \quad & [\hat{H}, \hat{\mathbf{a}}^+] = +\hbar \omega \hat{\mathbf{a}}^+ \quad , \\ (7) \quad & [\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}^+] = \hat{\mathbf{1}} \quad . \end{aligned} \quad (2.55)$$

Důkaz všech relací je triviální. Stačí jen dosadit z definice kreačních a anihilačních operátorů $\hat{a}^+$, $\hat{a}$ (2.54) a využít základní komutační relace $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \hat{1}$. Relace (1) a (2) jsou zobecněním relace $a^2 + b^2 = (a+ib) \cdot (a-ib)$ pro nekomutující objekty a představují formální odmocnění hamiltoniánu. Kreační a anihilační operátory jsou lineární kombinací operátoru souřadnice a operátoru hybnosti. Proto je možné naopak operátor souřadnice a hybnosti vyjádřit jako lineární kombinaci kreačních a anihilačních operátorů - viz relace (3) a (4). Známe-li kreační a anihilační operátor, můžeme z relací (1) až (4) zpětně zrekonstruovat hamiltonián, operátor souřadnice a operátor hybnosti. Komutační relace (5) až (7) vyjadřují základní vlastnosti kreačních a anihilačních operátorů: Uvidíme, že relace (5) znamená, že anihilační operátor posouvá stavy systému o energetickou hladinu $\hbar\omega$ dolů a relace (6) znamená, že kreační operátor posouvá stav o energetickou hladinu $\hbar\omega$ vzhůru. Relace (7) je potom vzájemnou relací mezi anihilačním a kreačním operátorem.

V následující větě dokážeme, že operátor $\hat{a}^+$ je kreačním operátorem, tj. posouvá energetické stavy o jednotku vzhůru (kreuje, vytváří energetické kvantum).

Věta:

Nechť $\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$. Potom $\hat{a}^+ |n\rangle \sim |n+1\rangle$.

Důkaz:

$$\begin{aligned} \hat{H} \hat{a}^+ |n\rangle &\stackrel{(6)}{=} (\hat{a}^+ \hat{H} + \hbar\omega \hat{a}^+) |n\rangle = (\hat{a}^+ E_n + \hbar\omega \hat{a}^+) |n\rangle = (E_n + \hbar\omega) \hat{a}^+ |n\rangle \\ &\Downarrow \\ \hat{H} \hat{a}^+ |n\rangle &= (E_n + \hbar\omega) \hat{a}^+ |n\rangle \\ &\Downarrow \\ \hat{a}^+ |n\rangle &\sim |n+1\rangle. \end{aligned}$$

Zcela analogicky můžeme z relace (5) ukázat, že pro anihilační operátor platí $\hat{a} |n\rangle \sim |n-1\rangle$. Zavedeme-li normovací konstanty (požadujeme, aby všechny stavy byly normovány k jedné, tj. ortonormální bázi z vlastních vektorů operátoru energie), můžeme posouvání v energetickém spektru prováděné kreačním a anihilačním operátorem jednoduše zapsat jako

$$\begin{aligned} \hat{a}^+ |n\rangle &= \alpha_n^+ |n+1\rangle, \\ \hat{a} |n\rangle &= \alpha_n^- |n-1\rangle. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Normovací konstanty α určíme později. Nyní naše úsilí zaměříme na nalezení spektra Hamiltonova operátoru pro harmonický oscilátor.

Hamiltonův operátor je součtem kvadrátů dvou Hermitových operátorů a je proto pozitivně definitní, tj. jeho vlastní čísla jsou nezáporná. Kreační a anihilační operátory posouvají ve spektru energie o konstantní hodnotu (energetické kvantum). Musí tedy existovat stav s nejnižší možnou energií, která je nezáporná. Tento stav nazýváme základní stav a označujeme ho $|0\rangle$. Zapůsobíme-li na základní stav anihilačním operátorem, musíme dostat nulový vektor (není již co anihilovat, jsme v základním stavu s nejnižší možnou energií). Pro základní stav tedy platí:

$$\hat{H} |0\rangle = E_0 |0\rangle; \quad \hat{a} |0\rangle = 0.$$

Nalezneme kvadrát velikosti poslední relace (skalární součin prvku se sebou samým):

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \hat{\mathbf{a}}^+ \hat{\mathbf{a}} | 0 \rangle &= 0 \quad \stackrel{(2.55.1)}{\Rightarrow} \quad \langle 0 | \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} - \frac{\hat{\mathbf{1}}}{2} | 0 \rangle = 0 \quad \Rightarrow \\
\frac{1}{\hbar\omega} \langle 0 | \hat{\mathbf{H}} | 0 \rangle - \frac{1}{2} \langle 0 | \hat{\mathbf{1}} | 0 \rangle &= 0 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{E_0}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) \langle 0 | 0 \rangle = 0 \quad \Rightarrow \\
\frac{E_0}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} &= 0 \quad \Rightarrow \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} .
\end{aligned}$$

Známe-li hodnotu základního energetického stavu, můžeme další hodnoty energií získat působením kreačního operátoru, ten posouvá v energii o konstantu $\hbar\omega$, je tedy jasné, že

$$\begin{aligned}
E_1 &= E_0 + \hbar\omega = \frac{3}{2} \hbar\omega , \\
E_2 &= E_0 + 2\hbar\omega = \frac{5}{2} \hbar\omega , \\
&\vdots \\
E_n &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega ; \quad n = 0, 1, 2, \dots .
\end{aligned}$$

Spektrum harmonického oscilátoru jsme získali jen z vlastností Hamiltonova operátoru, resp. jen z formulace úlohy (2.41). Nikde jsme nevolili konkrétní reprezentaci, konkrétní Hilbertův prostor. Kreační a anihilační operátory, se kterými jsme se zde poprvé setkali, mají značný význam v kvantové teorii pole, kde pomocí podobných operátorů kreujeme a anihilujeme jednotlivé částice přítomné v systému. Zde u harmonického oscilátoru jen kreujeme či anihilujeme energetické kvantum a tím se dostáváme o jednu hladinu výše nebo níže. Aby naše odvození bylo úplné určíme na závěr normovací konstanty ve výrazu (2.56). Vytvořme nejprve kvadrát normy obou relací:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{a}}^+ | n \rangle &= \alpha_n^+ | n+1 \rangle & \Rightarrow & \quad \langle n | \hat{\mathbf{a}} \hat{\mathbf{a}}^+ | n \rangle = |\alpha_n^+|^2 \langle n+1 | n+1 \rangle & (2.55.1,2) \\
\hat{\mathbf{a}} | n \rangle &= \alpha_n^- | n-1 \rangle & \Rightarrow & \quad \langle n | \hat{\mathbf{a}}^+ \hat{\mathbf{a}} | n \rangle = |\alpha_n^-|^2 \langle n-1 | n-1 \rangle & \\
\langle n | \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} | n \rangle &= |\alpha_n^+|^2 \langle n+1 | n+1 \rangle & \Rightarrow & \quad \left(E_n + \frac{1}{2} \right) \langle n | n \rangle = |\alpha_n^+|^2 \langle n+1 | n+1 \rangle \\
\langle n | \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} | n \rangle &= |\alpha_n^-|^2 \langle n-1 | n-1 \rangle & \Rightarrow & \quad \left(E_n - \frac{1}{2} \right) \langle n | n \rangle = |\alpha_n^-|^2 \langle n-1 | n-1 \rangle .
\end{aligned}$$

Z požadavku normovanosti vlastních vektorů operátoru energie k jedné máme:

$$\begin{aligned}
|\alpha_n^+|^2 &= \left(E_n + \frac{1}{2} \right) \stackrel{(2.52)}{=} n+1 \\
|\alpha_n^-|^2 &= \left(E_n - \frac{1}{2} \right) \stackrel{(2.52)}{=} n .
\end{aligned}$$

Fázový faktor při odmocňování komplexního čísla není podstatný (jednotkovou velikost vektoru neovlivní). Výsledné působení kreačního a anihilačního operátoru (2.56) i s normovací konstantou tedy je:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{a}}^+ | n \rangle &= \sqrt{n+1} | n+1 \rangle , \\
\hat{\mathbf{a}} | n \rangle &= \sqrt{n} | n-1 \rangle .
\end{aligned} \tag{2.57}$$

Tento výsledek si můžete snadno zapamatovat: Pod odmocninou je vždy pořadové číslo vyššího energetického stavu z obou stran rovnice. Zajímavé vlastnosti má ještě jeden operátor:

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^+ \hat{a} \quad . \quad (2.58)$$

Zapůsobme s tímto operátorem na n -tý energetický stav:

$$\hat{N} |n\rangle = \hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle \stackrel{(2.57)}{=} \sqrt{n} \hat{a}^+ |n-1\rangle = \sqrt{n} \sqrt{n} |n\rangle = n |n\rangle \quad .$$

Vlastním číslem tohoto operátoru je počet kvant přítomných v daném energetickém stavu. V kvantové teorii pole má tento operátor význam *operátoru počtu částic*.

2.4.3. Řešení pomocí maticové mechaniky (Heisenberg)

Řešme nyní ještě jednou úlohu (2.41) o harmonickém oscilátoru na prostoru nekonečných posloupností l^2 sčitatelných s kvadrátem. Na prostoru n -tic jsou operátory matice $n \times n$. Na prostoru nekonečných posloupností ($n \rightarrow \infty$) budou operátory nekonečně rozměrné matice. Úkol tedy je: najít nekonečně rozměrné matice $\mathbf{X}$, $\mathbf{P}$, $\mathbf{H}$, které vyhovují úloze (2.41). Tyto matice nemusíme hledat „na zelené louce“. S tím co víme o kreačních a anihilačních operátorech je snadno zkonstruujeme. Tyto matice najdeme v energetické reprezentaci, to znamená, že určíme maticové elementy operátorů $\hat{\mathbf{X}}$, $\hat{\mathbf{P}}$, $\hat{\mathbf{H}}$ v bázi vytvořené z vlastních vektorů Hamiltonova operátoru. Všechny tři operátory umíme zkonstruovat pomocí kreačních a anihilačních operátorů podle relace (2.55). A působení kreačních a anihilačních operátorů na zvolenou bázi také známe – viz relace (2.57). Konstrukce elementů příslušných matic je tedy víceméně triviální záležitostí:

$$\begin{aligned} X_{kl} &= \langle k | \hat{\mathbf{X}} | l \rangle \stackrel{(2.55)}{=} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle k | (\hat{a}^+ + \hat{a}) | l \rangle \stackrel{(2.57)}{=} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{l+1} \langle k | l+1 \rangle + \sqrt{l} \langle k | l-1 \rangle) = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{l+1} \delta_{k, l+1} + \sqrt{l} \delta_{k, l-1}) \quad , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{kl} &= \langle k | \hat{\mathbf{P}} | l \rangle \stackrel{(2.55)}{=} i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle k | (\hat{a}^+ - \hat{a}) | l \rangle \stackrel{(2.57)}{=} \\ &= i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\sqrt{l+1} \langle k | l+1 \rangle - \sqrt{l} \langle k | l-1 \rangle) = \\ &= i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\sqrt{l+1} \delta_{k, l+1} - \sqrt{l} \delta_{k, l-1}) \quad , \end{aligned}$$

$$H_{kl} = \langle k | \hat{\mathbf{H}} | l \rangle \stackrel{(2.55)}{=} \hbar\omega \langle k | \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) | l \rangle \stackrel{(2.57)}{=} \dots = \left(l + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \delta_{kl} \quad .$$

Napišme si tyto matice:

$$\mathbf{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad ,$$

$$\mathbf{P} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3\hbar\omega}{2} & 0 & \\ 0 & 0 & \frac{5\hbar\omega}{2} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

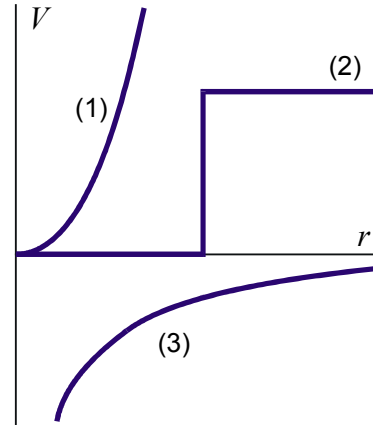
Ověřte si, že skutečně $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar \mathbf{1}$ a $\mathbf{H} = \mathbf{P}^2/2m + m\omega^2\mathbf{X}^2/2$ podle požadavků úlohy (2.41). Ze znalosti matic $\mathbf{X}$ a $\mathbf{P}$ jsme již mohli Hamiltonovu matici určit přímo z této relace. Poslední co zbývá je nalézt vlastní čísla matice $\mathbf{H}$. Tato úloha je mimořádně jednoduchá. U diagonální matice jsou vlastní čísla právě prvky na diagonále. Pokud tento fakt nevíte, výpočet je jednoduchý:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}|n\rangle = E|n\rangle &\Rightarrow (\mathbf{H} - E\mathbf{1})|n\rangle = 0 \Rightarrow \det(\mathbf{H} - E\mathbf{1}) = 0 \Rightarrow \\ &\left(\frac{\hbar\omega}{2} - E\right) \cdot \left(\frac{3\hbar\omega}{2} - E\right) \cdot \left(\frac{5\hbar\omega}{2} - E\right) \dots = 0 \Rightarrow \\ E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Opět tedy máme vztah (2.50) pro spektrum harmonického oscilátoru.

2.5. SFÉRICKÝ SYMETRICKÝ POTENCIÁL

Sféricky symetrickým (centrálním) nazýváme potenciál, který závisí jen na vzdálenosti od určitého centrálního bodu. Pro popis pohybu těles v sféricky symetrickém potenciálu je velmi výhodný sférický souřadnicový systém. Mezi nejznámější sférické potenciály patří sférický harmonický oscilátor, sférická jáma a Coulombův potenciál. Sférický oscilátor si můžete představit jako tělísko v počátku souřadnic, od kterého vedou pružiny na všechny strany. Kdykoli ho vychýlíme, bude působit vratná síla směrem do centra. Průběh potenciální energie je kvadratický. Sférická jáma přibližně odpovídá potenciálu, který pociťuje neutron zachycený v atomovém jádře. Jaderné síly na hranici jámy ($r = a$) jsou značné (v idealizaci (2.59) dokonce nekonečné) a v jiných oblastech velmi slabé. Coulombův potenciál se uplatní například ve vodíkovém atomu, kdy osamocený elektron podléhá působení jediného protonu v atomovém jádře. Nezapomínejte, že $r \in (0, \infty)$. Průběhy těchto známých potenciálů jsou:



$$\begin{aligned}
 (1) \quad V(r) &= \frac{1}{2}kr^2, \\
 (2) \quad V(r) &= \begin{cases} 0 & r < a \\ V_0 & r \geq a \end{cases}, \\
 (3) \quad V(r) &= \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{\alpha}{r}.
 \end{aligned} \tag{2.59}$$

V klasické mechanice bude popsán systém Lagrangeovou funkcí, zobecněnými hybnostmi a energií a Hamiltonovou funkcí ve sférickém souřadnicovém systému takto:

$$\begin{aligned}
 L &= \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\sin^2\theta\dot{\phi}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 - V(r), \\
 p_r &= m\dot{r}, \\
 p_\phi &= mr^2\sin^2\theta\dot{\phi}, \\
 p_\theta &= mr^2\dot{\theta}, \\
 E &= \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\sin^2\theta\dot{\phi}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 + V(r), \\
 H &= \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\phi^2 + p_\theta^2}{2mr^2} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r).
 \end{aligned} \tag{2.60}$$

Již v klasické mechanice jsme si ukázali, že zobecněné hybnosti odpovídající úhlovým proměnným jsou komponenty momentu hybnosti. Druhá část Hamiltonovy funkce odpovídá rotačním stupňům volnosti a lze ji zapsat pomocí vektoru momentu hybnosti $\mathbf{L}$ vzhledem k ose z , od které je odvozen sférický souřadnicový systém.

Z předchozího již víme, že jednotlivé komponenty momentu hybnosti nejsou současně měřitelné a nekomutují spolu (2.30). Současně ale můžeme měřit kvadrát momentu hybnosti (2.31) a libovolnou z jeho komponent (2.32). U sféricky symetrického problému budeme preferovat třetí osu a třetí komponentu. Osa z má preferované postavení při budování sférického souřadnicového systému, ve skutečnosti je však lhostejné, kterou z komponent

momentu hybnosti zvolíme do úplné množiny pozorovatelných. Je-li v systému přítomno vnější magnetické pole, volíme zpravidla souřadnicový systém tak, aby třetí osa mířila ve směru tohoto pole, osa z je potom současně směrem vnějšího magnetického pole.

Je-li systém sféricky symetrický, potom s operátory $\hat{\mathbf{L}}^2$ a $\hat{\mathbf{L}}_3$ ještě komutuje Hamiltonův operátor $\hat{\mathbf{H}}$. To je vidět již z klasického rozpisu (2.60). Víme totiž, že zobecněné souřadnice nekomutují jediné se svými zobecněnými hybnostmi. V komutátoru $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{H}}]$ mohou tedy být jediné nenulové členy s úhlovou částí Hamiltoniánu, tou je ale právě násobek $\hat{\mathbf{L}}^2$. Operátor sám se sebou komutuje, takže výsledek může být jediné nulový. Podobně komutátor $[\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{H}}]$ může mít jediné nenulové části s úhlovou částí Hamiltoniánu, tj. $\sim [\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}^2]$. Tento komutátor je ale opět nulový podle (2.32).

Nalezli jsme tak trojici nezávislých komutujících operátorů, která tvoří úplnou množinu pozorovatelných u nerelativistického sféricky symetrického problému (v relativistické úloze k těmto proměnným ještě přibude spin):

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_3] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{H}}] = [\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{H}}] = 0 \quad . \quad (2.61)$$

U soustavy nezávislých vzájemně komutujících operátorů je možné hledat společné vlastní vektory ke všem operátorům. U sféricky symetrického problému budeme tedy řešit soustavu tří rovnic pro vlastní vektory

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} |v, l, m\rangle &= E_v |v, l, m\rangle \quad , \\ \hat{\mathbf{L}}^2 |v, l, m\rangle &= \lambda_l |v, l, m\rangle \quad , \\ \hat{\mathbf{L}}_3 |v, l, m\rangle &= \mu_m |v, l, m\rangle \quad . \end{aligned} \quad (2.62)$$

Index v čísluje energetické stavy, index l stavy kvadrátu momentu hybnosti a index m stavy projekce momentu hybnosti do libovolné osy (zvolili jsme třetí). Vlastní čísla jsme označili E, λ, μ . Tuto soustavu je třeba řešit současně. Co by se stalo, kdybychom například řešili jen rovnici pro energii? Nalezená vlastní čísla E_v by samozřejmě byla v pořádku, ale ke každému vlastnímu číslu (každé hodnotě energie) by existovalo více nezávislých vlastních vektorů (ve skutečnosti se od sebe liší čísla l a m , to ale nevíme, protože řešíme jen první rovnici). Tomuto typu spektra říkáme *degenerované spektrum*. Znamená to jen to, že k danému vlastnímu číslu existuje více vlastních vektorů. Odlišili bychom je od sebe až pomocí dalších operátorů, které komutují s operátorem, jehož spektrum právě hledáme.

V následujících dvou kapitolách se budeme zabývat momentem hybnosti, tedy druhou a třetí rovnicí v (2.62). Řešení pro moment hybnosti je stejné pro všechny průběhy potenciální energie. V kapitole 2.5.1 nalezneme řešení bez použití konkrétní reprezentace a v kapitole 2.5.2. naznačíme, jak by se při řešení postupovalo v x reprezentaci. První rovnicí v (2.62) se budeme zabývat v kapitole 2.5.3. Řešení pro energii (energetické spektrum) již samozřejmě závisí na průběhu potenciální energie a je jiné například pro vodík a jiné pro sférický oscilátor. Navíc řešení pro energii závisí na číslech l a m . To je logické: moment hybnosti souvisí s rotačními stavy systému a ty k energii přispívají. Vidíme to konec konců i v hamiltoniánu (2.60), kde je právě rotační část energie vyjádřena přes kvadrát momentu hybnosti.

2.5.1. Moment hybnosti

Základními komutačními relacemi pro moment hybnosti jsou vztahy (2.30), důležitý je také vztah (2.32):

$$[\hat{\mathbf{L}}_1, \hat{\mathbf{L}}_2] = i\hbar \hat{\mathbf{L}}_3 \quad + \quad \text{cyklické záměny,}$$

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_3] = 0 \quad .$$

Zavedme nyní tzv. posuvné operátory

$$\hat{\mathbf{L}}_{\pm} \equiv \hat{\mathbf{L}}_1 \pm i\hat{\mathbf{L}}_2 \quad . \quad (2.63)$$

Tyto operátory budou mít podobný význam jako kreační a anihilační operátory u energie harmonického oscilátoru. Budou nás totiž posouvat ve spektru momentu hybnosti. Napišme přehledně jejich důležité vlastnosti (všechny lze snadno odvodit z definice posuvných operátorů a z komutačních relací momentu hybnosti):

$$\begin{aligned} (1) \quad \hat{\mathbf{L}}_1 &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}}_+ + \hat{\mathbf{L}}_-) \quad , \\ (2) \quad \hat{\mathbf{L}}_2 &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}}_+ - \hat{\mathbf{L}}_-) \quad , \\ (3) \quad \hat{\mathbf{L}}_{\pm}^{\dagger} &= \hat{\mathbf{L}}_{\mp} \quad , \\ (4) \quad \hat{\mathbf{L}}_+ \hat{\mathbf{L}}_- &= \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 + \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 \quad , \\ (5) \quad \hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ &= \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 - \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 \quad , \\ (6) \quad [\hat{\mathbf{L}}_+, \hat{\mathbf{L}}_-] &= 2\hbar \hat{\mathbf{L}}_3 \quad , \\ (7) \quad [\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}_{\pm}] &= \pm \hbar \hat{\mathbf{L}}_{\pm} \quad , \\ (8) \quad [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_{\pm}] &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (2.64)$$

Úlohu, kterou budeme nyní řešit, lze zformulovat takto:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 |\lambda, \mu\rangle &= \lambda |\lambda, \mu\rangle \quad , \\ \hat{\mathbf{L}}_3 |\lambda, \mu\rangle &= \mu |\lambda, \mu\rangle \quad . \end{aligned}$$

Dokažme nejprve, že posuvné operátory posouvají vlastní vektory ve třetí komponentě momentu hybnosti o Planckovu konstantu:

Lemma 1: $\hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle \sim |\lambda, \mu \pm \hbar\rangle \quad .$

Důkaz:

Označme $|\psi\rangle \equiv \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle$. Aplikujme operátory $\hat{\mathbf{L}}_3$ a $\hat{\mathbf{L}}^2$ na tento vektor:

$$\hat{\mathbf{L}}_3 |\psi\rangle = \hat{\mathbf{L}}_3 \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle \stackrel{(2.64.7)}{=} (\hat{\mathbf{L}}_{\pm} \hat{\mathbf{L}}_3 \pm \hbar \hat{\mathbf{L}}_{\pm}) |\lambda, \mu\rangle = (\mu \pm \hbar) \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle = (\mu \pm \hbar) |\psi\rangle ,$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |\psi\rangle = \hat{\mathbf{L}}^2 \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle \stackrel{(2.64.8)}{=} \hat{\mathbf{L}}_{\pm} \hat{\mathbf{L}}^2 |\lambda, \mu\rangle = \lambda \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle = \lambda |\psi\rangle .$$

Vidíme, že posuvné operátory $\hat{\mathbf{L}}_{\pm}$ posouvají ve spektru operátoru $\hat{\mathbf{L}}_3$ o konstantu $\pm \hbar$. Ve spektru operátoru $\hat{\mathbf{L}}^2$ nedělají posuvné operátory nic. $\hat{\mathbf{L}}_{\pm}$ tedy mění jen hodnotu projekce momentu hybnosti do zvolené osy.

Lemma 2: Při daném λ je spektrum operátoru $\hat{\mathbf{L}}_3$ omezené, tj. existuje $\mu_{\min}$ a $\mu_{\max}$.

Důkaz: V relacích

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2 |\lambda, \mu\rangle &= \lambda |\lambda, \mu\rangle, \\ (\hat{\mathbf{L}}_1^2 + \hat{\mathbf{L}}_2^2) |\lambda, \mu\rangle &= (\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2) |\lambda, \mu\rangle = (\lambda - \mu^2) |\lambda, \mu\rangle\end{aligned}$$

jsou operátory na levých stranách pozitivně definitní. Proto musí platit $\lambda \geq 0$, $\lambda - \mu^2 \geq 0$.

Zřejmě tedy musí být $\mu^2 \leq \lambda \wedge \lambda \geq 0$ a proto $\mu \in (-\sqrt{\lambda}, +\sqrt{\lambda})$ a existuje $\mu_{\min}$ a $\mu_{\max}$.

Nyní již spektrum momentu hybnosti odvodíme standardním způsobem. Podobně jako u harmonického oscilátoru zapůsobíme posuvným operátorem na první (resp. poslední stav). Výsledek působení musí být nulový, protože další stav již neexistuje:

$$\hat{\mathbf{L}}_+ |\lambda, \mu_{\max}\rangle = 0 \quad \wedge \quad \hat{\mathbf{L}}_- |\lambda, \mu_{\min}\rangle = 0.$$

vytvoříme kvadrát normy těchto vektorů:

$$\langle \lambda, \mu_{\max} | \hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ | \lambda, \mu_{\max} \rangle = 0 \quad \wedge \quad \langle \lambda, \mu_{\min} | \hat{\mathbf{L}}_+ \hat{\mathbf{L}}_- | \lambda, \mu_{\min} \rangle = 0.$$

Součiny operátorů vyjádříme z (2.64.4) a (2.64.5).

$$\langle \lambda, \mu_{\max} | \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 - \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 | \lambda, \mu_{\max} \rangle = 0 \quad \wedge \quad \langle \lambda, \mu_{\min} | \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 + \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 | \lambda, \mu_{\min} \rangle = 0.$$

Po zapůsobení operátorů máme:

$$(\lambda - \mu_{\max}^2 - \mu_{\max} \hbar) \|\lambda, \mu_{\max}\|^2 = 0 \quad \wedge \quad (\lambda - \mu_{\min}^2 + \mu_{\min} \hbar) \|\lambda, \mu_{\min}\|^2 = 0.$$

vy nulováním koeficientů u obou relací dostáváme:

$$\lambda = \mu_{\max}^2 + \mu_{\max} \hbar \quad \wedge \quad \lambda = \mu_{\min}^2 - \mu_{\min} \hbar,$$

neboli

$$\lambda = \mu_{\max} (\mu_{\max} + \hbar) \quad \wedge \quad \lambda = \mu_{\min} (\mu_{\min} - \hbar). \quad (*)$$

Posuvné operátory posouvají ve spektru třetí komponenty momentu hybnosti o Planckovu konstantu, proto musí také současně platit:

$$\mu = \mu_{\min}, \mu_{\min} + \hbar, \mu_{\min} + 2\hbar, \mu_{\min} + 3\hbar, \dots, \mu_{\max} - \hbar, \mu_{\max}.$$

zavedme bezrozměrné číslo $m \equiv \mu / \hbar$. Potom

$$m = m_{\min}, m_{\min} + 1, m_{\min} + 2, m_{\min} + 3, \dots, m_{\max} - 1, m_{\max}.$$

Označme $m_{\max} \equiv l$. Z relací (*) snadno zjistíme, že $m_{\min} = -l$. Číslo m tedy může nabývat celkem $2l+1$ různých hodnot z množiny $m \in \{-l, -l+1, -l+2, \dots, l-1, l\}$. Počet hodnot $2l+1$ musí být nezáporné celé číslo a proto samo číslo l může nabývat jen poločíselných hodnot

$$l \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots\}. \text{ Vlastní číslo } \lambda = \mu_{\max} (\mu_{\max} + \hbar) = l \hbar (l \hbar + \hbar) = \hbar^2 l(l+1).$$

Závěr: Výsledky celého odvození můžeme zformulovat takto:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 |l, m\rangle &= l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle, \quad l \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots\}; \\ \hat{L}_3 |l, m\rangle &= m\hbar |l, m\rangle, \quad m \in \{-l, -l+1, -l+2, \dots, l-1, l\}; \\ \hat{L}_{\pm} |l, m\rangle &\sim |l, m \pm 1\rangle.\end{aligned}\quad (2.65)$$

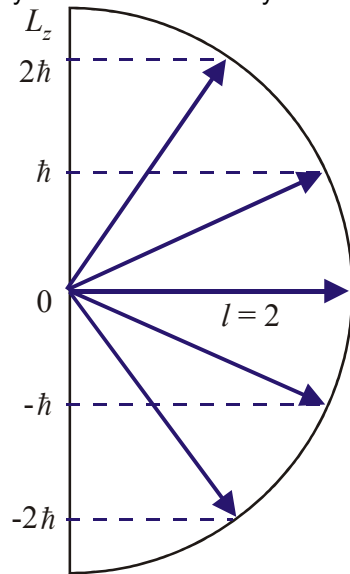
Poznámky k řešení: (velmi důležité, čtěte pozorněji než samo řešení!!!)

- 1) Číslo l čísluje velikost momentu hybnosti a nazývá se **vedlejší kvantové číslo** (hlavní kvantové číslo čísluje energii). Číslo m čísluje projekci momentu hybnosti do libovolné osy. Vzhledem k tomu, že nabitá rotující částice má nenulový magnetický moment, a toto číslo bylo poprvé zavedeno pro elektron v atomárním obalu vodíku, nazývá se **magnetické kvantové číslo**.
- 2) Možné hodnoty velikosti momentu hybnosti a jeho projekce do třetí osy jsou:

$$\begin{aligned}|L| &= \sqrt{l(l+1)} \hbar, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots; \\ L_3 &= m\hbar, \quad m = -l, -l+1, \dots, l.\end{aligned}\quad (2.66)$$

- 3) **Poločíselné hodnoty**, které jsme odvodili pro číslo l jsou skutečně také možné. Realizují se u spinu, jehož operátor má stejnou komutační strukturu jako moment hybnosti. V Schrödingerovské X reprezentaci (následující kapitola) tyto hodnoty nedostaneme. **Volba reprezentace zde znamená ztrátu části řešení.** To, že poločíselné hodnoty l jsou již součástí komutačních relací (2.30) bylo objeveno až relativně pozdě (v roce 1968 Kaufmannem) postupem podobným našemu odvození.
- 4) Z výsledku (2.66), respektive (2.65) plyne skutečný význam Planckovy konstanty. **Jedná se o elementární kvantum momentu hybnosti.** Při měření momentu hybnosti budeme vždy měřit projekci momentu do určité osy, dané měřicím zařízením. Tato projekce je vždy násobkem Planckovy konstanty.
- 5) Vidíme, že stavy s konkrétním vedlejším kvantovým číslem l jsou **degenerovány** – existuje více vlastních vektorů $|l, m\rangle$, které přísluší stejnému kvantovému číslu l . Tyto vektory se od sebe liší kvantovým číslem m a jejich počet je $2l+1$ (tzv. **stupeň degenerace**, který označujeme #).
- 6) Historicky byly označovány kvantové stavy velikosti momentu hybnosti elektronu v obalu atomu vodíku písmeny s, p, d, f podle následující tabulky:

$l = 0$	s stav	$m = 0$	# = 1
$l = 1$	p stav	$m = -1, 0, 1$	# = 3
$l = 2$	d stav	$m = -2, -1, 0, 1, 2$	# = 5
$l = 3$	f stav	$m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$	# = 7



- 7) Vztah pro velikost kvadrátu momentu hybnosti lze dostat také jako aritmetický průměr všech možných hodnot. Například pro $l = 2$ jsou možné hodnoty projekcí L_x , L_y nebo L_z rovny $-2\hbar, -\hbar, 0, \hbar, 2\hbar$. Průměrná hodnota kvadrátu je proto dána vztahem

$$\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle = 3 \langle L_z^2 \rangle = 3(4\hbar^2 + \hbar^2 + 0 + \hbar^2 + 4\hbar^2)/5 = 6\hbar^2.$$

Velikost $|L| = \sqrt{6} \hbar$ přesně podle vztahu (2.66).

- 8) Není obtížné napočítat maticové elementy $\langle l, m' | \hat{L}_k | l, m \rangle$ operátoru momentu hybnosti ve vlastní reprezentaci pomocí posuvných operátorů podobně jako u harmonického oscilátoru v kapitole (2.4.3). Pro $l = 0$ může být m i m' jen 0 a proto jde o jediný prvek. Tato matice působí na skalární veličiny, hovoříme o **skalární reprezentaci**. Pro $l = 1/2$ může nabývat m i m' hodnot $-1/2$ a $+1/2$. Jde o matice 2×2 působící na uspořádané dvojice, které nazýváme spinory. Jedná se o tzv. **spinorovou reprezentaci**. Pro $l = 1$ může nabývat m i m' hodnot $-1, 0$ a $+1$. Jde o matice 3×3 působící na uspořádané trojice, které nazýváme vektory. Jedná se o tzv. **vektorovou reprezentaci**. Všimněte si, že matice $\hat{L}_3$ jsou diagonální s vlastními čísly na diagonále.

Spinorová reprezentace ($l = 1/2$)

$$\mathbf{L}_1 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathbf{L}_2 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathbf{L}_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Vektorová reprezentace ($l = 1$)

$$\mathbf{L}_1 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathbf{L}_2 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathbf{L}_3 = \hbar \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Matice pro $l = 1/2$ se nazývají *Pauliho matice* (bez násobících koeficientů).

2.5.2. Řešení v x reprezentaci, kulové funkce

V x reprezentaci budeme problém sférického potenciálu řešit ve sférických souřadnicích (jsou nejbližší symetrii potenciální energie). Je třeba řešit soustavu rovnic (2.62), která bude mít nyní tvar:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} \psi(r, \varphi, \theta) &= E_v \psi(r, \varphi, \theta) , \\ \hat{\mathbf{L}}^2 \psi(r, \varphi, \theta) &= \lambda_l \psi(r, \varphi, \theta) , \\ \hat{\mathbf{L}}_3 \psi(r, \varphi, \theta) &= \mu_m \psi(r, \varphi, \theta) . \end{aligned} \quad (2.67)$$

Operátory zapsané ve sférických souřadnicích mají tvar:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \Delta_{\theta\varphi} + V(r) , \\ \hat{\mathbf{L}}^2 &= -\hbar^2 \Delta_{\theta\varphi} , \\ \hat{\mathbf{L}}_3 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} ; \\ \Delta &= \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} , \\ \Delta_r &\equiv \frac{d}{dr} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r , \\ \Delta_{\theta\varphi} &\equiv \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} . \end{aligned} \quad (2.68)$$

Kinetická energie v Hamiltonově operátoru vede v Schrödingerově rovnici na člen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_x + \Delta_y + \Delta_z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} \right) .$$

V kartézských souřadnicích se Laplaceův operátor štěpí na součet druhých derivací podle jednotlivých os, tomu odpovídá rozklad kinetické energie na složky T_x , T_y a T_z . Ve sférických souřadnicích se Laplaceův operátor dělí na radiální a úhlovou část, tomu odpovídá rozklad kinetické energie na radiální a úhlovou část. Právě úhlová část kinetické energie je rotační energie spojená s momentem hybnosti a proto kvadrátu momentu hybnosti odpovídá úhlová část Laplaceova operátoru.

Hledané řešení $\psi(r, \varphi, \theta)$ samozřejmě závisí na kvantových číslech v , l , m . Řešení budeme hledat v separovaném tvaru

$$\psi(r, \varphi, \theta) = f(r) g(\varphi) h(\theta) . \quad (2.69)$$

Nejdříve řešme poslední z rovnic (2.67):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} f(r) g(\varphi) h(\theta) = \mu_m f(r) g(\varphi) h(\theta) \Rightarrow$$

$$-i\hbar \frac{dg}{d\varphi} = g \Rightarrow g(\varphi) = c \exp\left[i \frac{\mu_m}{\hbar} \varphi\right].$$

Nalezené řešení musí být periodické v úhlu φ :

$$g(0) = g(2\pi) \Rightarrow \mu_m = m\hbar; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

V x reprezentaci jsme opět odvodili kvantování projekce momentu hybnosti. Projekce momentu hybnosti může nabývat jen celistvých násobků Planckovy konstanty. Poločíselná řešení nelze v x reprezentaci nalézt. Přejdem ke konkrétní reprezentaci přicházíme o část řešení. Hledané řešení má nyní tvar:

$$\psi(r, \varphi, \theta) = f(r) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} g(\theta); \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.70)$$

Konstantu c jsme zvolili tak, aby nalezené řešení bylo normováno k jedné. Jako další krok dosadíme toto řešení do druhé rovnice (2.68) a budeme ji řešit

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] e^{im\varphi} g(\theta) = \lambda_l e^{im\varphi} g(\theta) \Rightarrow$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{dg}{d\theta} \right) + \left(\frac{m^2}{\sin^2\theta} + \frac{\lambda_l}{\hbar^2} \right) g = 0.$$

Výsledkem je obyčejná diferenciální rovnice pro funkci $g(\theta)$, která se řeší standardními matematickými postupy přesahujícími rámec tohoto sylabu. Výsledkem jsou polynomiální funkce v $\cos\theta$ a $\sin\theta$, které se nazývají přidružené Legendreovy polynomy $P_{lm}(\cos\theta)$ a jsou definované vztahem

$$P_{lm}(x) \equiv \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l; \quad l = 0, 1, 2, \dots; \quad |m| \leq l; \quad m = 0, \pm 1, \dots \quad (2.71)$$

Pro $m = 0$ se tyto polynomy nazývají Legendreovy polynomy. Příslušné vlastní číslo je

$$\lambda_l = l(l+1)\hbar^2 \quad (2.72)$$

Celá úhlová část řešení se nazývá kulová funkce a označuje se

$$Y_{lm}(\varphi, \theta) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} P_{lm}(\cos\theta) \quad (2.73).$$

Celkové řešení druhých dvou rovnic soustavy (2.67) tedy je

$$\psi(r, \varphi, \theta) = f(r) Y_{lm}(\varphi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} f(r) e^{im\varphi} P_{lm}(\cos\theta);$$

$$\lambda_l = l(l+1)\hbar^2; \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$$\mu_m = m\hbar; \quad m = 0, \pm 1, \dots; \quad |m| \leq l \quad (2.74).$$

Odvozené kvantování momentu hybnosti je až na absenci poločíselných hodnot shodné se vztahy odvozenými jinou cestou v předchozí kapitole. Pro radiální funkci $f(r)$ lze řešení získat z první rovnice (2.67). Toto řešení závisí na tvaru potenciální energie. Pro některé základní

tvary potenciální energie bude řešení diskutováno v příští kapitole. Na závěr uveďme příklady některých kulových funkcí:

$$Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}; \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta; \quad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta; \quad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin \theta;$$

$$Y_{20} = -\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta); \quad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\varphi} \cos \theta \sin \theta; \quad \dots$$

2.5.3. Jednoduché systémy: oscilátor, vodík, jáma

Nyní zbývá řešit první z rovnic (2.67) – rovnici pro energii. Tato rovnice nám poskytne energetické spektrum a radiální část celého řešení $\psi(r, \varphi, \theta)$. Jak energetické spektrum, tak radiální část mohou záviset na kvantových číslech l a m z předchozího řešení a budou závislé na konkrétním tvaru potenciální energie $V(r)$.

V poslední rovnici (2.67) známe působení rotační části kinetické energie Hamiltonova operátoru na celkovou vlnovou funkci. To je dáno působením kvadrátu momentu hybnosti podle druhé z rovnic (2.67). Známe již i vlastní číslo λ_l podle vztahu (2.72). Po zapůsobení rotační části zkrátíme úhlové části $g(\varphi)$ a $h(\theta)$ na obou stranách rovnice a získáme rovnici pro radiální část řešení:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] f_{vl}(r) = E f_{vl}(r). \quad (2.75)$$

Povšimněte si, že v rovnici vystupuje vedlejší kvantové číslo l a energetické spektrum proto nezávisí jen na radiálním čísle ν , které čísluje energii, ale i na vedlejším kvantovém čísle l . Řešení rovnice (2.75) se provádí standardními metodami (rozvoj do řady, hledání asymptotického chování, oříznutí nekonečné řady). Uvedeme výsledky výpočtů pro potenciální energii sférického harmonického oscilátoru, prostorové jámy a Coulombův potenciál (2.59).

Harmonický oscilátor

Pro potenciální energii harmonického oscilátoru vychází energetické spektrum

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \Rightarrow E_{vl} = (2\nu + l + 3/2) \hbar \omega = (n + 3/2) \hbar \omega. \quad (2.76)$$

Nejmenší možná hodnota energie (nulové kmity) je $3/2 \hbar \omega$. Radiální kvantové číslo ν čísluje pořadí radiálních stavů a zpravidla také počet průsečíků radiálního řešení s osou x . Většinou se zavádí tzv. hlavní kvantové číslo n , které skutečně čísluje stavy energie:

$$n \equiv 2\nu + l; \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, \dots, n. \quad (2.77)$$

Spektrum oscilátoru je degenerované (ke každé hodnotě energie přísluší více stavů, každé n lze složit z více kombinací ν a l). Snadno určíme stupeň degenerace, uvědomíme-li si, že ke každému vedlejšímu kvantovému číslu existuje $2l + 1$ hodnot magnetických čísel m :

$$\#_n = \sum_l 2l + 1 = \sum_{\nu=0}^{n/2} 2(n - 2\nu) + 1 = \sum_{\nu=0}^{n/2} 2n - 4\nu + 1 = \frac{(n+1)(n+2)}{2}. \quad (2.78)$$

Řadu (2.78) jsme sečetli jako aritmetickou řadu. Každá energetická slupka n obsahuje $(n+1)(n+2)/2$ stavů.

Coulombický potenciál

Pro Coulombický potenciál vychází energetické spektrum

$$V(r) = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{\alpha}{r} \quad \Rightarrow \quad E_{\nu l} = -\frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2 (\nu + l + 1)^2} = -\frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2 n^2} . \quad (2.79)$$

Hlavní kvantové číslo n číslující stavy energie jsme zavedli vztahem

$$n \equiv \nu + l + 1 \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad , \quad l = 0, 1 \dots n - 1 . \quad (2.80)$$

Stupeň degenerace bude

$$\#_n = \sum_l 2l + 1 = \sum_{\nu=0}^{n/2} 2(n - \nu - 1) + 1 = \sum_{\nu=0}^{n-1} 2n - 2\nu - 1 = n^2 . \quad (2.81)$$

Jde-li o atom vodíku, může mít každý elektron ještě dva spinové stupně volnosti $m_s = \pm 1/2$ a celkový počet stavů v jedné energetické slupce je proto $2n^2$. Tyto stavy se liší hodnotou kvantových čísel l, m, m_s .

Kvantová jáma

Sférická konečná kvantová jáma s potenciálem

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ V_0 & r \geq a \end{cases} \quad (2.82)$$

nemá analytické řešení. Problém lze řešit jen numericky nebo graficky.

2.6. ČASOVÝ VÝVOJ

Prozatím jsme se v kvantové teorii zabývali stacionárními stavy, tj. stavy systému, které se v čase nevyvíjí. Skutečné kvantové stavy jsou lineárními kombinacemi stacionárních stavů (prvků báze) a koeficienty těchto kombinací se mění s časem. Přejít stavu z jednoho času do času pozdějšího provádí tzv. *evoluční operátor* (operátor časového vývoje).

2.6.1. Evoluční operátor

Evoluční operátor převádí známý stav čase t_0 na stav, do kterého se vyvine v čase t :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (2.83)$$

Evoluční operátor musí splňovat některé podmínky a požadavky:

1) počáteční podmínka: vývoj z počátečního času do počátečního času nemění stav

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

2) semigrupová podmínka: vývoj ze stavu t_1 do t_2 dopadne stejně, je-li proveden náraz nebo přes mezikas t :

$$\begin{aligned} t_1 \rightarrow t_2 & \Leftrightarrow t_1 \rightarrow t \rightarrow t_2 \\ |\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1) |\psi(t_1)\rangle & \Leftrightarrow |\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t) \hat{U}(t, t_1) |\psi(t_1)\rangle \end{aligned}$$

Porovnáním obou postupů získáme *semigrupovou podmínku*

$$\hat{U}(t_2, t) \hat{U}(t, t_1) = \hat{U}(t_2, t_1).$$

3) unitarita: časový vývoj nemění normování stavu:

$$\begin{aligned} \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle &= \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle, \\ \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle &= \langle \psi_0 | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi_0 \rangle \\ \hat{U}^\dagger \hat{U} &= \hat{1}. \end{aligned}$$

4) inverze: inverzní evoluční operátor má obrácené pořadí argumentů. Odvodíme ze semigrupové podmínky:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t) &= \hat{U}(t, t_0) \hat{U}(t_0, t) = \hat{1} \Rightarrow \\ \hat{U}^{-1}(t_0, t) &= \hat{U}(t, t_0). \end{aligned}$$

5) spojitost: samovolný vývoj stavu (bez aktu měření), který popisuje evoluční operátor musí být spojitý:

$$\langle \phi | \hat{U}(t_0, t) | \psi(t_0) \rangle \text{ je spojitý pro } \forall t_0 \text{ a } \forall |\phi\rangle.$$

Nyní odvodíme základní rovnici pro evoluční operátor. Vyjdeme z definice střední hodnoty dynamické proměnné (viz tabulka v kapitole 2.3.2) a tuto střední hodnotu budeme derivovat podle času:

$$\frac{d\bar{a}}{dt} = \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi_0 | \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \frac{d\hat{U}^\dagger}{dt} \hat{A} \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A} \frac{d\hat{U}}{dt} | \psi_0 \rangle.$$

Jinou možností je přímo zavést operátor časové derivace dynamické proměnné vztahem

$$\frac{d\bar{a}}{dt} \equiv \langle \psi | \dot{\hat{A}} | \psi \rangle = \langle \psi_0 | \hat{U}^\dagger \dot{\hat{A}} \hat{U} | \psi_0 \rangle.$$

Porovnáním obou postupů získáme rovnici

$$\frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^+\hat{\mathbf{A}}\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} = \hat{\mathbf{U}}^+\dot{\hat{\mathbf{A}}}\hat{\mathbf{U}}, \quad (*)$$

ve které za časovou derivaci operátoru dynamické proměnné dosadíme časový vývoj dynamické proměnné zapsaný v Poissonových závorkách (1.53) převedený do kvantové podoby pomocí principu korespondence (2.28):

$$\dot{A} = \{A, H\} \quad \Rightarrow \quad \dot{\hat{\mathbf{A}}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}].$$

Získáme tak rovnici, ze které se budeme snažit získat rovnici pro evoluční operátor:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^+\hat{\mathbf{A}}\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} &= \hat{\mathbf{U}}^+\frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}]\hat{\mathbf{U}} \Rightarrow \\ \frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^+\hat{\mathbf{A}}\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}(\hat{\mathbf{U}}^+\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{U}} - \hat{\mathbf{U}}^+\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}}) \end{aligned} \quad (**)$$

Ve všech následujících úpravách využíváme unitaritu $\mathbf{U}\mathbf{U}^+ = \mathbf{U}^+\mathbf{U} = \mathbf{1}$. Z rovnice (**) je třeba vyloučit operátor $\mathbf{U}^+$ a jeho derivaci podle času, kterou získáme derivováním definice unitarity podle času a násobením výsledku operátorem $\mathbf{U}^+$ zprava:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{U}}^+\hat{\mathbf{U}} = \hat{\mathbf{1}} \Rightarrow \frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^+\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} &= 0 \Rightarrow \frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt} + \hat{\mathbf{U}}^+\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt}\hat{\mathbf{U}}^+ = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt} &= -\hat{\mathbf{U}}^+\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt}\hat{\mathbf{U}}^+. \end{aligned}$$

Výsledek dosadíme do rovnice (**) a vynásobíme ji operátorem $\mathbf{U}$ zleva a $\mathbf{U}^+$ zprava:

$$\begin{aligned} -\hat{\mathbf{U}}^+\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt}\hat{\mathbf{U}}^+\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^+\hat{\mathbf{A}}\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}(\hat{\mathbf{U}}^+\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{U}} - \hat{\mathbf{U}}^+\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}}) \Rightarrow \\ -\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt}\hat{\mathbf{U}}^+\hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}}\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt}\hat{\mathbf{U}}^+ &= \frac{1}{i\hbar}(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{H}} - \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{A}}) \Rightarrow \\ \left[\hat{\mathbf{A}}, \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt}\hat{\mathbf{U}}^+\right] &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}] \Rightarrow \\ \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt}\hat{\mathbf{U}}^+ &= \frac{1}{i\hbar}\hat{\mathbf{H}} \Rightarrow \\ \boxed{i\hbar\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} = \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{U}}} &. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Právě odvozená rovnice se nazývá *rovnice časového vývoje*. Zapůsobíme-li touto operátorovou rovnicí na počáteční stav $|\psi_0\rangle$, provede evoluční operátor vývoj stavu do času t a získaná rovnice pro $|\psi(t)\rangle$ se nazývá *časová Schrödingerova rovnice*:

$$\boxed{i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{\mathbf{H}}|\psi(t)\rangle}. \quad (2.85)$$

2.6.2. Časová Schrödingerova rovnice

Řešení časového vývoje lze najít relativně snadno, není-li Hamiltonův operátor explicitní funkcí času, tj. závisí jen na operátorech zobecněných souřadnic a hybností. V takovém případě je výhodné volit v Hilbertově prostoru popisovaného systému bázi generovanou vlastními vektory Hamiltonova operátoru (2.35):

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad ; \quad \langle m | n \rangle = \delta_{nm} \quad ; \quad \sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}.$$

Do těchto vektorů rozvineme hledaný stav, koeficienty rozvoje budou funkcemi času:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle.$$

Řešení v tomto tvaru dosadíme do časové Schrödingerovy rovnice získáme lineární rovnici pro koeficienty $a_n(t)$.

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \frac{d a_n}{dt} |n\rangle &= \hat{H} \sum_n a_n(t) |n\rangle ; \\ i\hbar \sum_n \frac{d a_n}{dt} |n\rangle &= \sum_n a_n(t) E_n |n\rangle ; \quad / \langle m | \text{ zleva} \\ i\hbar \frac{d a_m}{dt} &= a_m(t) E_m ; \\ a_m(t) &= c_m e^{-\frac{i}{\hbar} E_m (t-t_0)}. \end{aligned}$$

Řešení časového vývoje tedy je:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} |n\rangle. \quad (2.86)$$

Poněkud elegantnější řešení je nalézt přímo evoluční operátor jako superpozici projektorů generovaných Hamiltonovým operátorem pomocí věty o spektrálním rozvoji. Řešení rovnice pro evoluční operátor lze formálně zapsat jako

$$i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}\hat{U} \Rightarrow \hat{U}(t_0, t) = e^{\frac{1}{i\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \Rightarrow \hat{U}(t_0, t) = \sum_n e^{\frac{1}{i\hbar} E_n (t-t_0)} |n\rangle \langle n|.$$

Nyní zapůsobíme nalezeným evolučním operátorem na počáteční stav $|\psi_0\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{\frac{1}{i\hbar} E_n (t-t_0)} |n\rangle \langle n | \psi_0 \rangle$$

a získáme tak okamžité řešení časové Schrödingerovy rovnice:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_n c_n e^{\frac{1}{i\hbar} E_n (t-t_0)} |n\rangle ; \\ |\psi_0\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle ; \\ c_n &\equiv \langle n | \psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.86')$$

Příklad:

Nalezněte vývoj pravděpodobnosti systému, jehož počáteční stav je zadán jako reálná lineární kombinace dvou reálných vlastních funkcí Hamiltonova operátoru. Například může jít o harmonický oscilátor nebo kvantovou jámu.

Řešení: Počáteční stav je kombinací dvou vlastních stavů n a m Hamiltoniánu (přes n , m se nesčítá)

$$\psi_0(x) = c_m \psi_m(x) + c_n \psi_n(x) ,$$

časový vývoj je

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

a výsledná hustota pravděpodobnosti pro reálné vlastní funkce vychází

$$w(t, x) \equiv \psi^2 = (c_m \psi_m)^2 + (c_n \psi_n)^2 + c_n c_m \psi_n \psi_m \left[e^{\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) t} + e^{-\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) t} \right] .$$

Celková pravděpodobnost je součtem pravděpodobnosti, že se systém nachází ve stavu m , ve stavu n a interferenčního členu, který je pro kvantové procesy typický. Výsledek lze jednoduše zapsat takto:

$$w(t, x) = w_1(x) + w_2(x) + f(x) \cos(\omega t) ; \quad \omega \equiv \frac{E_m - E_n}{\hbar} .$$

Frekvence časových oscilací pravděpodobnosti odpovídá Planckovu kvantování $\Delta E = \hbar \omega$.

2.6.3. Ehrenfestovy teoremy, viriálový teorém

V této kapitole si probereme tři základní teoremy týkající se časového vývoje.

1. Ehrenfestův teorém

První Ehrenfestův teorém se týká časového vývoje operátoru souřadnice. Pro jednoduchost ho odvodíme v jednorozměrném případě, vyjdeme z principu korespondence a časového vývoje (1.53) ve tvaru Poissonových závorek:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\mathbf{X}}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{H}}] = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{\mathbf{X}}, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}) \right] = \frac{1}{2mi\hbar} [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}^2] + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{X}}, V(\hat{\mathbf{X}})] = \\ &= \frac{1}{2mi\hbar} \left(\hat{\mathbf{P}} [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] + [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] \hat{\mathbf{P}} \right) = \frac{1}{2mi\hbar} (i\hbar \hat{\mathbf{P}} + i\hbar \hat{\mathbf{P}}) = \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} . \end{aligned}$$

Získali jsme tak výsledek, který je analogický definici hybnosti z klasické mechaniky a je znám pod názvem *první Ehrenfestův teorém*:

$$\frac{d\hat{\mathbf{X}}}{dt} = \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} . \quad (2.87)$$

2. Ehrenfestův teorém

Druhý Ehrenfestův teorém se týká časového vývoje operátoru hybnosti. Budeme postupovat podobně jako v předchozím případě:

$$\frac{d\hat{\mathbf{P}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}] = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{\mathbf{P}}, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}) \right] = \frac{1}{2mi\hbar} [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}^2] + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{P}}, V(\hat{\mathbf{X}})] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{P}}, V(\hat{\mathbf{X}})] .$$

Hodnotu posledního komutátoru určíme takto: Nejprve nalezneme komutátor operátoru hybnosti s libovolnou mocninou operátoru souřadnice (indukcí) a výsledek budeme člen po členu aplikovat na operátor potenciálu rozvinutý do mocninného Taylorova rozvoje:

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}] &= -[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] = -i\hbar \hat{\mathbf{1}}, \\
[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^2] &= \hat{\mathbf{X}}[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}] + [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}]\hat{\mathbf{X}} = -i\hbar 2\hat{\mathbf{X}} \\
&\vdots \\
[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^n] &= -i\hbar n\hat{\mathbf{X}}^{n-1}, \\
[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^{n+1}] &= \hat{\mathbf{X}}[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^n] + [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^n]\hat{\mathbf{X}} = -i\hbar (n+1)\hat{\mathbf{X}}^{n+1}, \\
[\hat{\mathbf{P}}, V(\hat{\mathbf{X}})] &= -i\hbar \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}}.
\end{aligned}$$

Základním předpokladem těchto úvah je samozřejmě rozvinutelnost potenciální energie do Taylorovy řady. Po dosazení za vypočtený komutátor druhý Ehrenfestův teorém vychází:

$$\frac{d\hat{\mathbf{P}}}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}}, \quad (2.88)$$

což je vlastně kvantovou analogií Newtonových pohybových rovnic (záporně vzatý gradient potenciální energie je působící silou).

Viriálový teorém

Viriálový teorém je velmi užitečný nejen v kvantové teorii, ale i ve statistické fyzice. Určuje střední hodnotu kinetické energie obsažené v systému z tvaru energie potenciální. Určeme nejprve maticové elementy komutátoru dynamické proměnné A s Hamiltonovým operátorem v energetické reprezentaci:

$$\langle n | [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}] | m \rangle = \langle n | \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{H}} - \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{A}} | m \rangle = (E_m - E_n) \langle n | \hat{\mathbf{A}} | m \rangle = (E_m - E_n) A_{nm}.$$

Pro $n = m$ máme

$$\langle n | [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}] | n \rangle = 0.$$

Za operátor dynamické proměnné A budeme nyní volit součin souřadnice a hybnosti:

$$\begin{aligned}
\langle n | [\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}] | n \rangle &= 0, \\
\langle n | [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{H}}]\hat{\mathbf{P}} | n \rangle + \langle n | \hat{\mathbf{X}}[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}] | n \rangle &= 0, \\
\langle n | \frac{d\hat{\mathbf{X}}}{dt} \hat{\mathbf{P}} | n \rangle + \langle n | \hat{\mathbf{X}} \frac{d\hat{\mathbf{P}}}{dt} | n \rangle &= 0.
\end{aligned}$$

Za časový vývoj souřadnice a hybnosti dosadíme z Ehrenfestových teorémů:

$$\langle n | \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} | n \rangle = \langle n | \frac{1}{2} \hat{\mathbf{X}} \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}} | n \rangle.$$

Ve třech dimenzích je výsledek součtem příspěvků v jednotlivých osách. Na levé straně stojí střední hodnota kinetické energie systému, napravo tzv. operátor viriálu:

$$\langle n | \hat{\mathbf{T}} | n \rangle = \langle n | \frac{1}{2} \hat{\mathbf{X}}_k \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}_k} | n \rangle. \quad (2.89)$$

Pro jednorozměrný harmonický oscilátor je operátor viriálu přímo roven potenciální energii:

$$V(\hat{\mathbf{X}}) = \frac{1}{2} k \hat{\mathbf{X}}^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{2} \hat{\mathbf{X}} \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}} = \frac{1}{2} k \hat{\mathbf{X}}^2.$$

Střední hodnoty kinetické a potenciální energie jsou si proto v každém stavu rovny.

2.7. RELATIVISTICKÁ KVANTOVÁ TEORIE, SPIN

2.7.1. Prostorová rotace a Lorentzova transformace

Prostorová rotace

Pootočíme-li souřadnicovým systémem kolem osy z o úhel φ , lze transformaci zapsat jako

$$\begin{aligned}t' &= t, \\x' &= x \cos \varphi - y \sin \varphi, \\y' &= x \sin \varphi + y \cos \varphi, \\z' &= z.\end{aligned}$$

Časovou souřadnici budeme dávat na nultou pozici, při prostorové rotaci se čas nemění. Celou transformaci popíšeme pomocí rotační matice $\mathbf{R}_z$. Podobně můžeme popsat rotace kolem ostatních souřadnicových os (stačí cyklicky zaměnit $x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$):

$$\mathbf{R}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi \\ 0 & 0 & \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\sin \varphi & 0 & \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ 0 & \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Rotace patří mezi unitární transformace. Připomeňme si, že unitární operátory zachovávají skalární součin, proto platí

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{1} \Rightarrow \det \mathbf{U} \det \mathbf{U}^\dagger = 1 \Rightarrow |\det \mathbf{U}| = 1.$$

Pro reálné matice může být determinant všech unitárních transformací roven buď $+1$ (*rotace*) nebo -1 (*zrcadlení*). Snadno se přesvědčíme, že determinant všech tří rotačních matic je roven jedné. S rotační symetrií se pojí zachování veličiny, kterou nazýváme **moment hybnosti**. Tato veličina je danou symetrií definována (viz teorém Noetherové, kap. 1.3.1).

Lorentzova transformace

Velmi příbuznou transformací k rotacím je Lorentzova transformace popisující přechod mezi dvěma vzájemně se rovnoměrně pohybujícími inerciálními souřadnicovými systémy, předpokládáme, že v ose x :

$$\begin{aligned}t' &= \frac{t - vx/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \\x' &= \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \\y' &= y, \\z' &= z.\end{aligned}$$

Tuto známou transformaci lze zapsat podstatně elegantněji v maticové podobě. Zavedeme-li relativistické proměnné $x_0 \equiv ct$, $x_1 \equiv x$; $x_2 \equiv y$; $x_3 \equiv z$ a relativistické koeficienty

$$\beta \equiv v/c; \quad \gamma \equiv 1/\sqrt{1 - \beta^2},$$

budou matice Lorentzovy transformace (v ostatních osách matice získáme cyklickou záměnou) mít tvar

$$\Lambda_x = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_y = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & -\gamma\beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_z = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}.$$

Determinant transformačních matic je roven

$$\det \Lambda = \gamma^2 - \gamma^2 \beta^2 = \gamma^2 (1 - \beta^2) = 1$$

a jde tedy opět o rotace, tentokrát v rovině dané časovou a jednou prostorovou osou. Charakter rotací lépe vynikne, zapíšeme-li Lorentzovy matice pomocí rapidity $u \equiv \text{arcth}(v/c)$:

$$\Lambda_x = \begin{pmatrix} \text{ch } u & \text{sh } u & 0 & 0 \\ \text{sh } u & \text{ch } u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_y = \begin{pmatrix} \text{ch } u & 0 & \text{sh } u & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \text{sh } u & 0 & \text{ch } u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_z = \begin{pmatrix} \text{ch } u & 0 & 0 & \text{sh } u \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \text{sh } u & 0 & 0 & \text{ch } u \end{pmatrix}.$$

S Lorentzovou symetrií (experiment dopadne stejně ve dvou inerciálních soustavách, které se navzájem pohybují rovnoměrně přímočaře) se pojí existence nové zachovávaní se veličiny, která se nazývá **spin**.

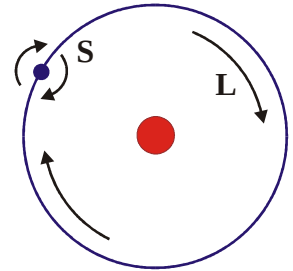
2.7.2. Spin

V minulé kapitole jsme viděli, že podobnou úlohu, jakou má prostorová rotace má i Lorentzova transformace. Jde také o rotaci, ale v rovině dané časovou a jednou prostorovou souřadnicí o imaginární úhel nazývaný rapidita. Rotační symetrie odpovídá symetrii systému vzhledem k pootočení, Lorentzova symetrie odpovídá stejnému chování systému v různých, navzájem se rovnoměrně pohybujících, inerciálních souřadnicových systémech. S oběma symetriemi se pojí odpovídající zákony zachování:

rotační symetrie	→	moment hybnosti L
Lorentzova symetrie	→	spin S

Spin má velmi podobné vlastnosti jako moment hybnosti, lze si ho však jen velmi těžko představit. Značně nepřesné, ale přesto ilustrativní, je představit si částici obíhající kolem centra a současně rotující kolem vlastní osy. V této klasické představě odpovídá momentu hybnosti orbitální rotace a spinu vlastní rotace. Skutečné částice ani neobíhají kolem centra, ani nerotují kolem vlastní osy. Jejich celkový rotační stav je dán dvěma veličinami – momentem hybnosti (orbitálním momentem) a spinem (vnitřním momentem). Obě veličiny se mohou skládat, potom hovoříme o spinorbitální interakci, neboli *LS* interakci či *LS* vazbě. Operátor spinu má stejné komutační relace jako moment hybnosti (2.30, 2.32)

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2] &= i\hbar \hat{\mathbf{S}}_3 + \text{cyklické záměny}, \\ [\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{S}}_3] &= 0. \end{aligned} \quad (2.90)$$



Stejně tak jako u momentu hybnosti zavádíme dvě kvantová čísla popisující spin: spinové číslo neboli spin s určující velikost a magnetické spinové číslo m_s určující projekci spinu do třetí osy. Pro spin lze pomocí posuvných operátorů odvodit stejně jako pro moment hybnosti vztah (2.66)

$$|S| = \sqrt{s(s+1)} \hbar, \quad s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots; \quad (2.91)$$

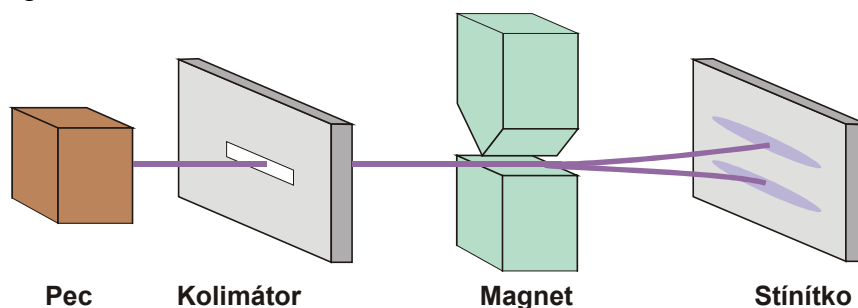
$$S_z = m_s \hbar, \quad m_s = -s, -s+1, \dots, s.$$

Tentokrát se ale realizují i poločíselné hodnoty, které jsme pro komutační strukturu (2.90) resp. (2.30) odvodili dříve. Hodnota spinu s je pro elementární částice neměnnou charakteristikou, stejně tak jako hodnota elektrického náboje Q nebo klidové hmotnosti m_0 .

Spin některých částic	
leptony (elektron, tauon, mion, neutrina)	1/2
kvarky (d, u, s, c, b, t)	1/2
skalární mezony (π , kaony)	0
vektorové mezony (ρ , kaony)	1
hadrony (neutron, proton, Λ hyperon)	1/2
hadrony (Δ , Ω)	3/2
intermediální bosony (γ , $W^\pm$, Z^0 , gluony)	1
gravitony	2

Přítomnost spinu zvyšuje stupeň degenerace energetických stavů. Například elektron v atomárním obalu, který má energetický stav určený hlavním kvantovým číslem, již nemá stupeň degenerace n^2 , ale $2n^2$. Elektron má totiž spin $1/2$ a jeho stavy jsou určeny čtveřicí čísel n, l, m, m_s . Projekce spinu m_s může nabývat dvou hodnot $\pm 1/2$ a počet stavů se zdvojnásobuje.

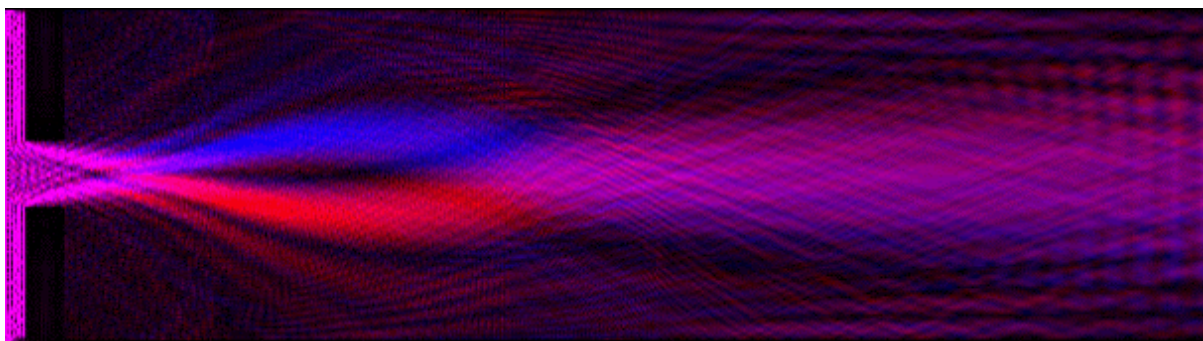
Částice s nenulovým spinem vykazují magnetický moment, aniž by měly orbitální moment hybnosti. Magnetické vlastnosti částic proto nemusí souviset jen se skutečným rotačním pohybem částic, ale i s „vlastním momentem“ – spinem. V přítomnosti nehomogenního magnetického pole reagují částice na toto pole. Stavy, které původně odpovídaly jediné energii se štěpí na multiplety blízkých energetických podhladin. Stupeň degenerace se snižuje, stavy s různým m a m_s mají různou energii. Hovoříme o tzv. sejmutí degenerace v přítomnosti magnetického pole.



Spin byl poprvé pozorován ve Stern Gerlachově experimentu (1925). Atomy stříbra odpařující se z píčky byly kolimovány do svazku procházejícího nehomogenním magnetickým polem. Na tyto elementární magnetické momenty v nehomogenním poli působí síla (1.124) $\mathbf{F} = -\mu \nabla B$. Magnetický moment jednotlivých stavů je různý a proto je různá i výsledná působící síla a energie daného stavu. Kdyby neexistoval spin, nebude se stav $l = 0$ štěpit vůbec ($m = 0$), stav $l = 1$ se bude štěpit na tři různé podstavy ($m = 0, \pm 1$) a na stínítku se

vytvoří jedna nebo tři stříbrné skvrny (i ve vyšších stavech l půjde vždy o lichý počet skvrn). Na stínítku však byly pozorovány dvě stříbrné skvrny, což svědčí o elektronu s orbitálním stavem $l = 0$ a spinovým stavem $s = 1/2$ (magnetické vlastnosti jsou určeny *dvěma* projekcemi $m_s = \pm 1/2$). Sudý počet projekcí znamená poločíselné řešení komutačních relací (2.90) respektive (2.30). Hypotézu o existenci vlastního momentu elektronu, který má podobné vlastnosti jako orbitální moment, podali ještě před teoretickým objasněním spinu Uhlenbeck a Goudsmit v roce 1925.

Na následujícím obrázku je numerická simulace (Yamanashi University) Stern Gerlachova experimentu. Stavy s projekcí $m_s = +1/2$ jsou označeny modře, stavy $m_s = -1/2$ červeně. V malé vzdálenosti se na stínítku objeví dvě výrazné stříbrné skvrny, ve větší vzdálenosti nejsou pravděpodobnosti dopadu atomů v jednotlivých stavech výrazně prostorově oddělené.



2.7.3. Klein-Gordonova a Diracova Rovnice

Schrödingerova rovnice není relativistická a proto nemůže správně popsat spin. Při jejím odvození jsme používali nerelativistický tvar Hamiltonovy funkce. Výsledkem byla Schrödingerova časová rovnice (2.85), která má v x reprezentaci tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi = 0 .$$

V rovnici se nachází první časová derivace a druhé prostorové derivace, čas a prostor není rovnoprávný, rovnice zjevně není relativistická. Relativistickou konstrukci lze vytvořit jak ve druhých (Klein-Gordonova rovnice), tak v prvních (Diracova rovnice) derivacích. Obě konstrukce mají své místo, rovnice Klein-Gordonova správně popisuje chování částic se spinem 0 a rovnice Diracova chování částic se spinem 1/2.

Klein-Gordonova rovnice

Při odvození Schrödingerovy rovnice v x reprezentaci jsme hybnosti přiřadili operátor

$$\mathbf{P} \rightarrow -i\hbar \nabla .$$

Toto přiřazení je nyní nutné zobecnit na časoprostor. Hybnost souvisí se symetrií vzhledem k posunutí v prostoru, s posunutím v čase souvisí veličina nazývaná energie. Relativistické přiřazení by tedy mělo být:

$$E \rightarrow +i\hbar \partial / \partial t ,$$

$$\mathbf{P} \rightarrow -i\hbar \partial / \partial \mathbf{x} .$$

Odlišné znaménko u časové proměnné souvisí s relativistickými transformačními vlastnostmi čtyřvektorů a je pro naše odvození nepodstatné (je dáno tím, že čas a prostor se v derivacích vyskytují v jmenovateli). Nyní převedeme do operátorové podoby relativistický vztah pro energii

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \rightarrow \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \hbar^2 c^2 \Delta - m^2 c^4 \right) \psi = 0 .$$

Jednoduchou úpravou získáme Klein-Gordonovu rovnici pro volnou částici

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi = 0. \quad (2.92)$$

Klein-Gordonova rovnice je správnou relativistickou rovnicí pro volnou částici se spinem nula. Jde o vlnovou rovnici s konstantním členem, která limitně přechází v nerelativistickou Schrödingerovu rovnici.

Diracova rovnice

Relativistickou konstrukci rovnice pro volnou částici, která limitně přechází na Schrödingerovu rovnici, lze také provést v prvních derivacích. Tuto úlohu řešil P. A. M. Dirac, který hledal správné koeficienty u prvních derivací:

$$\left(c_0 \frac{\partial}{\partial t} + c_1 \frac{\partial}{\partial x} + c_2 \frac{\partial}{\partial y} + c_3 \frac{\partial}{\partial z} + d\right) \psi = 0.$$

Z transformačních požadavků Dirac odvodil, že různé koeficienty c_k musí navzájem antikomutovat. Tuto vlastnost nelze splnit, pokud jsou koeficienty obyčejná čísla. Je to ale možné, jde-li o 4 nezávislé antikomutující matice. Čtveřici nezávislých antikomutujících matic lze nalézt až pro matice 4×4 a větší. U matic 4×4 existuje 16 nezávislých matic, ze kterých lze vybrat čtyři antikomutující. Dirac tak odvodil rovnici

$$(i \hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi = 0, \quad (2.93)$$

ve které jsou koeficienty derivací tzv. Diracovy matice

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\partial_\mu = \begin{pmatrix} \partial/\partial t \\ \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix}; \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Diracova rovnice popisuje chování částic se spinem $1/2$ (například elektron). Čtveřice ψ se nazývá *bispinor*. Má speciální transformační vlastnosti. Horní dvě komponenty bispinoru popisují stavy *částice* s projekcí spinu $+1/2$ a $-1/2$ a mají kladnou energii. Dolní dvě komponenty mají zápornou energii a Dirac je interpretoval jako stavy *antičástice* s projekcí spinu $+1/2$ a $-1/2$. Diracova rovnice je v jistém smyslu "odmocněním" Klein-Gordonovy rovnice postavené na vztahu $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$. Proto stavy se zápornou energií nejsou překvapením. Elegantní však bylo Diracovo vysvětlení: Všechny záporné stavy jsou zaplněny (Diracovo moře elektronů se zápornou energií). Nezaplněný stav se chová jako "díra", kterou Dirac interpretoval jako antičástici. Rozborem tvaru rovnice a jejích řešení teoreticky Dirac předpověděl existenci pozitronu ještě před jeho experimentálním objevem.

Spin se tak stal automatickou součástí relativistických rovnic kvantové teorie. Rovnice Klein-Gordonova řeší problémy skalárních polí a skalárních částic, rovnice Diracova problémy elektronu, neutrin a kvarků. Právě na ní je postavena dnešní kvantová elektrodynamika.

2.8. SOUSTAVA STEJNÝCH ČÁSTIC

Stejnými částicemi nazýváme dvě částice se shodnými parametry (hmotou, nábojem, spinem, ...). Z hlediska teoretické mechaniky je trajektorie těchto částic dána Hamiltonovými rovnicemi a známe-li počáteční polohy a rychlosti částic, lze přesně predikovat budoucí polohy částic a v každém okamžiku říci která je která.

V kvantové teorii můžeme předpovědět jen pravděpodobnost výskytu částice v nějakém místě a čase. Tato pravděpodobnost má maximum v místě klasické trajektorie a se vzdáleností od ní zpravidla exponenciálně ubývá a dosti daleko od klasické trajektorie je sice velmi malá, nikoli však nulová. Máme-li dvě stejné částice, nikdy si nemůžeme být jisti, která částice je která. Pravděpodobnost výskytu jedné částice v místě druhé je nenulová. Hovoříme o tom, že stejné částice jsou v kvantové teorii *nerozlišitelné*. Hamiltonův operátor se při záměně dvou stejných částic nezmění:

$$\hat{H}_{12} = \hat{H}_{21}. \quad (2.94)$$

2.8.1. Operátor výměny dvou částic

Pro jednoduchost budeme uvažovat jen dvě částice, u kterých sledujeme dynamickou proměnnou A (nejlépe celou úplnou množinu pozorovatelných). Stav, ve kterém má první částice hodnotu a_1 a druhá částice hodnotu a_2 označíme

$$|\psi\rangle = |a_1, a_2\rangle.$$

Opačnou situaci, kdy první částice má hodnotu a_2 a druhá a_1 , označíme

$$|\varphi\rangle = |a_2, a_1\rangle.$$

Díky nerozlišitelnosti identických částic v kvantové mechanice musí být oba stavy závislé (vyjadřují ve skutečnosti jeden a tentýž kvantový stav), proto

$$|a_2, a_1\rangle = \beta |a_1, a_2\rangle. \quad (2.95)$$

Zavedme nyní operátor vzájemné výměny částic vztahem

$$\hat{P}_{12} |a_2, a_1\rangle \equiv |a_1, a_2\rangle \quad (2.96)$$

a prozkoumejme jeho vlastnosti:

$$\begin{aligned} (1) \quad & \hat{P}^2 = \hat{1}, \\ (2) \quad & \lambda_{1,2} = \pm 1, \\ (3) \quad & [\hat{P}, \hat{H}] = 0. \end{aligned} \quad (2.97)$$

Důkaz (1): Dvojnásobná záměna částic vede na původní konfiguraci.

Důkaz (2): Vlastními vektory jsou vektory $|\psi\rangle$ a $|\varphi\rangle$ definované výše:

$$\hat{P}_{12} |a_1, a_2\rangle \equiv |a_2, a_1\rangle = \beta |a_1, a_2\rangle. \quad (2.98)$$

Číslo β je vlastním číslem operátoru výměny. Provedme nyní dvojnásobnou výměnu jednak pomocí vztahu (2.97.1) a jednak podle (2.98):

$$P^2 |a_1, a_2\rangle = \begin{cases} |a_1, a_2\rangle \\ \beta^2 |a_1, a_2\rangle \end{cases} \Rightarrow \beta^2 = 1 \Rightarrow \beta = \pm 1.$$

Hodnota vlastních čísel operátoru výměny je zřejmá již ze vztahu (2.97.1). Jde o unitární a hermitovský operátor. Vlastní čísla musí ležet na jednotkové kružnici v komplexní rovině a současně být reálná. Jediné takové hodnoty jsou ± 1 .

Důkaz (3): V důkazu využijeme časovou Schrödingerovu rovnici (2.85):

$$\begin{aligned}\hat{H}_{12} \hat{P}_{12} |a_1, a_2\rangle &= \hat{H}_{12} |a_2, a_1\rangle = \hat{H}_{21} |a_2, a_1\rangle = \frac{1}{i\hbar} \frac{d}{dt} |a_2, a_1\rangle = \frac{1}{i\hbar} \hat{P}_{12} \frac{d}{dt} |a_1, a_2\rangle = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \hat{P}_{12} i\hbar \hat{H}_{12} |a_1, a_2\rangle = \hat{P}_{12} \hat{H}_{12} |a_1, a_2\rangle.\end{aligned}$$

2.8.2. Bosony a fermiony, Pauliho princip

Z předchozího rozboru je zřejmé, že

$$|a_2, a_1\rangle = \hat{P} |a_1, a_2\rangle = \pm |a_1, a_2\rangle. \quad (2.99)$$

Vlnová funkce dvou částic může být jen symetrická nebo antisymetrická. Neexistuje nic mezitím. Částice mohou být jen dvojího druhu: se symetrickými vlnovými funkcemi (*bosony*) nebo s antisymetrickými vlnovými funkcemi (*fermiony*) vzhledem ke vzájemné záměně. Tuto vlastnost nelze změnit ani časovým vývojem, protože operátor výměny částic podle (2.97.3) komutuje s Hamiltonovým operátorem a jeho časový vývoj je proto nulový. Vznikne-li částice jako fermion či boson, zůstává takovou až do svého zániku.

Bosony

Bosony mají symetrickou vlnovou funkci

$$|a_2, a_1\rangle = |a_1, a_2\rangle. \quad (2.100)$$

Budou-li oba stavy stejné, tj. $a_1 = a_2 = a$, získáme relaci $|a, a\rangle = |a, a\rangle$, která je vždy splněna a proto může existovat více bosonů ve stejném kvantovém stavu. Při nízkých teplotách mají bosony dokonce snahu kumulovat se v nejnižším možném energetickém stavu a vytvářet tzv. bosonový kondenzát. Ten je známý zejména v supratekutosti a supravodivosti. Statistika, které podléhá soustava bosonů se nazývá Bose-Einsteinova statistika a zabýváme se jí v části TF3 (Statistická fyzika). Z dalšího vývoje kvantové mechaniky se ukázalo, že bosony jsou vždy částice s celočíselným spinem (0, 1, 2, ...) a pro tyto částice lze zavést kreační operátory splňující jednoduché komutační relace (viz následující kapitola). Nejtypičtějšími představiteli této rodiny jsou skalární ($s = 0$) a vektorové ($s = 1$) mezony, dále všechny intermediální částice (foton, $W^\pm$, Z^0 a gluony se spinem 0 a graviton se spinem 2).

Fermiony

Fermiony mají antisymetrickou vlnovou funkci

$$|a_2, a_1\rangle = -|a_1, a_2\rangle. \quad (2.101)$$

Budou-li oba stavy stejné, tj. $a_1 = a_2 = a$, získáme relaci $|a, a\rangle = -|a, a\rangle$, která není nikdy splněna a proto nemůže existovat více fermionů ve stejném kvantovém stavu. Tomuto faktu se říká *Pauliho vylučovací princip*. Při nízkých teplotách obsazují fermiony postupně jednotlivé energetické hladiny, například v atomárním obalu může být na každé hladině jen tolik elektronů, kolik kvantových stavů tato hladina představuje (to je dáno stupněm degenerace). V atomárním obalu tedy nemohou existovat dva elektrony se stejnými kvantovými čísly n, l, m, m_s . Statistika, které podléhá soustava fermionů se nazývá Fermi-Diracova statistika a budeme se jí zabývat v části TF3 tohoto sylabu. Fermiony jsou vždy částice s poločíselným spinem (1/2, 3/2, ...) a pro tyto částice lze zavést kreační operátory splňující jednoduché antikomutační relace (viz následující kapitola). Nejtypičtějšími představiteli této rodiny částic jsou leptony (elektron, mion, tauon a neutrino se spinem 1/2),

kvarky (d, u, s, c, b, t se spinem $1/2$), částice složené ze tří kvarků, neboli baryony (neutron, proton, Λ hyperon se spinem $1/2$ a například Δ baryony se spinem $3/2$).

	BOSONY	FERMIONY
spin	celočíslný	poločíslný
vlnová funkce	symetrická	antisymetrická
statistika	Bose-Einsteinova	Fermi-Diracova
Pauliho princip	nesplňují	splňují
kreační operátory	splňují komutační relace	splňují antikomutační relace

2.8.3. Druhé kvantování

Představme si, že máme N stejných částic, které obsazují stavy nějaké dynamické proměnné. N_1 částic je v prvním stavu (hodnota a_1), N_2 částic je ve druhém stavu (hodnota a_2), atd. Čísla N_k nazýváme obsazovací čísla stavu k . Součet všech obsazovacích čísel je roven počtu částic:

$$\sum_k N_k = 1. \quad (2.102)$$

Pro bosony je $N_k = 0, 1, 2, 3, \dots$. Pro fermiony je situace jednodušší. V daném stavu může být nejvýše jeden fermion, tj. $N_k = 0, 1$. Příslušný stav soustavy N stejných částic s danými obsazovacími čísly označíme

$$|\psi\rangle = |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots\rangle. \quad (2.103)$$

Tomuto zápisu říkáme reprezentace obsazovacích čísel. Dále se situace bude lišit pro bosony a pro fermiony.

Bosony

Zavedme podobně jako u harmonického oscilátoru *kreační a anihilační operátory* do stavu k definičními vztahy (normovací konstanty ponecháme stejné jako u harmonického oscilátoru):

$$\begin{aligned} \hat{a}_k^+ |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots\rangle &\equiv \sqrt{N_k + 1} |N_1, N_2, \dots, N_k + 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_k |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots\rangle &\equiv \sqrt{N_k} |N_1, N_2, \dots, N_k - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (2.104)$$

Přímo z těchto definičních relací (pouhým zapůsobením na stavový vektor (2.103) snadno spočteme komutační relace kreačních a anihilačních operátorů:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k, \hat{a}_l] &= 0, \\ [\hat{a}_k^+, \hat{a}_l^+] &= 0, \\ [\hat{a}_k, \hat{a}_l^+] &= \delta_{kl}. \end{aligned} \quad (2.105)$$

Zavedme další operátor

$$\hat{N}_k \equiv \hat{a}_k^+ \hat{a}_k. \quad (2.106)$$

Tento operátor se nazývá (analogicky jako u harmonického oscilátoru) *operátor počtu částic* ve stavu k , protože zapůsobením na stavový vektor získáme počet částic ve stavu k :

$$\begin{aligned}\hat{a}_k^+ \hat{a}_k |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots\rangle &= \sqrt{N_k} \hat{a}_k^+ |N_1, N_2, \dots, N_k - 1, \dots\rangle = \\ &= \sqrt{N_k} \sqrt{N_k} |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots\rangle = N_k |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots\rangle.\end{aligned}$$

Operátor celkového počtu částic potom je

$$\hat{N} \equiv \sum_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k. \quad (2.107)$$

Je-li úplná množina pozorovatelných spojitá můžeme celý postup zopakovat pro spojitě proměnné. Například v x reprezentaci lze zavést

$$\begin{aligned}\hat{\psi}^+(x) & \quad \text{kreační operátor do polohy } x, \\ \hat{\psi}(x) & \quad \text{anihilační operátor z polohy } x.\end{aligned}$$

Komutační relace budou obdobné, jen místo Kroneckerova symbolu vystupuje na pravé straně Diracova δ distribuce:

$$\begin{aligned}[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(y)] &= 0, \\ [\hat{\psi}^+(x), \hat{\psi}^+(y)] &= 0, \\ [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^+(y)] &= \delta(x - y).\end{aligned} \quad (2.108)$$

Operátor hustoty počtu částic se zavádí vztahem

$$\hat{N}_k \equiv \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x), \quad (2.109)$$

operátor počtu částic vyskytujících se v intervalu $\langle a, b \rangle$ je

$$\hat{N}(a, b) \equiv \int_a^b \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x) dx \quad (2.110)$$

a operátor celkového počtu částic je

$$\hat{N}(a, b) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x) dx. \quad (2.111)$$

Obdobně by se postupovalo ve třech dimenzích. Celý přechod od fyziky jedné částice k fyzice mnoha stejných částic lze formálně provést nahrazením vlnové funkce kreačními a anihilačními operátory a nahrazením hustoty pravděpodobnosti operátorem hustoty počtu částic:

$$\begin{array}{ccc} \psi(x) & \rightarrow & \hat{\psi}(x) \\ w(x) \equiv \psi^*(x) \psi(x) & \rightarrow & \hat{N}(x) \equiv \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x) \end{array}. \quad (2.112)$$

Tomuto postupu se říká *druhé kvantování*, vlnové funkce popisující systém se stávají operátory a kvantová teorie přechází v *kvantovou teorii pole*, ve které jsou právě veličiny popisující klasická spojitá pole nahrazovány operátory. Druhý řádek přiřazení (2.112) má ještě jeden důležitý význam: U soustavy stejných částic vyjadřujeme pravděpodobnost děje operátorem hustoty počtu částic, tak jak to bývá u skutečných systémů (například svazku stejných částic v experimentu). U jedné částice můžeme hovořit o hustotě pravděpodobnosti jejího výskytu $\psi^*(x) \psi(x)$. Celková pravděpodobnost je rovna jedné, tak, jak to odpovídá normování stavového vektoru.

Fermiony

U fermionů probíhá druhé kvantování obdobně. Opět zavádíme kreační a anihilační operátory $\hat{b}_k^+$, $\hat{b}_l$ do stavů k a l . Vzhledem k antisymetrii vlnových funkcí musí tyto operátory splňovat antikomutační relace:

$$|k, l\rangle = -|l, k\rangle \quad \Rightarrow \quad |k, l\rangle + |l, k\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{b}_k^+ \hat{b}_l^+ + \hat{b}_l^+ \hat{b}_k^+ = 0.$$

Antikomutátory značíme složenými závorkami a relace (2.205) pro bosony tak získá tvar:

$$\begin{aligned} \{\hat{b}_k, \hat{b}_l\} &= 0, \\ \{\hat{b}_k^+, \hat{b}_l^+\} &= 0, \\ \{\hat{b}_k, \hat{b}_l^+\} &= \delta_{kl}. \end{aligned} \tag{2.113}$$

Definice spojitých operátorů i operátoru hustoty počtu částic zůstávají shodné. U fermionů jsou všude nahrazeny relace komutační relacemi antikomutačními. V mnoha situacích se chování fermionů a bosonů liší pouze znaménkem (symetrie vlnové funkce; komutační a antikomutační relace; BE a FD statistika).

Některé další informace o kvantové teorii interakcí a pokusech jejich sjednocování můžete najít online na serveru http://www.aldebaran.cz/index_01.html v pasážích věnovaných interakcím.