

Hodnoty pozorovatelných veličin

Z vysloveného postulátu o měření lze odvodit několik dalších skutečností dobře známých z kvantové mechaniky, občas ovšem s upozorněními na předpoklady.

Střední hodnota

Nechť $A \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$. Pro každý stav $\psi \in \mathcal{H}$ a každou množinu $M \in \mathcal{B}^1$ lze mluvit o pravděpodobnosti naměření hodnoty A v M , ale ne pro každý stav toto pravděpodobnostní rozdělení toto pravděpodobnostní rozdělení má střední hodnotu dobře definovanou (představme si například stav

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-1} \varphi_n \quad (1)$$

pro LHO s energetickou bází $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$: norma ψ je konečná, ale pokus o určení střední hodnoty energie vede na řadu $\sum_{n \in \mathbb{N}} n |(\varphi_n, \psi)|^2 = \sum_{n \in \mathbb{N}} 1/n$, která diverguje).

Věnujme se nejprve střední hodnotě A v čistém stavu E_ψ . Nechť a značí odpovídající náhodnou veličinu. Pro $\Delta \in \mathcal{B}^1$ je pravděpodobnost

$$P(a \in \Delta) = \text{Tr}(E_A(\Delta)E_\psi) = (\psi, E_A(\Delta)\psi), \quad (2)$$

což ale není nic jiného, než $\mu_\psi^{(A)}(\Delta)$. Číselná míra $\mu_\psi^{(A)}$ získaná ze spektrální míry A pro jednotkový vektor ψ má tedy přímočarý význam pravděpodobnostní míry výsledků měření pozorovatelné A ve stavu E_ψ . Střední hodnotu potom můžeme počítat podle vzorce

$$\langle A \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_\psi^{(A)}(\lambda) = \left(\psi, \int_{\mathbb{R}} \lambda dE_A(\lambda) \psi \right) = (\psi, A\psi) \quad (3)$$

a je evidentní, že pro $\psi \in D(A)$ se jedná o konečné číslo a pro $\psi \notin D(A)$ není výraz definován.

Pro smíšený stav roli (2) přejímá výraz $\mu_W^{(A)}(\Delta) = \text{Tr}(E_A(\Delta)W)$ a střední hodnotu pak můžeme opět psát jako integrál λ s touto číselnou mírou

$$\langle A \rangle_W = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_W^{(A)}(\lambda), \quad (4)$$

který může a nemusí konvergovat. Můžeme se ptát, za jakých předpokladů lze integrál a λ „vnořit“ dovnitř stopy a pravou stranu hledat jako $\text{Tr}(AW)$. Evidentně samotná smysluplnost takového zápisu je podmíněna tím, aby AW byl jaderný operátor. Toto je zaručeno, pokud A je omezený, ale i pro neomezený operátor se může stát, že jeho složení s jaderným operátorem padne do $\mathcal{J}_1(\mathcal{H})$.

Pokud tento předpoklad ustanovíme, vyplývá z něj

- A je definovaný na celém $\text{Ran } W$,
- pro každý rozklad W do čistých stavů jako $W = \sum_n \mu_n E_{\varphi_n}$ tedy všechna φ_n patří do $D(A)$,
- hodnoty $\langle A \rangle_{\varphi_n} = (\varphi_n, A\varphi_n)$ jsou tedy konečné a $\text{Tr}(AW)$ je jejich váženým průměrem s vahami μ_n .

Podmínka $AW \in \mathcal{J}_1(\mathcal{H})$ je tedy postačující pro to, aby výraz (4) byl dobře definovaný a byl roven stopě AW . Není však nutná – lze najít kombinace A, W , pro které (4) konverguje, ačkoli AW jaderný není.

Poznámka: Pro neomezený A nezaručuje $AW \in \mathcal{J}_1(\mathcal{H})$, že by také WA byl jaderný. Dokonce se ani nejedná o spojitý operátor, protože jeho definiční obor je $D(A) \neq \mathcal{H}$. Díky samosdruženosti A a W a omezenosti W ale platí $(WA)^* = A^*W^* = AW$ a tedy do $\mathcal{J}_1(\mathcal{H})$ patří *uzávěr* operátoru WA , protože

$$\overline{WA} = (WA)^{**} = (AW)^* \quad (5)$$

a protože prostor $\mathcal{J}_1$ je vůči $*$ uzavřený. Stopa tohoto operátoru se se stopou AW shoduje.

Neurčitost měření

Střední kvadratickou odchylku pozorovatelné veličiny A definujeme tradičně,

$$(\Delta A)_W := \sqrt{\langle A^2 \rangle_W - \langle A \rangle_W^2}, \quad (6)$$

její konečnost zaručí postačující podmínka $AW, A^2W \in \mathcal{F}_1(\mathcal{H})$. Výraz na pravé straně lze psát několika ekvivalentními způsoby, z nichž vyzdvihneme

$$(\Delta A)_W^2 = \int_{\mathbb{R}} (\lambda - \langle A \rangle_W)^2 d\mu_W^{(A)}(\lambda), \quad (7)$$

protože nevyžaduje konstruovat vedle spektrální míry A ještě E_{A^2} .

Jestliže pro dvě pozorovatelné A_1, A_2 doplníme k těmto předpokladům ještě $A_1A_2W, A_2A_1W \in \mathcal{F}_1(\mathcal{H})$, lze psát **relaci neurčitosti** ve tvaru

$$(\Delta A_1)_W(\Delta A_2)_W \geq \frac{1}{2} |\text{Tr}((A_1A_2 - A_2A_1)W)| \quad (8)$$

a dokázat naprosto identicky jako v kvantové mechanice.

Poznámka: Operátor $A_1A_2 - A_2A_1$, vystupující v (8) na místě pozorovatelné, nemá vlastnosti pozorovatelné veličiny. Nemusí vůbec být *hustě definovaný*: pro $(A_1A_2 - A_2A_1)W \in \mathcal{F}_1$ stačí, aby jeho definiční obor pokrýval celé $\text{Ran } W$ (které například má netriviální kodimenzi, pokud $\sigma_p(W) \ni 0$). Pokud je, dosáhneme sice *symetrického* operátoru, doplníme-li prefaktor i , ale ne nutně samosdruženého. Příklad 16/2 v B–E–H ukazuje jednoduchou volbu A_1, A_2 , pro kterou $i(A_1A_2 - A_2A_1)$ má nestejně indexy defektu a neumožňuje tak ani samosdružené rozšíření.

Příklad: Pro komutující operátory A_1, A_2 je $i(A_1A_2 - A_2A_1)$ zúžením nulového operátoru na $D(A_1A_2) \cap D(A_2A_1)$. Pro operátory Q a P na $\mathbb{R}$ je $i(PQ - QP)$ zúžením jednotkového operátoru na $D(PQ) \cap D(QP)$ a v případě, že jsou splněny předpoklady $PW, QW, P^2W, Q^2W, PQW, QPW \in \mathcal{F}_1(L^2(\mathbb{R}))$ (z nichž některé jsou závislé), pak platí $(\Delta P)_W(\Delta Q)_W \geq 1/2$. Snadno ale najdeme příklady, kdy splněny nejsou – jedná se pak zpravidla o situace, kdy jedna nebo obě odchylky nejsou dobře definované.

Ke znalostem z kvantové mechaniky doplníme jen jednu zajímavou poučku, která by se metodami z fyziky dokazovala dosti nesnadno, ale s projektorovou mírou je přímočará.

Věta (přesnost dosažitelná měřením.). Pro každé $\lambda \in \sigma(A)$ a každé $\varepsilon > 0$ existuje čistý stav E_ψ takový, že

$$|\langle A \rangle_\psi - \lambda| \leq \varepsilon, \quad (\Delta A)_\psi \leq 2\varepsilon. \quad (9)$$

Důkaz. Nutnou a postačující podmínkou pro $\lambda \in \sigma(A)$ je, že $E_A(U_\varepsilon(\lambda))$ je nenulový projektor pro každé $\varepsilon > 0$. Pro dané ε tedy označíme tento projektor E a zvolíme libovolný jednotkový vektor $\psi \in \text{Ran } E$. Protože $E\psi = \psi$, platí

$$\mu_\psi^{(A)}(\Delta) = (\psi, E_A(\Delta)\psi) = (\psi, E_A(\Delta)E_A(U_\varepsilon(\lambda))\psi) = (\psi, E_A(\Delta \cap U_\varepsilon(\lambda))\psi) = \mu_\psi^{(A)}(\Delta \cap U_\varepsilon(\lambda)) \quad (10)$$

a tedy míra $\mu_\psi^{(A)}$ je soustředěna na $U_\varepsilon(\lambda)$. Pro střední hodnotu A potom

$$\langle A \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} x d\mu_\psi^{(A)}(x) = \int_{U_\varepsilon(\lambda)} x d\mu_\psi^{(A)}(x), \quad (11)$$

ale funkce, kterou středujeme, je po posledním kroku omezená na interval $(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ a střední hodnota tedy rovněž tak. Pro rozptyl veličiny A využijeme rovnici (7),

$$(\Delta A)_W^2 = \dots = \int_{\lambda - \varepsilon}^{\lambda + \varepsilon} (x - \langle A \rangle_\psi)^2 d\mu_\psi^{(A)}(x) \quad (12)$$

a skutečnost, že pro $x \in (\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ je $0 \leq (x - \langle A \rangle_\psi)^2 \leq (2\varepsilon)^2$. $\square$

Kanonické komutační relace

Komutační relace mezi polohou a hybností se nazývá kanonická. Viděli jsme ale již v příkladu výše, že **není** oprávněné psát

$$QP - PQ = iI, \quad Q_j P_k - P_k Q_j = i\delta_{jk}I, \quad (13)$$

operátor na levé straně, ač hustě definovaný (do jeho definičního oboru spadá Schwartzův prostor), je pouze zúžením jednotkového operátoru. Může být tedy žádoucí vyjádřit skutečnost, že „komutují na jednotku“, způsobem, který na omezení definičních oborů nenarazí.

Viděli jsme na kapitole o komutaci samosdružených operátorů, že otázku komutativity A_1, A_2 lze převést několika způsoby na otázku komutativity omezených operátorů. Počítat funkcionální realizaci rezolventy, arkustangenty nebo Cayleyho obrazu operátoru hybnosti není žádná příjemná vyhlídka, ale připomeňme poslední zmíněnou ekvivalentní formulaci:

$$A_1, A_2 \text{ komutují} \iff \text{komutují } e^{itA_1}, e^{isA_2} \text{ pro všechna } s, t \in \mathbb{R}. \quad (14)$$

Porovnání součinů takovýchto exponenciál v obou pořadích nám tedy o dvou operátorech může říci, „jak moc“ nekomutují, a tak nahradit roli rozdílu součinu operátorů. Exponenciálu itP jsme viděli spočítanou na nedávném cvičení a exponenciála isQ je jednoduchý operátor násobení funkcí, použít tedy tyto dva je snadné. Rozepsáním působení obou unitárních operátorů na vektor a porovnáním jejich složení v obou pořadích dostáváme **Weylovy relace**. Pro $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$:

$$\exp(itP)\exp(isQ) = e^{ist}\exp(isQ)\exp(itP). \quad (15)$$

V případě prostoru $L^2(\mathbb{R}^n)$ musíme exponenciály operátoru nahradit

$$U(t) = \exp\left(i \sum_{k=1}^n t_k P_k\right), \quad V(s) = \exp\left(i \sum_{k=1}^n s_k Q_k\right), \quad (16)$$

na něž lze pohlížet jako na funkce komutujících operátorů P_k , resp. Q_k , a Weylovy relace v tomto případě znějí

$$U(t)V(s) = e^{it \cdot s} V(s)U(t). \quad (17)$$

Jednou z výhod tohoto postupu je, že zachytí některé patologické situace. Uvažujme operátory Q a P na prostoru $\mathcal{H} = L^2((0, 2\pi))$, z toho P s periodickou okrajovou podmínkou. Operátor $i(PQ - QP)$ je definován na prostoru

$$\begin{aligned} D(PQ - QP) &= \{\psi \in D(Q) \mid Q\psi \in D(P)\} \cap \{\psi \in D(P) \mid P\psi \in D(Q)\} \\ &= \{\psi \in \mathcal{H} \mid \psi, x\psi \text{ absolutně spojitě}, \psi' \in \mathcal{H}, (x\psi)' \in \mathcal{H}, \psi(0) = \psi(2\pi), 0\psi(0) = 2\pi\psi(2\pi)\} \\ &= \{\psi \in H^1((0, 2\pi)) \mid x\psi' \in \mathcal{H}, \psi(0) = \psi(2\pi) = 0\}. \end{aligned} \quad (18)$$

Na tomto oboru platí

$$\forall \psi \in D(PQ - QP): QP\psi - PQ\psi = i\psi \quad (19)$$

a dokonce se jedná o hustý podprostor $\mathcal{H}$, přeci však operátory polohy a hybnosti na kružnici Heisenbergovu relaci nespĺňují. Konkrétně operátor

$$P: \{\psi \in H^1((0, 2\pi)) \mid \psi(0) = \psi(2\pi)\} \rightarrow \mathcal{H}: \psi(x) \mapsto -i\psi'(x) \quad (20)$$

má čistě bodové spektrum a pro libovolný jeho vlastní vektor φ je $(\Delta P)_\varphi = 0$. Operátor Q na tomto $\mathcal{H}$ je omezený a tedy $(\Delta Q)_\varphi < \infty$. Levá strana relace neurčitosti je tedy pro tento stav nula a porušuje nerovnost $\geq \|\varphi\|/2$. Problém nastává v tom, že všechny tyto protipříklady spadají přesně mimo $D(PQ - QP)$.

Zajímavá je otázka, jestli nějaká jiná dvojice (či $2n$ -tice) operátorů může splňovat (15), resp. (16), které můžeme považovat za cestu od Hamiltonovské mechaniky ke kanonické kvantizaci (opravující nedostatky intuitivnější (13)). Ukazuje se, že ano, ale volnost není tolik velká. Věta M. Stone a J. von Neumanna z roku 1931 ukazuje, že každá taková $2n$ -tice operátorů je buď přímo unitárně ekvivalentní $(P_k)_{k=1}^n, (Q_k)_{k=1}^n$, nebo lze redukovat systémem projektorů (E_α) takovým způsobem, že každý z podprostorů $\mathcal{H}_\alpha$ je izomorfní $L^2(\mathbb{R}^n)$ a části operátorů v $\mathcal{H}_\alpha$ jsou již unitárně ekvivalentní běžným složkám polohy a hybnosti, přes izomorfismy závislé na α .

Jinými slovy, pokud k Weylovým relacím přidáme požadavek ireducibility, pak až na izomorfismus jsou stavový prostor $L^2(\mathbb{R}^n)$ a operátory P_k, Q_k na něm, předepsané našim známým způsobem, jediným řešením. Nazývají se pak tzv. Schrödingerovou reprezentací kanonických komutačních relací.

Cesty ke spektru operátorů

Spektrum operátoru je podstatné tím, že určuje možné hodnoty pozorovatelných. Pro jiné účely potřebujeme i patřičnou projektorovou míru, ale vždy je dobré mít první představu o tom, jak spektrum vypadá a jaký má rozklad na bodovou a spojitou část. Předvedeme si dnes některé metody, jak k $\sigma(A)$ dojít, pokud operátor A byl vytvořen z nějakých jednodušších operátorů, jejichž spektra známe.

Funkce operátoru

O spektru $f(A)$, kde $f \in \Phi_{E_A}$, máme již jednu informaci: jedná se o esenciální spektrum funkce f při míře E_A . To je sice univerzálně pravda, ale není to obecně příliš praktický návod. Ukážeme si tvrzení, které nám o spektru řekne více.

Věta (10.5.4). Nechť $A \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$, nechť $f \in \Phi_{E_A}$.

1. Je-li $\lambda \in \sigma_p(A)$, pak $f(\lambda) \in \sigma_p(f(A))$ a vlastní vektory A příslušející λ jsou také vlastními vektory $f(A)$ příslušejícími $f(\lambda)$.
2. Je-li funkce f na spektru A spojitá, pak $\sigma(f(A)) = \overline{f(\sigma(A))}$.

Důkaz. Nechť ψ je vlastní vektor A příslušející vlastnímu číslu λ . Využijeme toho, že $E_A(\{\lambda\})$ je projektor na vlastní podprostor, a tedy $E_A(\{\lambda\})\psi = \psi$. Odsud plyne, že $\mu_\psi^{(A)}$ je soustředěna na množině $\{\lambda\}$: platí totiž

$$\mu_\psi^{(A)}(\{\lambda\}) = (\psi, E_A(\{\lambda\})\psi) = (\psi, \psi) = \mu_\psi^{(A)}(\mathbb{R}) \quad (1)$$

a pozitivita míry $\mu_\psi^{(A)}$ spolu s konečností nenechává jinou možnost, než že všechny množiny disjunktní s $\{\lambda\}$ zobrazuje na nulu.

Nechť nyní $T = f(A) - f(\lambda)I = \mathcal{J}_{E_A}(f(x) - f(\lambda))$. Z pravidel funkcionálního počtu využijeme rovnici

$$\|\mathcal{J}_{E_A}(f(x) - f(\lambda))\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |f(x) - f(\lambda)|^2 d\mu_\psi^{(A)}(x), \quad (2)$$

ale díky objevené vlastnosti míry $\mu_\psi^{(A)}$ stačí integrovat na množině $\{\lambda\}$, a na té je integrand nulový. Proto

$$\|f(A)\psi - f(\lambda)\psi\|^2 = 0, \quad f(A)\psi = f(\lambda)\psi. \quad (3)$$

Pro druhou část uvažujeme funkci, která je spojitá. Poznamenejme, že spojitost na spektru je ve skutečnosti postačující podmínkou pro $f \in \Phi_{E_A}$, protože implikuje obě vlastnosti definující tuto větší množinu. Můžeme psát: $C(\sigma(A)) \subset \Phi_{E_A}$.

Vezměme $\lambda \in \sigma(A)$ a $\mu = f(\lambda)$. Napíšeme podmínku spojitosti f ve tvaru

$$\forall \varepsilon > 0: \exists \delta > 0: f^{-1}(U_\varepsilon(\mu)) \supset U_\delta(\lambda) \quad (4)$$

a na obě strany $\supset$ použijeme spektrální míru E_A :

$$\forall \varepsilon > 0: \exists \delta > 0: E_A(f^{-1}(U_\varepsilon(\mu))) \geq E_A(U_\delta(\lambda)) \quad (5)$$

Nutnou a postačující podmínkou $\lambda \in \sigma(A)$ je ale

$$\forall \delta > 0: E_A(U_\delta(\lambda)) \neq 0, \quad (6)$$

takže i $E_A(f^{-1}(U_\varepsilon(\mu))) \neq 0$ pro všechna $\varepsilon > 0$, což je definičním vztahem pro $\mu = f(\lambda) \in R_{ess}^{(E_A)}(f) = \sigma(f(A))$.

Pro opačnou implikaci uvažujeme μ mimo *uzávěr* množiny $f(\sigma(A))$, takže μ leží mimo $f(\sigma(A))$ včetně nějakého ε -okolí:

$$\exists \varepsilon > 0 : U_\varepsilon(\mu) \cap f(\sigma(A)) = \emptyset \quad (7)$$

Na obě strany použijeme postupně f^{-1} a E_A a dozvídáme se

$$\exists \varepsilon > 0 : E_A(f^{-1}(U_\varepsilon(\mu)) \cap \sigma(A)) = 0. \quad (8)$$

Protože $\sigma(A)$ je nosičem E_A , $E_A(M \cap \sigma(A))$ a $E_A(M)$ jsou stejné. Tak se dozvídáme, že množina $f^{-1}(U_\varepsilon(\mu))$ je E_A -nulová pro nějaké $\varepsilon > 0$, což implikuje $f(\lambda) \notin R_{\text{ess}}^{(E_A)}(f)$.

Z předchozích dvou částí důkazu se dozvídáme:

$$\begin{aligned} f(\sigma(A)) &\subset \sigma(f(A)), \\ \mathbb{C} \setminus \overline{f(\sigma(A))} &\subset \mathbb{C} \setminus \sigma(f(A)), \end{aligned} \quad (9)$$

ale když nad první inkuzí uděláme *uzávěr*, což pravou stranu nezmění, dostáváme nutnou a postačující podmínku rovnosti mezi množinami $\sigma(f(A))$ a $\overline{f(\sigma(A))}$. $\square$

Poznámky: Opatrnost, s jakou je věta formulována, je opodstatněná:

- V bodovém spektru $f(A)$ se mohou objevit i hodnoty, které nejsou žádným obrazem vlastních hodnot A . Například Q má bodové spektrum prázdné, ale do $\sigma_p(T_f) = \sigma_p(f(Q))$ patří každá hodnota, které $f(x)$ nabývá na nějakém nenulovém intervalu.
- Uzávěr je důležitý, protože obraz uzavřené množiny při spojitěm zobrazení nemusí být uzavřený. V některých případech to však zajištěno je, například pokud $\sigma(A)$ je omezené (tedy pro A hermitovský).

Druhá část věty má naprosto přímočaré zobecnění i na funkce n komutujících operátorů A_1 až A_n (10.7.6): je-li $f \in C(\sigma(A_1) \times \dots \times \sigma(A_n))$, pak spektrum operátoru $f(A_1, \dots, A_n)$ je rovno *uzávěru* množiny $f(\sigma(A_1) \times \dots \times \sigma(A_n))$. O bodovém spektru ovšem mnoho říct nelze.

Příklady:

- Spektrum hybnosti na $L^2(\mathbb{R})$ je $\sigma(P) = \mathbb{R}$, totéž platí pro operátory složek hybnosti na $L^2(\mathbb{R}^n)$. Protože obrazem množiny $\mathbb{R}$ při $x \mapsto x^2$, stejně jako množiny $\mathbb{R}^n$ při $x \mapsto x_1^2 + \dots + x_n^2$, je $\langle 0, +\infty \rangle$, je tato množina spektrem operátoru volné energie v obou situacích.
- Spektrem operátoru $H = P^2 + Q^2$ na $L^2(\mathbb{R})$ je množina lichých přirozených čísel. Pro $\mu \in \rho(H)$ dosazením H do $f(\lambda) = 1/(\lambda - \mu)$ dostáváme rezolventu $R_H(\mu)$. Z věty vyplývá, že $1/(2n + 1 - \mu)$ jsou vlastní čísla R_H s vlastními vektory stejnými, jako má H , jedná se tedy o operátor s čistě bodovým, nedegenerovaným spektrem. Kromě těchto hodnot je ve spektru ještě jejich hromadný bod, 0, který není obrazem žádného λ – musí tedy být prvkem $\sigma_c(R_H(\mu))$. Tyto spektrální vlastnosti odpovídají kompaktnímu operátoru; lze se snadno přesvědčit, že skutečně $R_H(\mu) \in \mathcal{J}_\infty(\mathcal{H})$ pro každé $\mu \in \rho(H)$.

Samosdružená rozšíření

Mnoho se o spektru můžeme dozvědět i v rámci teorie samosdružených rozšíření symetrických operátorů.

Připomeňme, že pro uzavřený operátor T definujeme oblast regularity jako množinu hodnot

$$\pi(T) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \exists c > 0 : \forall \psi \in D(T) : \|T\psi - \lambda\psi\| \geq c\|\psi\|\}. \quad (10)$$

Zabývejme se jejím doplněm. Do něj patří čísla, pro která $\|T\psi - \lambda\psi\|$ pro jednotková ψ nemá spodní hranici jinou než nula. To může mít pouze dvě příčiny,

1. existuje nenulové $\psi \in D(T)$ takové, že $T\psi = \lambda\psi$, tedy $\lambda \in \sigma_p(T)$,
2. $\lambda \notin \sigma_p(T)$, ale existuje posloupnost jednotkových $\psi_n \in D(T)$ takových, že $(T - \lambda I)\psi_n$ jsou vektory s normou limitně klesající k nule.

Ve druhém případě můžeme psát: $(T - \lambda I)^{-1}$ je na svém definičním oboru, kterým je $\text{Ran}(T - \lambda I)$, neomezený operátor. Snadno nahlédneme, že se jedná o nutnou i postačující podmínku.

V prvním případě tedy má rovnice $T\psi = \lambda\psi$ nenulové řešení, ve druhém se této vlastnosti lze alespoň v jistém smyslu blížit. Uzavřenou množinu $\mathbb{C} \setminus \pi(T)$ z tohoto důvodu občas nazýváme *přibližně bodovým spektrem* $\sigma_{\text{ap}}(T)$. Je evidentní, že pokud dva uzavřené operátory T, S splňují $T \subset S$, pak $\sigma_{\text{ap}}(T) \subset \sigma_{\text{ap}}(S)$: vlastní vektor či posloupnost vektorů z $D(T)$ zaručující $\lambda \in \sigma_{\text{ap}}(T)$ můžeme pro operátor S jednoduše použít stejnou.

Pro normální operátor T je $\pi(T) = \rho(T)$ a rovnají se tedy i jejich doplňky. **Celé spektrum každého normálního operátoru je tedy přibližně bodové.** Zejména si to budeme pamatovat pro samosdružené operátory.

Uvažujme nyní symetrický operátor A s indexy defektu (n, n) a jeho uzavřené symetrické rozšíření A' . Podle druhé von Neumannovy formule je $D(A')$ roven $D(A)$ zvětšenému o nějaký podprostor G , $\dim G = m \leq n$. Podle předchozího odstavce se přibližně bodové spektrum A může při rozšíření na A' pouze zvětšit.

Může se stát, že vektory přidané do definičního oboru zahrnují nějaké vlastní vektory A' , ovšem nejvýše m takových lineárně nezávislých. Bodové spektrum se tedy může rozšířit o vlastní hodnoty s násobností nejvýše m , nebo se pro existující vlastní podprostory může navýšit dimenze jejich vlastních podprostorů.

Může také přibýt bod $\lambda \in \mathbb{C}$, které splňuje druhou z možností výše, tedy pro který je $A' - \lambda I$ invertibilní a $(A' - \lambda I)^{-1}$ neomezený, i když $(A - \lambda I)^{-1}$ nebyl. (Že nemusíme ověřovat invertibilitu $A - \lambda I$, je jednoduché cvičení pro posluchače.) Bod $\lambda \in \pi(A)$ tedy přechází do $\sigma_{\text{ap}}(A')$. Ovšem o oblasti regularity víme, že $A - \lambda I$ má uzavřený obor hodnot. Zvětšením oboru $D(A)$ o podprostor G dojde ke zvětšení

$$\text{Ran}(A' - \lambda I) = \text{Ran}(A - \lambda I) + (A - \lambda I)G. \quad (11)$$

Touto operací nemůže z uzavřeného podprostoru vzniknout neuzavřený, pokud prostor G je konečnědimenzionální, tedy zejména, pokud indexy defektu jsou **konečné**. V takovém případě je operátor $(A' - \lambda I)^{-1}$ uzavřeným operátorem definovaným na uzavřeném podprostoru, a tedy omezený, a možnost, kterou jsme zkoumali, je vyloučena.

Shrňme tato pozorování:

- $\sigma_{\text{ap}}(A') \supset \sigma_{\text{ap}}(A)$,
- $\sigma_{\text{p}}(A') \supset \sigma_{\text{p}}(A)$, $\dim \text{Ker}(A - \lambda I) \leq \dim \text{Ker}(A' - \lambda I) \leq \dim \text{Ker}(A - \lambda I) + m$,
- pro konečné $\dim G$ platí $\sigma_{\text{ap}}(A') \setminus \sigma_{\text{p}}(A') \subset \sigma_{\text{ap}}(A) \setminus \sigma_{\text{p}}(A)$ (množina se nemůže zvětšit, zmenšit ale ano, pokud z některého jejího bodu vznikla rozšířením vlastní hodnota).

Pro **konečné** indexy defektu tedy k přibližně bodovému spektru mohou v rámci symetrického, potažmo samosdruženého rozšíření přibýt pouze vlastní hodnoty konečné násobnosti. Pokud tedy nějakým způsobem $\sigma_{\text{ap}}(A)$ zjistíme, stačí pro operátor A' dořešit rovnici vlastních čísel (která je přímočará) a známe celé spektrum.

Esenciální a diskrétní spektrum

Alternativou k hledání σ_{ap} uzavřeného operátoru T je takzvané *esenciální spektrum* σ_{ess} . Podmínka náležitosti

$$\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(T) \iff \exists (\psi_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(T): (\forall n \in \mathbb{N}: \|\psi_n\| = 1), T\psi_n - \lambda\psi_n \rightarrow 0, \psi_n \xrightarrow{w} 0. \quad (12)$$

je oproti $\sigma_{\text{ap}}(T)$ posílena o požadavek, že posloupnost jednotkových vektorů (ψ_n) konverguje k nule ve slabé topologii, tedy například se jedná o vzájemně ortogonální vektory. (Alternativně se setkáme s formulací, že nemá konvergentní podposloupnost.) Odsud je zřejmé, že $\sigma_{\text{ess}}(A) \subset \sigma_{\text{ap}}(A)$. Podmínka (12) je známa jako **Weylovo kritérium** (ve variantách pro σ_{ess} i pro σ_{ap}).

O něco více můžeme říci pro uzavřené *symetrické* operátory. Do esenciálního spektra $A \in \mathcal{L}_{\text{cs}}(\mathcal{H})$ patří $\lambda \in \mathbb{C}$ právě tehdy, je-li buď *vlastní hodnotou nekonečné násobnosti*, nebo $(A_\lambda - \lambda I)^{-1}$ je *neomezený operátor*, kde A_λ je

část A v prostoru $\text{Ker}(A - \lambda I)^\perp$. (Symetrie A je zde využita k tomu, že A je jádrem $A - \lambda I$ redukován, díky čemuž konstrukce A_λ má smysl.)

Druhá část formulace umožňuje být prvkem σ_{ess} i některým vlastním hodnotám konečné násobnosti. To v případě, že by stále byly součástí přibližně bodového spektra operátoru A_λ , který z A vznikne, odstraníme-li vlastní podprostor příslušející λ . Jedná se přesně o ty vlastní hodnoty, které jsou současně **hromadnými body** a.p. spektra A , protože jejich přítomnost v $\sigma_{\text{ap}}(A)$ je i po odstranění vlastního prostoru stále zaručena uzavřeností množiny. Jediné body, které jsou v $\sigma_{\text{ap}}(A)$ oproti $\sigma_{\text{ess}}(A)$ navíc, jsou tedy *izolované* vlastní hodnoty *konečné* násobnosti. Tato množina se nazývá *diskrétní spektrum* $\sigma_d(A)$.

Pomocí esenciálního, příp. diskrétního spektra můžeme přeformulovat předchozí výsledek. Pro uzavřené symetrické rozšíření A' uzavřeného symetrického operátoru A platí

- $\sigma_p(A') \supset \sigma_p(A)$,
- $\sigma_{\text{ess}}(A') \supset \sigma_{\text{ess}}(A)$,

v případě konečných indexů defektu $n_\pm(A)$ konkrétněji

- $\sigma_d(A') \supset \sigma_d(A)$, protože z vlastní hodnoty konečné násobnosti nemůže vzniknout nekonečné násobnosti nebo z izolované neizolovaná,
- $\sigma_{\text{ess}}(A') = \sigma_{\text{ess}}(A)$, protože množina se nemůže zvětšit ze stejného důvodu, jako nemohla $\sigma_{\text{ap}} \setminus \sigma_p$, ale zmenšit se také nemůže.

Poslední rovnice je velice důležitá: pro $A \in \mathcal{L}_{\text{cs}}(\mathcal{H})$ s konečnými indexy defektu má **každé jeho $\mathcal{L}_{\text{cs}}$ rozšíření esenciální spektrum stejné a může se lišit jen v diskrétní části.**

Poznámka: Inkluze pro σ_p , σ_{ap} a σ_{ess} platí pro *jakékoli* uzavřené rozšíření *jakéhokoli* uzavřeného operátoru, symetrie nehraje roli. Všechny množiny jsou určeny existencí nějakých vektorů nebo posloupností vektorů v definičním oboru operátoru, která se v rozšíření nemůže pokazit.

Stabilita esenciálního spektra

Esenciální spektrum má ještě jeden speciální význam pro **samosdružené** operátory s poruchou, například operátory energie. Platí (bez důkazu, viz věta 10.4.9 a komentář k §10.4):

Věta. Nechť $A \in \mathcal{L}_{\text{sa}}(\mathcal{H})$, nechť C je *relativně kompaktní* vůči A . Pak $\sigma_{\text{ess}}(A + C) = \sigma_{\text{ess}}(A)$.

Relativní kompaktnost je zde definována analogicky relativní omezenosti (viz 25.3.): C je relativně kompaktní vůči A , je-li $CR_A(\mu)$ kompaktní operátor pro libovolné $\mu \in \rho(A)$ (pokud platí pro jednu hodnotu, platí již pro všechny díky rezolventním formulím).

Esenciální spektrum je nedocenitelným pomocníkem v argumentaci, jak vypadá spojitá část spektra pozorovatelných, protože jej stačí najít v nějaké jednodušší situaci (symetrický operátor před rozšířením, operátor bez poruchy) a dohledat jen vlastní vektory. Příklady uvidíme na cvičení.

Soubory komutujících pozorovatelných

Uvažujme samosdružené operátory $A_1, \dots, A_n$ vzájemně komutující podle naší definice z minula – tedy, že jejich spektrální míry jsou tvořeny komutujícími projektory.

Pro množinu výsledků Δ tvaru kartézského součinu, $\Delta = \Delta_1 \times \dots \times \Delta_n$, je pravděpodobnost naměření hodnot A_j v intervalech Δ_j nezávislá na pořadí měření, stejně jako stav po měření – to již dobře víme z kvantové mechaniky. Tato vlastnost se nazývá *kompatibilitou* pozorovatelných veličin. Ukážeme, že kompatibilita je komutací ekvivalentní, pro dva operátory a čistý stav E_φ – zobecnění je přímočaré. Pravděpodobnost naměření hodnoty A_1 v intervalu Δ_1 následovaného naměřením A_2 v intervalu Δ_2 je dána

$$\begin{aligned} w(A_1, \Delta_1; A_2, \Delta_2; \varphi) &= \text{Tr}(E_{A_2}(\Delta_2)W') w(A_1, \Delta_1; E_\varphi) = \text{Tr}(E_{A_2}(\Delta_2) \underbrace{E_{A_1}(\Delta_1)E_\varphi E_{A_1}(\Delta_1)}_{w(A_1, \Delta_1; E_\varphi)W'}) = (E_1\varphi, E_2E_1\varphi) \\ &= (\varphi, E_1E_2E_1\varphi), \end{aligned} \quad (1)$$

kde $E_j = E_{A_j}(\Delta_j)$, a v opačném pořadí $(\varphi, E_2E_1E_2\varphi)$. Evidentně pro komutující operátory se pravé strany rovnají a také vychází stejný stav po měření. Naopak je-li rovnost splněna pro každé φ , pak operátor $C = E_1E_2E_1 - E_2E_1E_2$ je nulový. Ovšem pro $B = E_1E_2 - E_2E_1$ je

$$B^*B = E_2E_1E_2 - E_2E_1E_2E_1 - E_1E_2E_1E_2 + E_1E_2E_1 = (E_1 - E_2)C = 0, \quad (2)$$

což nenechává jinou možnost, než že operátory ze spektrálních měř A_1 a A_2 , a potažmo A_1 a A_2 , komutují.

Pro n -tici vzájemně komutujících operátorů $A_1, \dots, A_n$ můžeme projektory dané těmito mírami sloučit do stejné komutující množiny. Lze však i více – sestavit projektorovou míru E , z níž každý A_j lze psát jako integrál $\int_X f_j dE$ s nějakou funkcí f_j . Pro tuto konstrukci můžeme volit $X = \mathbb{R}^n$ a projektorovou míru E definovat na n -rozměrných intervalech

$$E(J_1 \times \dots \times J_n) = E_{A_1}(J_1)E_{A_2}(J_2) \dots E_{A_n}(J_n). \quad (3)$$

Rozšíření na plnohodnotnou míru pak probíhá stejně jako v případě konstrukce míry z rozkladu jednotky – detaily jsme neuváděli, ale existuje a je jednoznačné. Nazývá se potom *direktním součinem* projektorových měř $E_{A_1}, \dots, E_{A_n}$.

Tato projektorová míra pak – v zobecněném pojetí postulátu, abychom nemuseli hledat nějaký zástupný samosdružený operátor – umožňuje mluvit o současných měřeních operátorů $\{A_j\}_{j=1}^n$. Tato formulace přidává oproti měření v jakémkoli pořadí navíc možnosti binárních měření na podmnožinách $\Delta \in \mathcal{B}^n$, kterých nelze dosáhnout sekvencí měření jednotlivých z nich: příkladem může být pozorování vzdálenosti od počátku souřadnic, kde bychom za Δ volili objem mezi dvěma sférami. Značíme pak

$$w(\Delta, \{A_1, \dots, A_n\}; W) := \text{Tr}(E(\Delta)W), \quad W' = \frac{E(\Delta)WE(\Delta)}{\text{Tr}(E(\Delta)W)}. \quad (4)$$

Funkce komutujících samosdružených operátorů

Stejná projektorová míra na $\mathbb{R}^n$ se dá použít k účelu definování funkcí více komutujících samosdružených operátorů: definujeme

$$f(A_1, \dots, A_n) := \int_{\mathbb{R}^n} f(x_1, \dots, x_n) dE(x_1, \dots, x_n) \quad (5)$$

pro každou E -skoro všude definovanou borelovskou funkcí f . (Stačí, aby byla definovaná na kartézském součinu spekter.)

Pro funkce komutujících operátorů platí několik logických závěrů, které jsou analogické dřívějším výsledkům pro podobné konstrukce. Například dosazení A_1, A_2 do funkcí tvaru $f(x, y) = g(x) + h(y)$ či $f(x, y) = g(x)h(y)$ může dát operátor „o uzavěr“ širší než součet, resp. součin operátorů $g(A_1)$ a $h(A_2)$ – pro příklad si představme dosazení $A_2 = A_1$ do funkcí $x - y$ či xy^{-1} . Přibývá logické, ale ne automatické pravidlo, že pro $f(x, y) = g(x)$ vychází $f(A, A')$ stejně jako $g(A)$.

Mezi potenciálně důležité aplikace patří, že $f(Q_1, \dots, Q_n)$ dává operátor násobení funkcí $f(x_1, \dots, x_n)$ a že dosazení složek hybnosti do funkce $\sum_j x_j^2$ dává operátor kinetické energie volné částice, i když k oběma těmto operátorům jsme došli již dříve jinými metodami. Tím spíše ale mohou oba příklady sloužit pro lepší představu, jak obecná funkce více proměnných v operátorech může v praxi vypadat.

Úplné soubory komutujících samosdružených operátorů

Soubor komutujících samosdružených operátorů $\mathcal{S} = (A_1, \dots, A_n)$ nazveme úplným, jestliže libovolná další pozorovatelná, která by s nimi byla kompatibilní, je již rovna nějaké funkci $A_1, \dots, A_n$. Omezujeme se zde na konečné soubory, což z hlediska matematické formulace není univerzální, ale pro praktické účely zcela stačí (n je obvykle 1, 2, 3, 4).

Důležitá formulace ekvivalentní této na **separabilním** $\mathcal{H}$ je taková, že $\mathcal{S}$ je ÚSKO, jestliže operátory, které komutují se všemi prvky $\mathcal{S}$, komutují také mezi sebou. To je algebraicky vyjádřeno podmínkou, že každý prvek *komutantu* množiny $\mathcal{S}$ patří také do komutantu tohoto komutantu, tedy *bikomutantu* $(\mathcal{S}')' = \mathcal{S}''$.

Proč tyto dvě formulace jsou ekvivalentní, je poměrně hluboké tvrzení, ale pro konečné $\mathcal{S}$ lze shrnout následovně:

1. Jestliže $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ komutuje s operátorem A , pak komutuje také s libovolnou funkcí operátoru A . To znamená, že každé $f(A) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ patří do *komutantu komutantu* jednoprvkové množiny $\{A\}$. (Z technických důvodů do pojmu „komutant“ zahrnujeme jen omezené operátory.)
2. Na **separabilním** $\mathcal{H}$ každý samosdružený operátor, který komutuje s každým takovým B , lze napsat jako nějaká funkce operátoru A . Toto velmi netriviální tvrzení (10.5.9) je historicky výsledkem prací mnoha průkopníků funkcionální analýzy a není teď v našich možnostech zkoumat, proč platí.
3. Pro množinu více než jednoho operátoru roli komutace s A nahrazuje komutace s projektorovou mírou získanou direktním součinem spektrálních měr $A_1, \dots, A_n$, rozšířit potom předchozí výsledek i na tento případ již není náročné.

Co si zapamatujeme, je, že existuje dobrý důvod v otázkách ÚSKO vyžadovat separabilitu.

Setkáme se ještě s třetí ekvivalentní formulací ÚSKO. (Všechny tři shrnuje v knize věta 14.2.1, ale její důkaz se opírá o obsah několika předchozích kapitol.) Soubor $\mathcal{S}$ je úplný právě tehdy, když existuje tzv. cyklický vektor $\varphi \in \mathcal{H}$ s vlastností, že množina $\{A\varphi \mid A \in \mathcal{S}''\}$ je v $\mathcal{H}$ totální. Co si pod touto abstraktní formulací představit?

Podle předchozího je každý operátor $A \in \mathcal{S}''$ vyjádřitelný jako funkce operátorů $A_1, \dots, A_n$. Protože z algebraických předpokladů je omezený, je možné jej vyjádřit jako integrál nějaké $f \in L^\infty(\mathbb{R}^n, dE)$ přes společnou projektorovou míru E . Jestliže výrazy

$$\left\{ \int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) \varphi \mid f \in L^\infty(\mathbb{R}^n, dE) \right\} \quad (6)$$

jsou husté v $\mathcal{H}$ a lze se tedy jimi blížit k jakémukoli $\psi \in \mathcal{H}$, budeme chtít ukázat, že existuje funkce f_ψ , ne již nutně omezená, tedy jen $f_\psi \in \Phi_E$, že $\mathcal{I}_E(f_\psi)\varphi = \psi$.

Lemma 1. Je-li φ cyklický vektor souboru $\mathcal{S}$, pak pro každou E -nenulovou množinu M je $\mu_\varphi(M) \neq 0$.

Důkaz. Uvažujme $M \in \mathcal{B}^n$ takovou, že $E(M) \neq 0$, ale $E(M)\varphi = 0$. Pro libovolnou funkci $f \in L^\infty(\mathbb{R}^n, dE)$ a každé $\chi \in \mathcal{H}$ je

$$\left(E(M)\chi, \int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) \varphi \right) = \left(\chi, E(M) \int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) \varphi \right) = \left(\chi, \int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) E(M)\varphi \right) = 0, \quad (7)$$

takže $\text{Ran } E(M)$ je ortogonální na $A\varphi$ pro každé $A \in \mathcal{S}''$, což je spor s totalitou. $\square$

Lemma 2. Každá funkce $f \in L^2(\mathbb{R}^n, d\mu_\varphi)$ splňuje $f \in \Phi_E$, vektor φ patří do $D(f(A_1, \dots, A_n))$ a platí

$$\|\mathcal{I}_E(f)\varphi\|^2 = \|f\|_{\mu_\varphi}^2, \quad (8)$$

takže zobrazení $V : L^2(\mathbb{R}^n, d\mu_\varphi) \rightarrow \mathcal{H} : f \mapsto \mathcal{J}_E(f)\varphi$ je izometrie.

Důkaz. Míry E a μ_φ mají jistě stejné σ -algebry. Pokud je f μ_φ -s.v. definovaná, je také E -s.v. definovaná podle lematu 1. To jsou předpoklady pro $f \in \Phi_E$. Pro $f \in L^2(\mathbb{R}^n, \mu_\varphi)$ dále

$$\left\| \int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) \varphi \right\|^2 = \left(\int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) \varphi, \int_{\mathbb{R}^n} f dE \varphi \right) = \left(\varphi, \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^2 dE(x) \varphi \right) = \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^2 d\mu_\varphi(x) < \infty, \quad (9)$$

což odpovídá na oba zbývající body, protože $\int |f|^2 d\mu_\varphi < \infty$ je přímo předpisem definičního oboru $f(A_1, \dots, A_n)$.

Po tomto důkazu si již stačí uvědomit, že z předpokladu ÚSKO do obrazu izometrie V patří množina totální v $\mathcal{H}$ (obraz množiny $L^\infty(\mathbb{R}^n, d\mu_\varphi)$, která díky konečnosti míry je $\subset L^2$), takže koncovým prostorem je jistě celé $\mathcal{H}$.

Definici ÚSKO mohou dokonce splňovat i některé *jednočlenné* soubory $\mathcal{S} = \{A_1\}$. Podmínka, že měření A nebo jeho funkcí dokáže v principu rozlišit mezi libovolnou dvojicí lineárně nezávislých vektorů, je zobecněním koncepce čistě bodového a *nedegenerovaného* spektra. Říkáme, že takový operátor má **jednoduché spektrum**.

Poslední podmínka pro ně znamená, že existuje vektor $\varphi \in \mathcal{H}$ takový, že množina $\{E_{A_1}(M)\varphi \mid M \in \mathcal{B}^1\}$ je totální v $\mathcal{H}$ (zde se z historických důvodů nenazývá cyklický, ale generující vektor). Náš výsledek říká, že musí mít nenulovou projekci do všech $\text{Ran } E_{A_1}(M)$ a poté, že z něj libovolného $\psi \in \mathcal{H}$ můžeme dosáhnout jako $f_\psi(A_1)\varphi$. Ukážeme, že tuto vlastnost má operátor polohy na $\mathbb{R}$: za φ může sloužit libovolná $L^2(\mathbb{R})$ funkce, která je všude nenulová, například $\varphi(x) = 1/(x^2 + 1)$. Protože funkce operátoru Q jsou operátory násobení funkcí $f(Q) = T_f$, stačí pro obecné $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ volit $f_\psi(x) = \psi(x)/\varphi(x)$.

Jestliže podmínku $\{E_{A_1}(M)\varphi \mid M \in \mathcal{B}^1\}$ totální v $\mathcal{H}$ přijmeme jako definici jednoduchého spektra, pak takové operátory existují **pouze** na separabilních prostorech, protože tato množina je spočetně generovaná intervaly s krajními body v $\mathbb{Q}$.

Pro kvantovou fyziku je nakonec již jen důležité, jak pro daný stavový prostor získávat ÚSKO z jeho znalosti na nějakých jednodušších prostorech. K tomu slouží následující užitečná pravidla:

- Q_μ je operátor s jednoduchým spektrem na libovolném prostoru $(X, d\mu)$ se σ -konečnou mírou (automaticky zahrnuje polohu na intervalech v $\mathbb{R}$ a oblastech v $\mathbb{R}^n$),
- Jedná se opět o unitární ekvivalent: například operátor hybnosti na $\mathbb{R}$ má také jednoduché spektrum.
- Každý operátor s nedegenerovaným čistě bodovým spektrem na separabilním $\mathcal{H}$, například Hamiltonián jednorozměrného lineárního harmonického oscilátoru (LHO), má jednoduché spektrum a může tak sám sloužit za ÚSKO.
- pokud $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ jsou ÚSKO na $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$, pak množina

$$\{A \otimes I \mid A \in \mathcal{S}_1\} \cup \{I \otimes A' \mid A' \in \mathcal{S}_2\} \quad (10)$$

je ÚSKO na $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ (14.2.5–9, důkaz opět zabíhá do teorie operátorových algeber).

Pomocí nich oprávníme zcela všechny případy ÚSKO, se kterými jsme se setkali v kurzu O2KVAN, O2KVANM2.

ÚSKO a reprezentace stavu

Zakončíme krátkou poznámkou o reprezentaci vlnové funkce. V kvantové mechanice jste mluvili o polohové, hybnostní, energetické (LHO) reprezentaci a nemusí být zřejmé, proč pro prvky stejného stavového prostoru $L^2(\mathbb{R})$ v některých potřebujeme funkci (tj. „spojité“ mnoho hodnot) a v jiných nám stačí posloupnost („spočetné“ mnoho).

Každá z takových reprezentací se opírá o některý ÚSKO, konkrétně zmíněné příklady o jednorázkové soubory, tedy každý o nějakou pozorovatelnou A s jednoduchým spektrem. Obecný vektor potom můžeme hledat v krocích, že z její projektorové míry „poskládáme“ operátor $\int_{\mathbb{R}} f(x) dE_A(x)$ a aplikujeme na generující vektor φ .

Funkce f jsme viděli, že je třeba brát z prostoru $L^2(\mathbb{R}, d\mu_\varphi)$, přičemž nosičem míry μ_φ je spektrum operátoru A (je nosičem E_A , ale lemma 1 dává implikaci $\mu_\varphi(M) = 0 \Rightarrow E_A(M) = 0$ a opačná je triviální), takže závisí jen na hodnotách f na $\sigma(A)$. Právě jsme ovšem měli možnost vidět, že i operátory s jednoduchým spektrem mohou spektrum pořád mít stejně dobře diskrétní i spojitě.

Pro operátor Q je

$$\mu_\varphi(M) = (\varphi, E_Q(M)\varphi) = (\varphi(x), \chi_M(x)\varphi(x)), \quad d\mu_\varphi(x) = |\varphi(x)|^2 dx \quad (11)$$

a podmínka $f \in L^2(\mathbb{R}, d\mu_\varphi)$ tedy je ekvivalentní tomu, že $\tilde{f}(x) := f(x)\varphi(x) \in L^2(\mathbb{R})$.

Pro LHO je míra soustředěna na spočetném spektru a proto podmínka L^2 -integrability funkce f znamená

$$\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 d\mu_\varphi(x) = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} |f(\lambda)|^2 (\varphi, E_A(\{\lambda\})\varphi) = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} |f(\lambda)|^2 \|E_\lambda \varphi\|^2 \quad (12)$$

a převádí se na ℓ^2 -podmínku jisté posloupnosti.

Po vymezení se na L^2 -integrabilní funkce a ℓ^2 -integrabilní posloupnosti je zřejmé, že oba druhy objektů patří do vzájemně izometrických prostorů, a tedy je mezi nimi bijektivní korespondence.

Feynmanův integrál

V dnešní hodině zkusíme poskytnout základní oprávnění výpočtu propagátoru pomocí integrálu Feynmanova tvaru. Myšlenka je založena na větě známé jako Trotterova formule:

Věta (11.2.1). Nechť $A, B \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$ takové, že $C = \overline{A + B}$ je také samosdružený. Potom pro každé $t \in \mathbb{R}$ platí

$$e^{itC} = \text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} \left(e^{itA/n} e^{itB/n} \right)^n. \quad (1)$$

Tento výsledek má přímočaré využití pro Hamiltoniány tvaru $P^2/(2m) + V$ (případně s uzávěrem): umožňuje k propagátoru e^{-itH} dospět střídavou aplikací propagátoru odpovídajícího samotné kinetické energii a jiného odpovídajícího samotnému V .

Propagátor volné částice v $L^2(\mathbb{R}^d)$ máme z minula,

$$(U_1(t)\psi)(\mathbf{x}) = \text{l.i.m.}_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi it} \right)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left(\frac{im}{2t} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2\right) \psi(\mathbf{y}) \eta_n(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (2)$$

a pro operátor $V = T_{v(\mathbf{x})}$ je exponenciála snadná,

$$U_2(t) = e^{-itV} : \quad (U_2(t)\psi)(\mathbf{x}) = e^{-itv(\mathbf{x})} \psi(\mathbf{x}). \quad (3)$$

Pro součin U_1 a U_2 vyhodnocených v t/N dostáváme předpis

$$(U_1(t/N)U_2(t/N)\psi)(\mathbf{x}) = \text{l.i.m.}_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi it} \right)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left(\frac{imN}{2t} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2 - \frac{it}{N} v(\mathbf{y})\right) \psi(\mathbf{y}) \eta_n(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (4)$$

Pro druhou mocninu operátoru by to znamenalo tuto $L^2(\mathbb{R}^d)$ funkci nalézt a dosadit do stejného předpisu znovu. Nicméně vzhledem k tomu, že se jedná o aplikaci spojitého ($\Leftarrow$ unitárního) operátoru, limitní přechod v L^2 -normě, vyjádřený l.i.m., můžeme provést i na výsledcích vnějšího operátoru. Proto

$$((U_1(t/N)U_2(t/N))^2\psi)(\mathbf{x}) = \text{l.i.m.}_{n_1 \rightarrow \infty} \text{l.i.m.}_{n_2 \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi it} \right)^{2d/2} \int_{\mathbb{R}^d} K_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \left(\int_{\mathbb{R}^d} K_2(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \psi(\mathbf{z}) \eta_{n_2}(\mathbf{z}) d\mathbf{z} \right) \eta_{n_1}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (5)$$

kde

$$K_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp\left(\frac{imN}{2t} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2 - \frac{it}{N} v(\mathbf{y})\right). \quad (6)$$

Díky Fubiniově větě můžeme vnořenou integraci přepsat jako integrál přes dvě proměnné z $\mathbb{R}^d$ a integrandy sloučit do jednoho. Opakováním této myšlenky dospíváme ke vzorci

$$\begin{aligned} (U(t)\psi)(\mathbf{x}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} ((U_1(t/N)U_2(t/N))^N \psi)(\mathbf{x}) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi it} \right)^{Nd/2} \text{l.i.m.}_{n_1, \dots, n_N \rightarrow \infty} \int_{(\mathbb{R}^d)^{\times N}} K_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1) K_N(\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2) \dots K_N(\mathbf{y}_{N-1}, \mathbf{y}_N) \times \\ &\quad \psi(\mathbf{y}_N) \eta_{n_1}(\mathbf{y}_1) \dots \eta_{n_N}(\mathbf{y}_N) d\mathbf{y}_1 \dots d\mathbf{y}_N. \end{aligned} \quad (7)$$

V posledním vzorci můžeme ještě sloučit funkce

$$K_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1) \dots K_N(\mathbf{y}_{N-1}, \mathbf{y}_N) = \exp\left(\frac{imN}{2t} \sum_{k=1}^N \|\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_{k-1}\|^2 - \frac{it}{N} \sum_{k=1}^N v(\mathbf{y}_k)\right), \quad (8)$$

kde $\mathbf{y}_0 := \mathbf{x}$.

Toto je vyjádření Feynmanova integrálu platné pro jakýkoli Hamiltonián tvaru součtu kinetické energie a potenciálového členu, který je operátorem násobení funkcí, dokud se jedná o (v podstatě) samosdružený operátor.

Souvislost se známějším dráhovým integrálem je taková, že (8) lze psát způsobem

$$\begin{aligned} K_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1) \dots K_N(\mathbf{y}_{N-1}, \mathbf{y}_N) &= \exp \left(\frac{imt}{2N} \sum_{k=1}^N \|\mathbf{u}_k\|^2 - \frac{it}{N} \sum_{k=1}^N v(\mathbf{y}_k) \right) \\ &= \exp \left(\frac{it}{N} \sum_{k=1}^N \left(\frac{m\|\mathbf{u}_k\|^2}{2} - v(\mathbf{y}_k) \right) \right) \end{aligned} \quad (9)$$

kde

$$\mathbf{u}_k := \frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_{k-1}}{t/N} \quad (10)$$

odpovídá rychlosti rovnoměrného přímočarého pohybu mezi body $\mathbf{y}_{k-1}$ a $\mathbf{y}_k$ za čas t/N . Vzorec (7) tedy popisuje limitu „dráhových integrálů“, kde pro každé N uvažujeme lomenou čáru o $N + 1$ vrcholech v ekvidistančních časech mezi 0 a t . Přitom pro „Lagrangian“ $m\|\mathbf{u}_k\|^2/2 - v_k$ je třeba rychlost dosazovat z přímých úseků, ale potenciál vyhodnocovat ve vrcholech čáry. Taková funkce, po částech konstantní na intervalech $(0, t/N), (t/N, 2t/N), \dots, (t - t/N, t)$, by pak v integrálu od 0 do t skutečně dala exponent vystupující v (8). Toto je smysl, ve kterém je třeba uvažovat dráhovou integraci, pokud chceme vyloučit pochyby, zda konverguje.

Poznámka: o akci

Fyzikální výrazy jsou v předchozím odstavci uvedené v uvozovkách zcela záměrně. Fyzikálně by akce podél dráhy $\gamma(s)$, $s \in \langle 0, t \rangle$ byla určena vzorcem

$$S(\gamma) = \int_0^t \left(\frac{m}{2} \|\dot{\gamma}(s)\|^2 - V(\gamma(s)) \right) ds. \quad (11)$$

I pokud bychom doslova uvažovali lomenou čáru dosahující vrcholů $\mathbf{y}_0$ až $\mathbf{y}_N$ v časech s odpovídajících celočíselným násobkům t/N mezi 0 a t , dostaneme výraz

$$S(\gamma) = \sum_{k=1}^N \frac{Nm\|\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_{k-1}\|^2}{2t} - \int_0^t V(\gamma(s)) ds, \quad (12)$$

který se od exponentu na pravé straně (8) liší v potenciálovém členu. Je tedy důležité tento rozdíl udržovat na paměti. Může se stát, a pro mnoho potenciálů to tak dopadne, že pokud ve (7) nahradíme integrační jádro vzorcem

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N) := \exp(iS(\gamma)), \quad (13)$$

kde γ vyjadřuje výše popsanou lomenou čáru, hodnota limity zůstane, i když jednotlivé konvergenty se změní. Výsledek pak ale už nemůžeme opravňovat Trotterovou formulí, díky čemuž získá dodatečné předpoklady. Pro jaké případy tomu tak je, je předmětem celých monografií.

Poznámka: o integraci

Poslední poznámka, kterou si k fyzikální formulaci dovolíme, se týká pojmu integrace podél všech spojitých drah, tedy možnosti zápisu výrazu tvaru (7) bez limity přes N . Je poměrně známým varováním, že takový integrál nemá dobře definovanou míru. Podíváme se na jeden argument, proč tomu tak je.

Za prostor všech funkcí, přes které bychom rádi integrovali, můžeme zvolit $H = L^2((0, t), \mathbb{R}^d)$. Jedná se o reálný Hilbertův prostor nekonečné dimenze. Máme tedy pojem míry a metriky, konkrétně vzdálenost dvou křivek

$$\rho(\beta, \gamma) = \sqrt{\int_0^t \|\beta(s) - \gamma(s)\|^2 ds} \quad (14)$$

má dobrou fyzikální interpretaci.

Z H můžeme udělat měřitelný prostor tak, že vybudujeme σ -algebru nad množinou všech koulí v H . Na tomto prostoru bychom chtěli zavést míru μ , která má vlastnosti:

1. pokud $M \subset H$ je omezená borelovská množina, pak $\mu(H) < \infty$,
2. míra je invariantní vůči posunu: $\mu(\gamma + M) = \mu(M)$.

Druhá vlastnost vyjadřuje, že stejné variace oproti různým křivkám by měly mít stejnou váhu.

V prostoru H ale snadno najdeme protipříklad: vzhledem k tomu, že má nekonečnou dimenzi, existuje nějaká ortonormální báze $(\varphi_n)_{n < \omega}$. Pro libovolné její dva prvky platí

$$\rho(\varphi_m, \varphi_n) = \sqrt{2}\delta_{mn}. \quad (15)$$

Koule o poloměru $1/2$ kolem každého φ_n jsou tedy vzájemně disjunktní: jsou příliš malé na to, aby se protnuly.

Vezměme množinu

$$M = \bigcup_{n < \omega} B_{1/2}(\varphi_n). \quad (16)$$

Každý její bod je vzdálen méně než $3/2$ od počátku, takže $M \subset B_{3/2}(0)$. Pokud ovšem míra μ má splňovat požadavky stanovené výše, musela by všem koulím o stejném poloměru přiřazovat stejnou konečnou hodnotu. To je však sporem s tím, že by mělo být

$$\mu(M) = \sum_{n < \omega} \mu(B_{1/2}(\varphi_n)) \leq \mu(B_{3/2}(0)) < \infty. \quad (17)$$

Tento argument neznamena, že by na H *nešla* zavést míra, ale dokázali jsme, že nemůže mít vlastnosti, na které jsme zvyklí z Lebesgueovy míry.

Čtvrtý postulát kvantové fyziky

Čtvrtý (a poslední) postulát – o složených systémech – vyslovíme nezvykle ve dvou oddělených částech.

Postulát 4a: Stavový prostor systému S složeného z konečného počtu podsystémů $S_1, \dots, S_N$ je tenzorovým součinem stavových prostorů těchto podsystémů, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$.

S touto částí a všemi jejími důsledky jsme velmi dobře obeznámeni. Zaslouží si snad jen jedinou poznámku, že vždy uvažuje složení *konečně mnoha* systémů. Důvodem pro absenci zobecnění na vyšší kardinality je jednoduše skutečnost, že většinou není zkoumat nekonečné počty částic fyzikálně opodstatněné. Případný zájem o rozšíření na $N \geq \omega$ by s sebou nesl potřebu dodefinovat tenzorový součin odpovídajícího počtu prostorů (čehož nelze dosáhnout iterativně součinem dvojic prostorů) a přestaly by platit některé záruky, které nám konečný tenzorový součin dává. Jednou z takových je, že uvažujeme-li prostory $\mathcal{H}_1, \dots, \mathcal{H}_N$ separabilní, pak je separabilní i jejich tenzorový součin – pro součin nekonečně mnoha prostorů toto může být porušeno.

Druhá část se týká systémů nerozlišitelných částic, ale budeme si pro ni potřebovat zavést několik prvků značení. Pokud náš složený systém (nebo nějaký jeho podsystém) je tvořen N identickými částmi, pak za stavové prostory $\mathcal{H}_1, \dots, \mathcal{H}_N$ dosazujeme N kopií stejného Hilbertova prostoru, označme jej $\mathcal{H}_1$. Je tedy

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1^{\otimes N} =: \mathcal{H}_{(N)}. \quad (1)$$

Pro $N \in \mathbb{N}$ budeme označovat $\mathcal{S}_N$ grupu permutací množiny $\{1, 2, \dots, n\}$. Pro prvek $\sigma \in \mathcal{S}_N$ a zvolený Hilbertův prostor $\mathcal{H}_1$ nechť U_σ označuje unitární operátor na $\mathcal{H}_{(N)}$ předepsaný vztahem

$$U_\sigma(\varphi_1 \otimes \dots \otimes \varphi_N) := \varphi_{\sigma(1)} \otimes \dots \otimes \varphi_{\sigma(N)}. \quad (2)$$

Pro libovolné dvě permutace $\sigma, \tau \in \mathcal{S}_N$ je $U_\sigma U_\tau = U_{\sigma \circ \tau}$, zobrazení $\sigma \mapsto U_\sigma$ je tedy unitární reprezentací grupy $\mathcal{S}_N$ na prostoru $\mathcal{H}_{(N)}$.

Pro stejnou volbu N a $\mathcal{H}_1$ označíme

$$S_N := \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} U_\sigma, \quad A_N := \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn } \sigma U_\sigma. \quad (3)$$

Podíváme se na nejvýznamnější vlastnosti této dvojice operátorů (na přednášce s důkazy):

1. Pro každé $N \in \mathbb{N}$ se jedná o dvojici projektorů.
2. Pro $N = 1$ je $S_1 = A_1 = I$. Pro $N > 1$ se jedná o vzájemně ortogonální projektory.
3. Platí $S_2 + A_2 = I$. Pro $N > 2$ však pouze $S_N + A_N \leq I$.
4. Pro každé $\sigma \in \mathcal{S}_N$ je

$$U_\sigma S_N = S_N, \quad U_\sigma A_N = \text{sgn } \sigma A_N. \quad (4)$$

Pro tvrzení, která budou platit obdobně pro S_N nebo A_N , budeme používat zástupný symbol P_N .

Postulát 4b: Stavový prostor N identických bosonů (resp. fermionů) s jednočásticovým stavovým prostorem $\mathcal{H}_1$ lze vymezit na podprostor $S_N \mathcal{H}_{(N)}$ (resp. $A_N \mathcal{H}_{(N)}$) prostoru $\mathcal{H}_{(N)} = \mathcal{H}_1^{\otimes N}$.

Části b) je potřeba rozumět tak, že ne všechny stavy na prostoru $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$, který by jinak předepisovala část a), jsou přípustnými stavy soustavy nerozlišitelných bosonů / fermionů: musí se jednat o statistické operátory redukované odpovídajícím projektorem P_N , jejichž obor hodnot spadá do $P_N \mathcal{H}_{(N)}$. (Pro čisté stavy to znamená, že stavový vektor musí být prvkem $P_N \mathcal{H}_{(N)}$.) Takové operátory je potom možné ztotožnit s jejich zúžením na posledně jmenovaný prostor. Tento prostor je, jakožto obor hodnot projektoru, uzavřeným prostorem, a se zúžením skalárního součinu z $\mathcal{H}_{(N)}$ je Hilbertův. Pro $N = 1$ není mezi $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_{(1)}$, $S_1 \mathcal{H}_{(1)}$ a $A_1 \mathcal{H}_{(1)}$ rozdíl.

Je samozřejmě potřeba zabývat se konzistencí takového zúžení. Ta se opírá o matematické vyjádření **principu nerozlišitelnosti** částic. Fyzikálně nerozlišitelnost znamená, že neexistuje pozorování, které by od sebe odlišilo

stavy $\varphi, \chi \in \mathcal{H}_{(N)}$, které splňují $\chi = U_\sigma \varphi$ pro nějakou permutaci $\sigma \in \mathcal{S}_N$. Matematicky tento požadavek vyjádříme tak, že pro každou *přípustnou* pozorovatelnou A , každou $\Delta \in \mathcal{B}^1$ a každý stav $\psi \in \mathcal{H}_{(N)}$ musí platit

$$\begin{aligned} w(\Delta, A; \psi) &= w(\Delta, A; U_\sigma \psi) \\ (\psi, E_A(\Delta) \psi) &= (U_\sigma \psi, E_A(\Delta) U_\sigma \psi) = (\psi, U_\sigma^{-1} E_A(\Delta) U_\sigma \psi). \end{aligned} \quad (5)$$

Díky obecnému kvantifikátoru $\forall \psi \in \mathcal{H}_{(N)}$ poslední řádka ale znamená, že $E_A(\Delta) - U_\sigma^{-1} E_A(\Delta) U_\sigma$ je nulový operátor, a potažmo, že $E_A(\Delta)$ a U_σ komutují. Nakonec, jestliže s operátorem U_σ komutuje každý prvek spektrální míry E_A , znamená to, že s ním komutuje i pozorovatelná A sama. Dostáváme tak hledané matematické vyjádření principu: **Přípustné pozorovatelné na systému N nerozlišitelných částic jsou takové, které komutují se všemi operátory U_σ , $\sigma \in \mathcal{S}_N$.**

Vraťme se tedy k otázce bezspornosti formulace části b) postulátu. Komutuje-li $A \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H}_{(N)})$ s operátory U_σ pro všechna $\sigma \in \mathcal{S}_N$, pak podle (3) komutuje také s projektory P_N . To je nutnou a postačující podmínkou pro to, aby jimi byla redukována. Pokud potom v nějaký okamžik vymezíme stav soustavy na vektor z prostoru daného částí b), je třeba si uvědomit, že jediné dva způsoby, jakými se v rámci naší (nyní již kompletně vyslovené) sady postulátů může měnit, je

- změna stavu po měření: $\tilde{W} = EWE / \text{Tr}(EW)$, kde $E = E_A(\Delta)$ pro nějakou pozorovatelnou A ,
- časový vývoj daný Schrödingerovou rovnicí, tedy pozorovatelnou H .

Jestliže *každá* pozorovatelná je vázána požadavkem reducibility na prostor $P_N \mathcal{H}_{(N)}$, pak totéž platí pro jejich projektorové míry a výsledek měření nemůže tento prostor opustit. Podobně rychle ukážeme, že vlastnost $P_N W = W P_N$ se přenáší i na dW/dt (pro H omezené, jinak s potřebnými úpravami) a předchozí závěr platí tak i pro časový vývoj.

V případě zahrnutí nerozlišitelných částic do popisovaného kvantového systému tak čtvrtý postulát omezuje obecnost prvního: ne každý ze stavů prostoru daného 4a) je přípustným stavem fyzikální soustavy a ne každý samosdružený operátor může popisovat nějakou přípustnou pozorovatelnou veličinu. Obě omezení ale můžeme obejít, pokud se vymezíme na podprostor předepsaný 4b).

Prostory funkcí

Uvažujme $\mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}^3)$. Platí, že N -násobným tenzorovým součinem tohoto prostoru sama se sebou dostaneme prostor $\mathcal{H}_{(N)} = L^2(\mathbb{R}^{3N})$. Tenzorovým součinem funkcí $\varphi_1, \dots, \varphi_N$ z $L^2(\mathbb{R}^3)$ dostaneme funkci

$$\varphi : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{C} : \varphi(x_1, \dots, x_N) = \varphi_1(x_1) \varphi_2(x_2) \dots \varphi_N(x_N). \quad (6)$$

Operátor U_σ , $\sigma \in \mathcal{S}_N$ na ni působí dle vzorce (2) jako

$$(U_\sigma \varphi)(x_1, \dots, x_N) = \varphi_{\sigma(1)}(x_1) \dots \varphi_{\sigma(N)}(x_N) = \varphi_1(x_{\sigma^{-1}(1)}) \dots \varphi_N(x_{\sigma^{-1}(N)}) = \varphi(x_{\sigma^{-1}(1)}, \dots, x_{\sigma^{-1}(N)}) \quad (7)$$

Poslední vzorec má zobecnění na celé $\mathcal{H}_{(N)}$ a snadno nahlédneme, že toto rozšíření představuje současně lineární rozšíření (7) na $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$ a spojitě rozšíření na $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$. Předpis

$$(U_\sigma \psi)(x_1, \dots, x_N) = \psi(x_{\sigma^{-1}(1)}, \dots, x_{\sigma^{-1}(N)}) \quad (8)$$

popisuje tedy akci U_σ na libovolnou $\psi \in \mathcal{H}_{(N)}$.

K předpisu obecného vektoru z $S_N \mathcal{H}_{(N)}$ můžeme dojít přes vlastnost (4) snáze než přes definici (3). Taková funkce totiž musí splňovat

$$\xi = S_N \xi = U_\sigma S_N \xi, \quad \forall \sigma \in \mathcal{S}_N \quad \Rightarrow \quad \forall \sigma \in \mathcal{S}_N : \xi(x_{\sigma(1)}, x_{\sigma(2)}, \dots, x_{\sigma(N)}) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \xi(x_1, \dots, x_N). \quad (9)$$

Prostor $S_N \mathcal{H}_{(N)}$ je tedy tvořen funkcemi, které jsou s.v. symetrické vůči libovolné záměně svých argumentů. Analogicky pro $\eta \in A_N \mathcal{H}_{(N)}$

$$\eta = A_N \eta = \text{sgn } \sigma U_\sigma \eta, \quad \forall \sigma \in \mathcal{S}_N \quad \Rightarrow \quad \forall \sigma \in \mathcal{S}_N : \eta(x_{\sigma(1)}, x_{\sigma(2)}, \dots, x_{\sigma(N)}) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \text{sgn } \sigma \eta(x_1, \dots, x_N). \quad (10)$$

Protože další akce S_N , resp. A_N na ξ , resp. η nechává tyto vektory invariantní, jsou podmínky na pravé straně pro náležitost do $P_N \mathcal{H}_{(N)}$ současně nutné a postačující.

Fockův prostor

Čtvrtý postulát dává nástroje pro popis systému složeného z pevného počtu částic, ale ve fyzice mikrosvěta není nouze o situace, ve kterých se počet částic nezachovává. Nemusíme kvůli tomu tvrzení postulátu měnit. Pouze N -částicový prostor použijeme pro konstrukci většího stavového prostoru, který bude zahrnovat i jiné stavy. Pokud uvažujeme všechna $N \in \mathbb{N}_0$, získáme takto Fockův prostor.

V rámci této kapitoly budeme uvažovat, že popisujeme soubory stejného jednoho druhu elementární částice. Pokud při interakcích vznikají a zanikají různé druhy částic, je potřeba sestavit Fockův prostor pro každý z nich zvlášť a uvažovat systém vzniklý složením *těchto* komponent.

Nekonečný direktní součet prostorů a operátorů

Pro konstrukci Fockova prostoru se potřebujeme blíže seznámit s rozšířením koncepce direktního součtu prostorů na nekonečný počet.

Uvažujme pro tento účel nějakou indexovou množinu I a zobrazení, které každému prvku $\alpha \in I$ přiřazuje nějaký Hilbertův prostor $\mathcal{H}_\alpha$ (ne nutně různé). Direktní součet sestavíme následovně:

$$\bigoplus_{\alpha \in I} \mathcal{H}_\alpha =: \mathcal{H}_\oplus := \left\{ X: \alpha \in I \mapsto \mathcal{H}_\alpha \mid \sum_{\alpha \in I} \|X(\alpha)\|_{\mathcal{H}_\alpha}^2 < \infty \right\}. \quad (1)$$

Zobrazení X si můžeme představit jako zobecnění posloupnosti „ α -tý vektor z $\mathcal{H}_\alpha$ “, pokud by I byla přirozená čísla. Podle našich pravidel pro zobecněné sumy v sobě druhá podmínka zahrnuje podmínku, že každá taková zobecněná posloupnost má nejvýše spočetný počet prvků, které *nejsou* nulový vektor.

Na prostoru $\mathcal{H}_\oplus$ zavedeme skalární součin jako

$$(X, Y) := \sum_{\alpha \in I} (X(\alpha), Y(\alpha))_{\mathcal{H}_\alpha}. \quad (2)$$

Tato suma má také nejvýše spočetný počet nenulových členů a její absolutní integrabilita je zaručena Cauchyovou a Hölderovou nerovností spolu s definicí (1), což zajišťuje korektnost definice. Skalární součin (2) indukce normu

$$\|X\|^2 = \sum_{\alpha \in I} \|X(\alpha)\|_{\mathcal{H}_\alpha}^2, \quad (3)$$

rovněž podle předpokladu dobře definovanou pro každý prvek.

Přesvědčíme se ještě o uzavřenosti vůči této normě. Pokud uvažujeme posloupnost $(X_n)_{n=1}^\infty$ vektorů z $\mathcal{H}_\oplus$, můžeme najít sjednocení všech podmnožin $\alpha \in I$, na kterých některé ze zobrazení X_n je nenulové – jako spočetné sjednocení nejvýše spočetných množin je to také nejvýše spočetná množina. Díky konstrukci normy zaručuje Cauchyova podmínka posloupnosti $(X_n)_{n=1}^\infty$ skutečnost, že v každém bodě $\alpha \in I$ posloupnosti $(X_n(\alpha))_{n=1}^\infty$ konvergují zvlášť. Lze tedy z těchto individuálních limit, kterých je nejvýše spočetně mnoho, sestavit nové zobrazení X , doplněné všude jinde nulami. Přímočaré dosazení do patřičných vzorců ukáže, že X splňuje podmínku (1) a v normě (3) je limitou $(X_n)_{n=1}^\infty$.

Takto sestavený nekonečný direktní součet splňuje následující vlastnosti, které bychom od operace $\oplus$ očekávali:

- podprostory dané zobrazeními X , která jsou nenulová v nejvýše jednom, pevně zvoleném, bodě $\alpha \in I$, jsou uzavřené, vzájemně ortogonální podprostory $\tilde{\mathcal{H}}_\alpha \subset \mathcal{H}_\oplus$, izomorfní $\mathcal{H}_\alpha$,
- rozklad libovolného vektoru $X \in \mathcal{H}_\oplus$ do těchto $\tilde{\mathcal{H}}_\alpha$ je jednoznačný a daný ortogonálními projekcemi,
- druhá mocnina $\|X\|$ je součtem druhých mocnin norem těchto projekcí (zobecněná Parsevalova rovnost),
- z projekcí $X \in \mathcal{H}_\oplus$ na $\tilde{\mathcal{H}}_\alpha$ je nejvýše spočetně mnoho nenulových a jejich součet konverguje k X (zobecněný Fourierův rozvoj),
- jestliže množina I je konečná, podmínka v (1) se stane triviálně splněnou a tato obecná konstrukce dá výsledek identický dříve zavedenému direktnímu součtu Hilbertových prostorů.

Zcela analogicky potom můžeme konstruovat direktní součet libovolného systému vzájemně ortogonálních uzavřených podprostorů $\mathcal{H}$ jako podprostor $\mathcal{H}$.

Direktní součin operátorů

Myšlenku konstrukce direktního součtu prostorů $(\mathcal{H}_\alpha)_{\alpha \in I}$ reflektuje i konstrukce direktního součtu sady operátorů $(T_\alpha)_{\alpha \in I}$ definovaných na nich (nebo na definičních oborech $D(T_\alpha) \subset \mathcal{H}_\alpha$). Abychom dodrželi podmínku definice (1), která zajišťuje dobrou definovanost skalárního součinu a normy na $\bigoplus_{\alpha \in I} \mathcal{H}_\alpha$, je potřeba definiční obor $T_\oplus := \bigoplus_{\alpha \in I} T_\alpha$ vymezit předpisem

$$D(T_\oplus) := \left\{ X \in \mathcal{H}_\oplus \mid \forall \alpha \in I: X(\alpha) \in D(T_\alpha), \sum_{\alpha \in I} \|T_\alpha X(\alpha)\|^2 < \infty \right\}, \quad (4)$$

$$T_\oplus : D(T_\oplus) \rightarrow \mathcal{H}_\oplus : (T_\oplus X)(\alpha) = T_\alpha X(\alpha).$$

Kontrola absolutní konvergence je opět nadbytečná, je-li množina I konečná.

V komentáři k §7.4 se dozvídáme několik poznatků o této konstrukci, které pouze vypíšeme:

- Jsou-li T_α omezené pro všechna $\alpha \in I$ a zároveň $\sup_{\alpha \in I} \|T_\alpha\|_{\mathcal{H}_\alpha} < \infty$, potom $T_\oplus$ je omezený a $\|T\| = \sup_{\alpha \in I} \|T_\alpha\|_{\mathcal{H}_\alpha}$.
- Jsou-li T_α hustě definované na $\mathcal{H}_\alpha$ pro všechna $\alpha \in I$, je také $T_\oplus \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_\oplus)$. Za tohoto předpokladu také $T_\oplus^* = \bigoplus_{\alpha \in I} T_\alpha^*$.
- Jsou-li T_α pro všechna $\alpha \in I$ uzavřené, resp. symetrické, resp. samosdružené, resp. v podstatě samosdružené, platí tato vlastnost také pro $T_\oplus$.

Direktní součet operátorů souvisí s poněkud jednodušším konceptem algebraického součtu. Pro stejné $(T_\alpha)_{\alpha \in I}$ definujeme

$$T_\Sigma : \Sigma_{\alpha \in I} \widetilde{D(T_\alpha)} \rightarrow \mathcal{H}_\oplus \quad (5)$$

stejným předpisem jako $T_\oplus$. Rozdíl je v tom, že definičním oborem je pouze algebraický součet podprostorů $\mathcal{H}_\oplus$

$$\Sigma_{\alpha \in I} \widetilde{D(T_\alpha)} = \left(\bigcup_{\alpha \in I} \widetilde{D(T_\alpha)} \right)_{\text{lin}} \subset D(T_\oplus), \quad (6)$$

kde vlnka značí použití izometrie mezi komponentním prostorem $\mathcal{H}_\alpha$ a podprostorem $\tilde{\mathcal{H}}_\alpha \subset \mathcal{H}_\oplus$.

Jsou-li T_α uzavřené, je $T_\oplus$ uzavřený, ale pro I nekonečnou T_Σ obecně ne. Je však $T_\oplus$ uzávěrem T_Σ . Obecněji pro neuzavřené, ale uzavíratelné operátory platí, že uzávěry $T_\oplus$ a T_Σ se rovnají. Pro I konečné jsou obě konstrukce shodné.

Fockův prostor

Z minula máme stavový prostor N identických bosonů, resp. fermionů daný jako

$$P_N \mathcal{H}_N, \quad \mathcal{H}_N := \mathcal{H}_1^{\otimes N}, \quad (7)$$

kde $P = S$, resp. A . Označení $\mathcal{H}_N$, které pro dnešek přijmeme, je konzistentní s $\mathcal{H}_1$. Dodefinujeme pro stručnost ještě

$$\mathcal{H}_0 := \mathbb{C}, \quad S_0, A_0 := 1. \quad (8)$$

Tato volba je pro „prázdný tenzorový součin“ smysluplná v tom smyslu, že rovnost $\mathcal{H}_{n+1} = \mathcal{H}_n \otimes \mathcal{H}_1$ s ní platí i pro $n = 0$. Fockův prostor pak zavedeme vzorci

$$\mathcal{F}_P(\mathcal{H}_1) := \bigoplus_{N=0}^{\infty} P_N \mathcal{H}_N. \quad (9)$$

Všechny N -částicové podprostory, symetrizované či antisymetrizované, v něm tedy vystupují jako ortogonální podprostory, dále obsahuje lineární kombinace napříč různými počty částic a i jejich zobecnění na spočetně mnoho členů. Ortonormální bázi Fockova prostoru můžeme zkonstruovat v rámci tohoto vnoření $\mathcal{H}_N \rightarrow \mathcal{H}_N$ jednoduše sloučením ortonormálníchází jednotlivých $\mathcal{H}_N$. Odsud plyne důležitá poučka, že **pro separabilní jednočásticový prostor $\mathcal{H}_1$ jsou $\mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1), \mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1)$ separabilní také.**

Zavést můžeme také

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}_1) := \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N. \quad (10)$$

bez projekce na symetrický nebo antisymetrický podprostor. Ačkoli se nebude jednat o stavový prostor žádného druhu částic, je prakticky snazší v něm uvažovat některé operátory. Ty pak podle principu nerozlišitelnosti budou redukovány podprostory $\mathcal{F}_S$ i $\mathcal{F}_A$ a mohou tak zastoupit popis operátorů definovaných na nich. $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)$ umožňuje také přímočarý zápis báze pomocí tenzorových součinů jedné pevně zvolené báze $\mathcal{H}_1$ se sebou.

Zajímavý je prostor $\mathcal{H}_0 = \mathbb{C}$ dimenze 1. Za ortonormální bázi v něm můžeme volit jednoduše číslo 1. Na prostoru $\mathcal{H}_0$ existuje jediný statistický operátor, kterým je identita, na Fockově prostoru mu odpovídá $I \oplus 0 \oplus 0 \oplus \dots$, což je ortogonální projektor na $\mathcal{H}_0$. Takový stav reprezentuje nulový počet částic či *vakuum* s nulovým počtem částic. Odpovídající jednotkový vektor $(X(\alpha))_{n=0}^{\infty} = (1, 0_{\mathcal{H}_1}, 0_{\mathcal{H}_2}, \dots)$ můžeme označit Ω_0 . Na konkrétní volbě fáze zvoleného čísla stav vakua nezávisí, ale v lineárních kombinacích, například

$$\alpha\Omega_0 + \beta\varphi, \quad \varphi \in \mathcal{H}_1, \quad (11)$$

začne být podstatná i relativní fáze mezi čísly α a β , například volby $\alpha = 1, \beta = \pm 1$ dávají pro $\|\varphi\| = 1$ dva vzájemně kolmé stavy z $\mathcal{F}_P(\mathcal{H}_1)$. Vakuum tedy neobsahuje žádnou kopii žádného stavu z $\mathcal{H}_1$, ale je stále třeba jej brát jako jeden z bazových vektorů, který vstupuje do lineárních kombinací, ne jako nulu.

Rozšíření jednočásticových operátorů na Fockův prostor

Uvažujme libovolný operátor $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1)$. Pro $N \in \mathbb{N}_0$ uvažujme operátor

$$T_N^{\Sigma} = T \otimes I \otimes \dots \otimes I + I \otimes T \otimes \dots \otimes I + \dots + I \otimes I \otimes \dots \otimes T. \quad (12)$$

Definičním oborem tohoto operátoru je hustý podprostor $D_T \otimes \dots \otimes D_T \subset \mathcal{H}_N$. Pokud T je omezené, můžeme rovnou uvažovat na místě $\otimes$ operaci $\otimes$ a dostat operátor definovaný na celém $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$. Pro $N = 0$ definujeme $T_0^{\Sigma} = 0_{\mathcal{H}_0}$. Tyto operátory jsou automaticky redukovány projektory S_N i A_N .

Vlastnosti husté definovanosti i reducibility operátory P_N se potom přenášejí i na operátor

$$T^{\Sigma} = \sum_{N=0}^{\infty} T_N^{\Sigma}. \quad (13)$$

(což je třeba v rychlosti ověřit) a hustě definovány jsou pak i jeho části v $\mathcal{F}_S$ a v $\mathcal{F}_A$.

Pokud T je samosdružený operátor pro jednu částici, pak T_{Σ} (stejně jako jeho části v $\mathcal{F}_P$) je v podstatě samosdružený a jeho uzávěr může sloužit jako pozorovatelná na Fockově prostoru (opět redukována projektory na $\mathcal{F}_P$). Jedná se o operátor, který můžeme psát jako

$$\overline{T^{\Sigma}} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \overline{T_N^{\Sigma}} =: T^{\oplus}. \quad (14)$$

Díky konstrukci se jedná o *celkové* pozorovatelné: celkovou hybnost systému, celkovou energii apod.

Operátory počtu částic

Zajímavou volbou za T pro předchozí sekci jsou projektory. Uvědomme si nejprve, že ačkoli volba pozorovatelné $T = I$ pro jednočásticový systém vůbec nijak zajímavá, platí pro ni

$$I_N^{\Sigma} = I \otimes \dots \otimes I + \dots + I \otimes \dots \otimes I = NI_{\mathcal{H}_N}, \quad (15)$$

takže pro součtový operátor máme

$$I^\oplus = \sum_{N=0}^{\infty} N E_{\mathcal{H}_N} \quad (16)$$

v silném smyslu (jedná se rovnou o spektrální rozklad). Protože N -částicové stavy jsou vlastními stavy příslušnými vlastní hodnotě N , jedná se o operátor celkového počtu částic. Jako zajímavost uvedme, že při přechodu od (15) k (16) operátory pozbyly omezenosti (v souladu s tím, že jejich normy nemají konečné supremum).

Podobně, pokud namísto I zvolíme ortogonální projektor E_φ na nějaký jednorozměrný podprostor $\mathcal{H}_1$, dostáváme operátor s významem pozorovatelné počtu částic v odpovídajícím stavu a platí, že celkový počet částic je roven součtu počtu částic ve stavech prvků nějaké ON báze $\mathcal{H}_1$, protože stejná relace platí mezi I_N^Σ a $(E_{\varphi_j})_N^\Sigma$ pro každé $N \in \mathbb{N}_0$.

Propagátory

Podobnou konstrukci jako pro pozorovatelné můžeme využít pro unitární operátory. Jediným rozdílem je, že je třeba začít s operátory

$$U_N^\Pi := U \otimes U \otimes \dots \otimes U, \quad U_0^\Pi := I \quad (17)$$

a z nich konstruovat (již stejně jako u pozorovatelných)

$$U^\Pi = \bigoplus_{N=0}^{\infty} U_N^\Pi = \overline{\sum_{N=0}^{\infty} U_N^\Pi}. \quad (18)$$

Tento operátor, jakožto direktní součet unitárních operátorů, je rovněž unitární. Snadno ověříme, že (4) jeho definiční obor oproti (1) nijak nezužuje, že skalární součin (2) se zachovává a že inverzí je $(U^{-1})^\Pi$. Je také redukován projekty na $\mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1)$, $\mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1)$.

Pokud za U dosadíme evoluční operátor jednočásticového systému, pak U^Π má význam vývoje soustavy neurčeného počtu takových identických, ale **neinteragujících** částic. Platí i více:

Věta (19.1.6). Nechť $U(\bullet)$ je SSUG na $\mathcal{H}_1$, jejímž generátorem je $H \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H}_1)$. Pak $U^\Pi: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{F}(\mathcal{H}))$: $t \mapsto (U(t))^\Pi$ je SSUG na $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)$ generovaná operátorem $H^\oplus$, podobně $U_P^\Pi: t \mapsto (U(t))_P^\Pi$ je SSUG na $\mathcal{F}_P(\mathcal{H}_1)$ generovaná $H_P^\oplus$ pro $P \in \{S, A\}$.

Transformace $U(t) \mapsto U(t)^\Pi$ tedy jednočásticový propagátor zobrazí na propagátor vyhovující postulátu časového vývoje složeného systému a jeho odpovídající Hamiltonián je vskutku operátor celkové energie podle předchozí sekce.

K nekonzervativním systémům

Není mnoho, co by šlo o nekonzervativních systémech říci v takové obecnosti, s jakou máme vysloveny výsledky z minula pro konzervativní. Myšlenkou v podstatě je v nějakém smyslu zintegrovat Schrödingerovu rovnici. Aby taková myšlenka vůbec dávala smysl, budeme potřebovat zavést integrál z vektorové funkce.

Bochnerův integrál

Myšlenka integrace vektorové funkce podle číselné míry neobsahuje žádné kroky, které jsme neviděli použité již u integrace komplexní funkce podle projektorové míry, postup si tedy jen v rychlosti zopakujeme. I když by šlo pracovat na libovolném měřitelném prostoru $(X, \mathcal{d}\mu)$, zůstaneme u $\mathbb{R}$ a Lebesgueovy míry λ , zobecnění je nasnadě.

Nechť $\mathcal{X}$ je Banachův prostor. Pro jednoduché (vektorové!) funkce

$$\sigma(x) = \sum_{j=1}^n \chi_{M_j}(x) y_j, \quad (1)$$

kde M_j jsou vzájemně disjunktní borelovské množiny a y_j vzájemně různé prvky $\mathcal{X}$, definujeme

$$\int_{\mathbb{R}} \sigma(x) dx := \sum_{j=1}^n \lambda(M_j) y_j. \quad (2)$$

Dostáváme tak lineární zobrazení z (lineárního) prostoru jednoduchých funkcí do $\mathcal{X}$, splňující

$$\left\| \int_{\mathbb{R}} \sigma(x) dx \right\| \leq \int_{\mathbb{R}} \|\sigma(x)\| dx. \quad (3)$$

Na základě této spojitosti dokážeme integrál rozšířit na funkce $f(x)$, ke kterým je možno se blížit posloupností jednoduchých funkcí $(\sigma_n)_{n \in \mathbb{N}}$ ve smyslu

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sigma_n(t) = f(t) \text{ s.v. na } \mathbb{R} \quad \wedge \quad \int_{\mathbb{R}} \|f(x) - \sigma_n(x)\| dx \rightarrow 0 \quad (4)$$

(pozor na to, že první limita je v topologii $\mathcal{X}$). Množina takových funkcí tvoří lineární prostor, můžeme ji označit $\Phi_{\mathcal{X}}$. Pro každé $f \in \Phi_{\mathcal{X}}$ potom definujeme **Bochnerův integrál** vztahem

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) dx := \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} \sigma_n(x) dx, \quad (5)$$

o kterém se snadno ukáže, že na volbě aproximující posloupnosti (σ_n) nezávisí.

Je jednoduché ukázat, že pro každou borelovskou množinu M a funkci $f \in \Phi_{\mathcal{X}}$ je také součin $f(x)\chi_M(x) \in \Phi_{\mathcal{X}}$. Pomocí této součinné funkce definujeme Bochnerův integrál na podmnožinách $\mathbb{R}$ jako

$$\int_M f(x) dx := \int_{\mathbb{R}} f(x)\chi_M(x) dx. \quad (6)$$

Poznámka: Pokud porovnáme s konstrukcí integrace podle projektorové míry, nebyl zde potřeba mezikrok odpovídající omezeným funkcím. Zásadní rozdíl je v porovnání vztahů pro normu získaného výrazu, tj. vektoru z $\mathcal{X}$

$$\left\| \int_{\mathbb{R}} \sigma(x) dx \right\| \leq \int_{\mathbb{R}} \|\sigma(x)\| dx, \quad (7)$$

s podobným odhadem pro integrál číselné funkce $\sigma(x) = \sum_{j < n} \alpha_j \chi_j$ podle projektorové míry, tj. operátoru

$$\left\| \int_X \sigma(x) dE(x) \right\| = \max_{j < n} |\alpha_j|. \quad (8)$$

Zatímco ve druhém případě odhad zaručuje konvergenci levé strany pro *stejněměrně* konvergující posloupnost jednoduchých funkcí, v prvním postačuje konvergence posloupnosti funkcí $\|\sigma_n\|$ v L -prostoru. Současná bodová konvergence hodnot $\sigma_n(x)$ je požadavkem pro to, aby integrál nezávisel na volbě posloupnosti.

Bochnerův integrál splňuje několik pěkných vlastností:

- jedná se o lineární zobrazení $\Phi_{\mathcal{X}}$ do $\mathcal{X}$,
- $\left\| \int_{\mathbb{R}} f(x) dx \right\| \leq \int_{\mathbb{R}} \|f(x)\| dx$,
- pro omezené lineární zobrazení $B: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ platí $B \circ f \in \Phi_{\mathcal{Y}}$ a

$$\int_{\mathbb{R}} B(f(x)) dx = B \left(\int_{\mathbb{R}} f(x) dx \right). \quad (9)$$

Za prostor $\mathcal{X}$ můžeme volit například Hilbertův prostor a integrovat vektorové funkce, ale Banachovým prostorem je například také $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ a dostáváme integrál operátorů závislých na x .

Pro použití Bochnerova integrálu je největší překážkou „kostrbatost“ podmínek (4). Jistě v aplikacích nebudeme chtít každou funkci aproximovat jednoduchými funkcemi. Dá se ukázat, ač trochu náročně, že první požadavek má za postačující podmínku, že funkce $f(x)$ je spojitá a má vlastní limity v obou nekonečnách (v knize cvičení 3/38). Druhou z podmínek (4) můžeme, pokud první platí, nahradit snadněji ověřitelným požadavkem

$$\int_{\mathbb{R}} \|f(x)\| dx < \infty, \quad (10)$$

tj. $\|f(x)\| \in L^1(\mathbb{R})$ jakožto funkce x (3.7.4c). V praxi budeme vždy využívat právě tato alternativní vyjádření.

Dysonův rozvoj

Právě integrál vektorové funkce nám pomůže vyjádřit unitární propagátor ze Schrödingerovy rovnice s časově závislým Hamiltoniánem.

Věta (Dysonův rozvoj, 17.5.1). Nechť $H: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$ je silně spojitá funkce, jejíž hodnoty jsou hermitovské operátory. Potom existuje unitární propagátor $U(t, s)$ takový, že pro libovolná $t, s \in \mathbb{R}$ a $\varphi \in \mathcal{H}$ má rovnice

$$i \frac{d}{dt} \psi_t = H(t) \psi_t \quad (11)$$

s počáteční podmínkou $\psi_s = \varphi$ řešení tvaru vektorové funkce $\psi_t = U(t, s) \varphi$. Přitom platí

$$\begin{aligned} \psi_t &= \sum_{n=0}^{\infty} U_n(t, s) \varphi, \\ U_0(t, s) &= I, \quad U_n(t, s) \varphi = (-i) \int_s^t H(t') U_{n-1}(t', s) \varphi dt', \quad \forall n \in \mathbb{N}, \end{aligned} \quad (12)$$

přičemž řada takto určených *operátorů* $\sum_{n=0}^{\infty} U_n(t, s)$ konverguje k $U(t, s)$ ve smyslu operátorové normy.

Poznámka: Potřeba psát rovnice (12) ve formě rovnosti operátorů působících na vektor, přestože jsou všechny omezené, je právě v tom, aby v Bochnerově integrálu vystupovala spojitá funkce získaná akcí *silně* spojitého $H(t)$ na vektor. Pokud si můžeme dovolit zesílit požadavek na spojitost $H(t)$ v *operátorové normě*, potom lze rovnici psát pro operátory samotné:

$$U_n(t, s) = (-i) \int_s^t H(t') U_{n-1}(t', s) dt'. \quad (13)$$

Dysonův rozvoj se také potkává v plně rozepsaném tvaru jako

$$U_n(t, s) \varphi = (-i)^n \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \dots \int_s^{t_{n-1}} dt_n (H(t_1) \dots H(t_n) \varphi) \quad (14)$$

a jedná se o jeden ze základních nástrojů kvantové mechaniky.

Při pohledu na vyslovenou větu okamžitě identifikujeme zcela zásadní limitující faktor: požadavek $H(t) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Kvantové Hamiltoniány zpravidla jsou neomezené operátory a věta potom nelze použít. Je rozsáhlým tématem celé teorie, za jakých podmínek to možné je. Uvedeme jednu myšlenku v tomto směru.

Převod do Diracova obrazu

Může se stát, že za neomezenost Hamiltoniánu je „zodpovědná“ jeho kinetická část P^2 a potenciál V již omezený operátor je, přičemž naopak celá časová závislost se skrývá v něm. V takovém případě můžeme využít přechodu do Diracova pojetí časového vývoje, kde za H_0 zvolíme časově nezávislý operátor P^2 a rovnici Schrödingerova tvaru sestavíme s operátorem

$$V^{(D)}(t) = \exp(i(t-s)H_0)V(t)\exp(-i(t-s)H_0) =: U_0(s,t)V(t)U_0(t,s), \quad (15)$$

který již omezený je. Potom, pokud je funkce $V^{(D)}(t)$ i silně spojitá, Dysonův rozvoj použit již můžeme a získaný průběh $\psi_t^{(D)}$ převedeme zpět do Schrödingerova obrazu.

Možná komplikace v popsaném postupu je, že časový vývoj může opustit $D(H_0)$, takže ač máme řešení rovnice

$$i \frac{d}{dt} \psi^{(D)}(t) = V^{(D)}(t) \psi^{(D)}(t), \quad (16)$$

tvaru

$$\psi^{(D)}(t) = U^{(D)}(t,s) \psi_s, \quad (17)$$

vektorová funkce

$$\psi_t = U_0(t,s) U^{(D)}(t,s) \psi_s \quad (18)$$

nemusí být řešením rovnice

$$i \frac{d}{dt} \psi_t = (P^2 + V) \psi_t \quad (19)$$

a tedy ve skutečnosti nevyhovovat postulátu časového vývoje ve formě, v jaké je vysloven.

Ukazuje se, že postačující podmínkou pro použitelnost Dysonova rozvoje v tomto duchu je, pokud (stále omezený) člen $V(t)$ má silně spojitou derivaci, tj. pro všechna $\varphi \in \mathcal{H}$ a všechna t existuje $d/dt V(t)\varphi$ a operátorová funkce touto relací definovaná je silně spojitá v parametru t (17.5.3–5, v knize bez důkazu).

Po rozepsání Dysonova rozvoje v operátoru (15) zpět do Schrödingerova obrazu dle (18), vyhodnocení $V^{(D)}(t)$ zpět pomocí $V(t)$ a použití „navazovacích“ vlastností propagátoru dostáváme poměrně známou řadu

$$\begin{aligned} \psi_t &= U_0(t,s) \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_s^t dt_1 \dots \int_s^{t_{n-1}} dt_n V^{(D)}(t_1) \dots V^{(D)}(t_n) \psi_s \\ &= U_0(t,s) \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_s^t dt_1 \dots \int_s^{t_{n-1}} dt_n U_0(s,t_1) V(t_1) U_0(t_1,s) U_0(s,t_2) \dots U_0(t_{n-1},s) U_0(s,t_n) V(t_n) U_0(t_n,s) \psi_s \quad (20) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_s^t dt_1 \dots \int_s^{t_{n-1}} dt_n U_0(t,t_1) V(t_1) U_0(t_1,t_2) \dots U_0(t_{n-1},t_n) V(t_n) U_0(t_n,s) \psi_s, \end{aligned}$$

kde

$$U_0(t,s) = e^{-i(t-s)H_0}. \quad (21)$$

Základní propagátory

Volná částice

Uvažujme $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ a Hamiltonián $(2m)^{-1}P^2$, $m > 0$. Z kvantové mechaniky známe propagátor ve tvaru

$$(U(t)\psi)(x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi it}} \int_{\mathbb{R}} e^{im(x-y)^2/(2t)} \psi(y) dy. \quad (1)$$

Podobně jako v jiných případech je tento vzorec ale neoprávněný, pokud $\psi \notin L^1(\mathbb{R})$. Navíc při jeho odvození se zpravidla používá náhrada m za $m + i\varepsilon$ (nebo podobný krok) a limitní přechod. Vzhledem k tomu, že se jedná o poměrně oblíbený trik, bylo by dobré mít představu, jaké je jeho matematické oprávnění.

Funkce

$$U(t) = \exp\left(-it \frac{P^2}{2m}\right) \quad (2)$$

má tvar funkce operátoru P – takové jsme zkoumali, ale podmínkou, aby výsledek šel psát ve tvaru konvolučního operátoru, jak indikuje (1), bylo, aby funkce, do níž se dosazuje, byla L^2 -integrabilní. Právě této podmínky dosáhneme zavedením

$$f_\varepsilon(x) = e^{-i(t-i\varepsilon)x^2/(2m)}, \quad \varepsilon > 0: \quad \int_{\mathbb{R}} |f_\varepsilon(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} e^{-\varepsilon x^2/m} dx < \infty. \quad (3)$$

Pro tyto funkce tedy můžeme psát

$$(f_\varepsilon(P)\psi)(x) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} (Ff_\varepsilon)(y-x) \psi(y) dy \quad (4)$$

Funkce f_ε je současně L^1 -integrabilní a proto můžeme psát

$$(Ff_\varepsilon)(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-iyz} f_\varepsilon(z) dz = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\varepsilon + it}{2m} z^2 - iyz\right) dz = \sqrt{\frac{m}{i(t-i\varepsilon)}} \exp \frac{imy^2}{2(t-i\varepsilon)}. \quad (5)$$

Potom

$$(f_\varepsilon(P)\psi)(x) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t-i\varepsilon)}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{im(y-x)^2}{2(t-i\varepsilon)}\right) \psi(y) dy \quad (6)$$

Bodovou limitou f_ε v $\varepsilon \rightarrow 0_+$ je $e^{-itx^2/(2m)}$, takže operátory $f_\varepsilon(P)$ konvergují k $f(P) = U(t)$ v silné topologii. Proto funkce $f_\varepsilon(P)\psi$, určené vztahem (6), konvergují k $U(t)\psi$ v L^2 -normě. Tato konvergence implikuje existenci posloupnosti $f_{\varepsilon_n}(P)\psi$, $\varepsilon_n \rightarrow 0$, která konverguje bodově skoro všude (poznámka 2.2.2). Pro tuto posloupnost integrandy v (6) splňují předpoklady Lebesgueovy věty (integrabilní majorantou je $|\psi(y)|$) a je tedy možné provést limitu uvnitř integrálu:

$$(U(t)\psi)(x) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \sqrt{\frac{m}{2\pi it}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{im(y-x)^2}{2t}\right) \psi(y) dy \quad (7)$$

(prefaktor konverguje sám). Tím je odvozen vzorec tvaru (1) pro $\psi \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$.

Pro $\psi \in L^2(\mathbb{R}) \setminus L^1(\mathbb{R})$ je možné, podobně jako u Fourier–Plancherelova operátoru, použít aproximaci L^1 -funkcemi a limitu podle středů. K tomuto účelu je možné integrál v (1) zkrátit na omezený interval, jehož konce se budou blížit $\mp\infty$, například $(-n, n)$. Toto odpovídá náhradě $\psi(x)$ za $\psi(x)\chi_{(-n,n)}(x)$. Na místě charakteristické funkce může být výhodné použít nějakou jinou posloupnost funkcí $\eta_n(x)$, které pouze potřebují splňovat

1. $\forall n \in \mathbb{N}: \eta_n(x) \in L^2(\mathbb{R})$,
2. $\forall n \in \mathbb{N}, \forall x \in \mathbb{R}: \eta_n(x) \leq 1$,
3. $\forall x \in \mathbb{R}: \lim_{n \rightarrow \infty} \eta_n(x) = 1$ (stačí s.v.).

Pro získání l.i.m. může být praktické jednotku aproximovat například posloupností hladkých funkcí, zvláště je-li $\psi(x)$ sama hladká. **Prostor funkcí $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ je vůči $U(t)$ invariantní**, což plyne z vyjádření

$$\begin{aligned}(U(t)\psi)(x) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi it}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{im(y-x)^2}{2t}\right) \psi(y) dy \\ &= \sqrt{\frac{m}{it}} e^{imx^2/(2t)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-imxy/t} e^{imy^2/(2t)} \psi(y) dy \\ &= \sqrt{\frac{m}{it}} e(x) \mathcal{F}[e(y)\psi(y)](mx/t); \quad e(x) = e^{imx^2/(2t)},\end{aligned}\tag{8}$$

v němž všechny tři kroky zachovávají $\mathcal{S}(\mathbb{R})$. Je-li tedy třeba hledat limitní vyjádření

$$(U(t)\psi)(x) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi it}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{im(x-y)^2}{2t}\right) \psi(y) \eta_n(y) dy,\tag{9}$$

postačí pro $\psi(x)\eta_n(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ hledat opět mezi hladkými funkcemi, což může výpočet limity výrazně usnadnit.

Harmonický oscilátor

Podobná poznámka jako pro volnou částici platí i pro harmonický oscilátor: vzorec

$$(U(t)\psi)(x) = \begin{cases} \int_{\mathbb{R}} K_t(x, y) \psi(y) dy, & \omega t \in \mathbb{R} \setminus \{n\pi \mid n \in \mathbb{Z}\} \\ K_t(x, y) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi i |\sin(\omega t)|}} \exp\left(\frac{i\omega}{2 \sin(\omega t)} (x^2 \cos(\omega t) - 2xy + y^2 \cos(\omega t)) - \frac{\pi i}{2} \left[\frac{\omega t}{\pi}\right]\right), \\ e^{-i\pi n/2} \psi((-1)^n x) & \text{jinak,} \end{cases}\tag{10}$$

odvozovaný na OZKVANM2, platí (část s integrálem) pouze, pokud $\psi \in L^2(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R})$. Jinak je potřeba psát

$$(U(t)\psi)(x) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} K_t(x, y) \psi(y) \eta_n(y) dy\tag{11}$$

se stejnými požadavky na $\eta_n(x)$ jako u volné částice.

Více rozměrů

Pro $L^2(\mathbb{R}^n)$ a Hamiltonián tvaru součtu operátorů působících pouze v jednotlivých souřadnicích můžeme použít obecnější poučku pro stavové prostory tvaru tenzorového součinu $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$:

Věta. Necht $U_1: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H}_1)$, $U_2: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H}_2)$ jsou SSUG. Pak výraz

$$U: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2): t \mapsto U_1(t) \otimes U_2(t)\tag{12}$$

určuje SSUG na prostoru $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Jsou-li $A_1 \in \mathcal{L}_{\text{sa}}(\mathcal{H}_1)$, $A_2 \in \mathcal{L}_{\text{sa}}(\mathcal{H}_2)$ generátory U_1 , resp. U_2 , je generátorem U operátor

$$A = \overline{A_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes A_2}.\tag{13}$$

Důkaz této užitečné věty (viz 11.1.7) je přímočarý, ale je dobrým procvičením zákonitostí pro tenzorový součin operátorů, které brzy nám přijdou vhod. Provedeme na přednášce.

Poznámka: Pro volnou částici v $\mathbb{R}^d$ můžeme uvítat také přímé zobecnění (9),

$$(U(t)\psi)(\mathbf{x}) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi it}\right)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^n} \exp\left(\frac{im}{2t} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2\right) \psi(\mathbf{y}) \eta_n(\mathbf{y}) d\mathbf{y}\tag{14}$$

kde funkce $\eta_n(\mathbf{y})$ lze volit rovnou v $L^2(\mathbb{R}^d)$, a vyhnout se tak určení l.i.m. d -krát.

Třetí postulát kvantové fyziky

Pro vyslovení třetího postulátu potřebujeme tentokrát doplnit jen jednu rychlou definici.

Definice. Operátorovou funkci $U: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})$ nazveme **unitárním propagátorem**, splňuje-li

$$\forall r, s, t \in \mathbb{R}: U(t, s)U(s, r) = U(t, r) \quad (1)$$

a je-li v obou parametrech silně spojitá.

Postulát 3 (o časovém vývoji).

- a) Časový vývoj *uzavřeného* kvantového systému je popsán unitárním propagátorem: existuje takové $U(t, s)$, že pro všechna t, s je

$$W_t = U(t, s)W_s U(t, s)^{-1}, \quad \text{resp.} \quad \psi_t = U(t, s)\psi_s \text{ (pro čistý stav)}. \quad (2)$$

- b) Propagátor *konzervativního* systému $U(t, s)$ splňuje $\forall t, s, \tau \in \mathbb{R}: U(t + \tau, s + \tau) = U(t, s)U(\tau, 0)$ a je určen pozorovatelnou energie – Hamiltoniánem jako

$$U(t, s) = e^{-i(t-s)H}. \quad (3)$$

- c) Časový vývoj systému s časově závislým Hamiltoniánem je pro smíšené, resp. čisté stavy určen rovnicemi

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt}(W_t \psi) &= (H(t)W_t - W_t H(t))\psi, \\ i \frac{d}{dt}\psi &= H(t)\psi. \end{aligned} \quad (4)$$

Všechny tři části postulátu spolu souvisejí. Část a) je univerzálně platná, ale neurčuje žádnou spojitost s fyzikou. Část b) ukazuje, jak může propagátor být jednoduše vyjádřen pomocí operátoru energie, ale funguje jen pro konzervativní systémy. Část c) nakonec zobecňuje Schrödingerovu rovnici, která plyne z b), i na systémy ne-konzervativní. Toto pochopitelně otevírá několik otázek o vzájemné konzistenci požadavků, kterou dnes a zítra prozkoumáme.

Stoneův teorém

Nejprve prozkoumáme, jak souvisí části a) a b). Dodatečná podmínka na propagátor $U(t + \tau, s + \tau) = U(t, s)U(\tau, 0)$ vyjadřuje nezávislost časového vývoje fyzikální soustavy na volbě počátku časové reference, což je jednoduše definice konzervativity. Unitární propagátor je tak plně předepsán jednodušším zobrazením $U: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})$ jako $U(t, s) = U(t - s)$ (použití stejného symbolu U typicky nepůsobí žádné zmatení), které má vlastnosti **silně spojitě jednoparametrické grupy unitárních operátorů**, či jednodušeji silně spojitě jednoparametrické unitární grupy (v tomto textu budeme zkráceně psát SSUG).

Požadavek silné spojitosti je při vyjádření b) motivován tím, že podle pravidel funkcionálního počtu z *bodové* spojitosti funkcí e^{-itx} v parametru t plyne *silná* spojitost e^{-itH} z hlediska stejného parametru. Ukážeme, že je i postačující podmínkou k opačnému závěru. Pro tento účel prozkoumáme hlavní vlastnosti silně SSUG.

Z grupové vlastnosti $U(t + s) = U(t)U(s)$ a z podmínek unitarity okamžitě plynou následující vlastnosti:

- libovolné dva prvky SSUG komutují,
- $U(0) = I$,
- $U(-t) = U(t)^{-1} = U(t)^*$.

Pro pevné $\psi \in \mathcal{H}$ dále zkoumejme vektorovou funkci $f : t \mapsto U(t)\psi$. Ze silné spojitosti plyne, že pro $t \rightarrow 0$ konverguje $f(t)$ k ψ , přičemž může a nemusí konvergovat také derivace v nule, definovaná limitou

$$f'(0) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(t) - f(0)}{t} = \lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{U(t) - I}{t} \psi \right). \quad (5)$$

Sestavíme množinu D všech takových ψ . Linearita vystupujících zobrazení implikuje, že se jedná o podprostor $\mathcal{H}$, a že

$$T : D \rightarrow \mathcal{H} : \psi \mapsto \lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{U(t) - I}{it} \psi \right) \quad (6)$$

tedy předepisuje nějaký lineární operátor. Takto definované T nazveme **generátorem** SSUG $U(t)$.

Poznámky: Jakmile $\psi \in D$, patří do D také $U(s)\psi$ pro každé s a operátor T s $U(s)$ komutuje. Obojí plyne z následujícího rozpisu:

$$TU(s)\psi = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)U(s)\psi - U(s)\psi}{it} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(s)(U(t)\psi - \psi)}{it} = U(s) \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)\psi - \psi}{it} = U(s)T\psi. \quad (7)$$

Věta (11.1.1). Jestliže $A \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$, pak $U : t \mapsto e^{itA}$ je SSUG a A je její generátor.

Důkaz. Všechny podmínky SSUG plynou z pravidel funkcionálního počtu, o silné spojitosti jsme v této souvislosti mluvili již výše a ostatní jsou podobně přímočarými důsledky. Přesvědčme se tedy o druhé části tvrzení. Označme T generátor $U(t)$.

Nechť $\psi \in D(A)$. Limitu na pravé straně (6) můžeme pro $U(t) = e^{itA}$ ekvivalentně vyjádřit pomocí funkce operátoru A jako

$$\lim_{t \rightarrow 0} f_t(A)\psi, \quad f_t(x) = (e^{itx} - 1)/(it). \quad (8)$$

Funkce f_t je pro $t \neq 0$ omezená a spojitá, což jsou postačující podmínky i pro $f_t \in L^\infty(\mathbb{R}, d\mu_\psi^{(A)})$. Dále funkce $x \mapsto x$ patří do $L^2(\mathbb{R}, d\mu_\psi^{(A)})$. Vyjádříme

$$\|(f_t(A) - A)\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |f_t(x) - x|^2 d\mu_\psi^{(A)}. \quad (9)$$

V integrandu na pravé straně vystupuje funkce shora omezená funkcí $(2|x|)^2$, která je podle $d\mu_\psi^{(A)}$ pro $\psi \in D(A)$ L^1 -integrabilní a tvoří tak integrabilní majorantu potřebnou pro převedení na integrál limitní funkce. Ovšem

$$\forall x \in \mathbb{R} : \lim_{t \rightarrow 0} f_t(x) = x \quad (10)$$

a tedy

$$\lim_{t \rightarrow 0} \|(f_t(A) - A)\psi\|^2 = 0, \quad \lim_{t \rightarrow 0} f_t(A)\psi = A\psi. \quad (11)$$

Odsud také $\psi \in D(T)$ a $T\psi = A\psi$.

Nechť naopak $\psi \in D(T)$. Limita $\lim_{t \rightarrow 0} f_t(A)\psi$ tedy existuje a je rovna $T\psi =: \varphi$. Stejný výsledek platí pro normy:

$$\forall \varepsilon > 0 : \exists \delta > 0 : \forall t \in \mathbb{R}, |t| < \delta : \|f_t(A)\psi\| - \|\varphi\| < \varepsilon \quad (12)$$

Za ε zvolíme libovolně. Pro $|t| < \delta$ je

$$\begin{aligned} \|f_t(A)\psi\|^2 &< (\|\varphi\| + \varepsilon)^2, \\ \int_{\mathbb{R}} |f_t(x)|^2 d\mu_\psi^{(A)}(x) &< (\|\varphi\| + \varepsilon)^2. \end{aligned} \quad (13)$$

Protože na levé straně jedná o integrály nezáporných funkcí, můžeme použít Fatouovo lemma. Podle něj můžeme integrovat $\liminf_{t \rightarrow 0} |f_t(x)|^2 = \lim_{t \rightarrow 0} |f_t(x)|^2 = x^2$ a integrál bude shora omezen $\liminf_{t \rightarrow 0}$ integrálů, ale protože všechny sdílejí (alespoň na δ -okolí nuly) stejnou horní mez, je tento výraz konečný. Rovnice

$$\int_{\mathbb{R}} x^2 d\mu_\psi^{(A)}(x) < \infty \quad (14)$$

je však předpisem pro náležitost ψ do $D(A)$. Spolu s předchozím výsledkem již $A = T$. $\square$

Neméně důležitá je věta, která ukazuje opačný směr, ale kterou již ponecháme bez důkazu.

Věta (Stone, 11.1.2). Ke každé SSUG $U : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})$ existuje právě jeden samosdružený operátor A takový, že $\forall t \in \mathbb{R} : U(t) = e^{itA}$.

Toto pro **konzervativní** systémy opravňuje současnou platnost částí a) a b) postulátu: splňuje-li propagátor $U(t, s)$ podmínku invariance vůči časovému posunu, pak $t \mapsto U(t, 0)$ tvoří SSUG, ke které nalezneme generátor a podle Stoneovy věty je samosdruženým operátorem. Část b) potom říká, že tímto operátorem musí být (záporně vzatý) Hamiltonián. Naopak, vyjdeme-li z rovnice (3), první věta říká, že $U(s + \tau, s)$ je SSUG z hlediska parametru τ , z čehož snadno odvodíme, že splňuje (1).

Poznámka: Pro *hermitovský* operátor A je operátorová funkce $U(t) = e^{itA}$ *stejněměrně* spojitá. Naopak generátorem stejnoměrně spojitě jednoparametrické unitární grupy je omezený operátor, protože limitu $(U(t) - I)/(it)$ lze provést v operátorové normě. Platí tedy analogie obou tvrzení za těchto úprav předpokladů i závěrů. Ovšem v kvantové fyzice Hamiltoniány běžně omezené nejsou.

Schrödingerova rovnice

Třetí část postulátu je ještě zcela jiné formy než první dvě a mluví o vývoji stavu jako o diferenciální rovnici. Podíváme se nejprve, jak rovnice tohoto tvaru vznikne z (2) v případě konzervativního systému, o kterém již máme dodatečnou informaci poskytnutou částí b).

Věta. Nechť $H \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$ je Hamiltonián konzervativního systému, nechť pro některé $s \in \mathbb{R}$ je $\psi_s \in D(H)$. Pak funkce $\mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H} : t \mapsto \psi_t$, předepsaná (2), splňuje $\forall t \in \mathbb{R} : \psi_t \in D(H)$, je diferencovatelná a pro její derivaci platí

$$i \frac{d\psi_t}{dt} = H\psi_t. \quad (15)$$

Důkaz. Pro $\psi \in D(H)$ máme $\forall t \in \mathbb{R} : U(t)\psi \in D(H)$ v důsledku skutečnosti, že $U(t)$, jakožto funkce H , komutuje s H současně jako omezený operátor:

$$U(t-s)H \subset HU(t-s), \quad \psi_s \in D(H) \Rightarrow \psi_t = U(t-s)\psi_s \in D(H). \quad (16)$$

Derivaci na levé straně (15) lze psát jako

$$i \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\psi_{t+\tau} - \psi_t}{\tau} = i \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau+t-s)\psi_s - U(t-s)\psi_s}{\tau} = -U(t-s) \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau)\psi_s - \psi_s}{i\tau} \quad (17)$$

Ovšem na pravé straně rozeznáváme definiční vztah pro generátor $U(t)$ působící na $\psi_s \in D(H)$. Protože generátorem je $-H$, existence limity je podmínkou $\psi_s \in D(H)$ zaručena a hodnota pravé strany rovnice je $U(t-s)H\psi_s = HU(t-s)\psi_s = H\psi_t$. $\square$

Věta (17.1.1). Nechť W_s je statistický operátor vystupující v (2) a H Hamiltonián uzavřeného systému. Platí-li $W_s D(H) \subset D(H)$, pak pro všechna $\psi \in D(H)$ je funkce $\mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H} : t \mapsto W_t \psi$ diferencovatelná a splňuje rovnici

$$i \frac{d}{dt} W_t \psi = (H W_t - W_t H) \psi. \quad (18)$$

Důkaz. Ze vztahu $U(t)D(H) \subset D(H)$ odvodíme

$$W_t D(H) = U(t-s)W_s U(s-t)D(H) \stackrel{(16)}{\subset} U(t-s)W_s D(H) \stackrel{\text{předp.}}{\subset} U(t-s)D(H) \stackrel{(16)}{\subset} D(H), \quad (19)$$

takže vlastnost $W_t D(H) \subset D(H)$ se také, podobně jako v minulé větě $\psi_t \in D(H)$, přenáší z s na všechna $t \in \mathbb{R}$, což dává smysl pravé straně (18). Pro levou stranu potom

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{W_{t+\tau} - W_t}{\tau} \psi = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau)W_t U(-\tau) - W_t}{\tau} \psi = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau)W_t U(-\tau) - U(\tau)W_t + U(\tau)W_t - W_t}{\tau} \psi \quad (20)$$

Po poslední úpravě lze limitu rozdělit na dvě části, které zvlášť konvergují k $iW_t H \psi$ a $-iH W_t \psi$. $\square$

Všimněme si obzvlášť, že rovnice (19) je formulována v „silném“ smyslu, akcí na vektor ψ . Důvodem je, že operátor vystupující na její pravé straně zpravidla není omezený. Takový by nemohl být limitou omezených operátorů ve stejnoměrné topologii, a tedy ani derivací.

Nyní je evidentní, že část c) postulátu je formulována jako zobecnění těchto dvou závěrů, platných pro konzervativní systémy, náhradou operátoru H za operátorovou funkci $H(t)$. Tam ale záruky, které dávají konzervativní systémy, končí. Zatímco pro konzervativní systém je Schrödingerova rovnice ekvivalentní formulaci (3) (protože $e^{-i(t-s)H}\psi_s$ je jejím řešením na $D(H)$ a odsud spojitě rozšíříme), která je části a) ekvivalentní a jen dodává význam generátoru časového vývoje, v části c) se může ledacos pokazit:

- vektor ψ_s , který byl v $D(H(s))$, se může vyvinout na $\psi_t \notin D(H(t))$,
- množina počátečních vektorů, pro které Schrödingerova rovnice má řešení na daném intervalu, nemusí být hustá (a určovat tak propagátor jednoznačně), a pokud je, není zaručeno, že vývojový operátor má vlastnosti propagátoru,
- naopak, derivací akce propagátoru na ψ nemusíme dostat samosdružený operátor.

Je tedy třeba brát části a) a c) tak, že se vzájemně doplňují. O vývoji nekonzervativního systému tak třetí postulát požaduje, aby byl jednak unitární, ale k tomu ještě určený Schrödingerovou rovnicí. O některých situacích, kdy z časově závislého Hamiltoniánu můžeme unitární propagátor s jistotou sestavit, se pobavíme na příští hodině.

Kreační a anihilační operátory – pevná báze

Součtové a součinnové operátory z minulé hodiny jsou redukovány projektory na podprostory Fockova prostoru o konstantních počtech částic, tedy na těchto prostorech operují nezávisle. Aby Fockův prostor byl více než jen současným zápisem variant chování složeného systému pro každou hodnotu N zvlášť, potřebujeme operátory, které působí napříč různými počty částic. Hlavní motivací je interakce mezi různými druhy částic, při které může docházet k jevům jako k pohlcení částice, vyzáření či její přeměně na částici jiného druhu. Popis takových přechodů je obvykle založen na kreačních a anihilačních operátorech.

V následujícím textu budeme vždy předpokládat, že jednočásticový stavový prostor $\mathcal{H}_1$ je separabilní prostor dimenze $d \leq \aleph_0$, $d \neq 0$. V tomto prostoru provedeme pevnou volbu ortonormální báze $(\varphi_j)_{j < d}$.

Obsazovací čísla

Kreační a anihilační operátory budou působit na symetrickém nebo antisymetrickém Fockově prostoru. Bude se nám hodit si sestavit nějakou bázi, ve které bude praktické pracovat. Z minulé hodiny máme bázi celého $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)$ tvaru všech tenzorových součinů všech možných kombinací N -tic bazových vektorů φ_j pro všechna $N \in \mathbb{N}_0$ (za prázdný tenzorový součin v případě $N = 0$ dosadíme vakuum Ω_0). Prvky této báze bychom mohli zobrazit odpovídajícími projektory S_N nebo A_N a získat tak nějakou totální množinu v odpovídajícím $\mathcal{F}_p(\mathcal{H}_1)$, ale ne ortonormální bázi: projektory skalární součin nezachovávají.

Připomeňme si definice:

$$S_N = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} U_\sigma, \quad A_N = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn } \sigma U_\sigma, \quad (1)$$

$$U_\sigma(\psi_1 \otimes \cdots \otimes \psi_N) = \psi_{\sigma(1)} \otimes \cdots \otimes \psi_{\sigma(N)}.$$

Jestliže toto pravidlo aplikujeme na bazové vektory tenzorového součinu $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$, dostaneme

$$U_\sigma(\varphi_{j_1} \otimes \varphi_{j_2} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_N}) = \varphi_{j_{\sigma(1)}} \otimes \varphi_{j_{\sigma(2)}} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_{\sigma(N)}}. \quad (2)$$

Vzhledem k tomu, že součet v definici S_N nebo A_N navštíví postupně všechny permutace indexů j_n , výsledek se nezmění (případně u A_N změní nejvýše znaménko), provedeme-li v N -tici $(j_1, \dots, j_N)$ jakoukoli permutaci. Je tedy výhodné všechny tyto permutace reprezentovat jediným prvkem, abychom zbytečně nedostávali lineárně závislé výsledky. Za tento reprezentativní prvek vezmeme uspořádanou N -tici

$$\hat{j} = (\hat{j}_1, \dots, \hat{j}_N), \quad \hat{j}_1 \leq \hat{j}_2 \leq \dots \leq \hat{j}_N \quad (3)$$

a její odpovídající tenzorový součin v bázi $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)$. Připomeňme, že čísla j_i (a potažmo $\hat{j}_i$) indexují prvky báze $\mathcal{H}_1$ a jsou tedy z množiny $\{j < d\}$.

Symetrizace

Uvažujme akci symetrizujícího projektoru S_N na vektor $\varphi_{j_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_N}$:

$$S_N(\varphi_{j_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_N}) = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \varphi_{j_{\sigma(1)}} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_{\sigma(N)}}. \quad (4)$$

V sumě na pravé straně stojí pouze tolik různých vektorů, kolik je různých přeuspořádání $\hat{j}$. Každý z těchto vektorů se obecně objeví opakovaně.

Z grupy $\mathcal{S}_N$ vezmeme podgrupu $H_{\hat{j}}$, která stabilizuje posloupnost $\hat{j}$ (tj. prohazuje pouze prvky, které měly stejnou hodnotu). Velikost této podgrupy je

$$\prod_{j < d} n_j!. \quad (5)$$

Podle H_j můžeme grupu $\mathcal{S}_N$ rozdělit na levé kosety tvaru xH_j . Protože každý z nich má velikost H_j , počet různých kosetů je

$$c = \frac{N!}{\prod_{j < d} n_j!}. \quad (6)$$

Toto číslo c představuje počet lineárně nezávislých prvků vystupujících na pravé straně (4). Každý z nich je přitom zastoupen v počtu (5) vyděleném podle předpisu (4) číslem $N!$, což dává hodnotu $1/c$. Podle Pythagorovy věty je tedy evidentní, že normalizaci můžeme provést faktorem $\sqrt{c}$. Označme

$$\varphi_N^{(S)}(\hat{j}) := \sqrt{c} S_N(\varphi_{\hat{j}_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_N}) = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{j < d} n_j!}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \varphi_{\hat{j}_{\sigma(1)}} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_{\sigma(N)}} \quad (7)$$

Vektory tvaru $\varphi_N^{(S)}(\hat{j})$ jsou **jednotkové**, pro různé neklesající posloupnosti $\hat{j}$ **ortogonální** a do jejich tvaru spadá aplikace S_N na libovolný z uvažovaných bázeových vektorů prostoru $\mathcal{H}_N$. Získáváme tak univerzální předpis konstrukce **ortonormální báze** prostoru $S_N \mathcal{H}_N$.

Již výše jsme použili, že neklesající posloupnosti $(\hat{j}_k)_{k=1}^N$ indexů $\hat{j}_k < d$ přísluší počet opakování n_j prvků $j < d$. Tato korespondence je oboustranná: k posloupnosti $\{n_j \mid j < d\}$, splňující

$$\forall j < d : n_j \in \mathbb{N}_0, \quad \sum_{j < d} n_j = N, \quad (8)$$

lze jednoznačně sestavit taková neklesající N -tice $\hat{j}$, kde postupně zařadíme n_j kopií každého čísla j . Můžeme tedy prvky $\varphi_N^{(S)}(\hat{j})$ ekvivalentně přeznačit pomocí takových posloupností *obsazovacích čísel*. Budeme používat značení se složenými závorkami

$$\varphi_N^{(S)}(\hat{j}) =: \Phi_S\{n_0, n_1, \dots\} \quad (9)$$

kde na pravé straně index N není potřeba, protože jeho hodnota je určena (8).

Antisymetrizace

Zopakujme nyní stejné kroky pro projektor A_N ,

$$A_N(\varphi_{\hat{j}_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_N}) = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn } \sigma \varphi_{\hat{j}_{\sigma(1)}} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_{\sigma(N)}}. \quad (10)$$

Hlavním rozdílem oproti S_N je, že opakuje-li se v posloupnosti $\hat{j}$ nějaká hodnota j více než jednou, dostaneme stejný vektor na pravé straně s koeficientem 0, protože podgrupa H_j má stejný počet prvků s kladným a se záporným znaménkem.

Do sumy proto stále přispívá stejný počet (6) ortogonálních vektorů, ale jejich celkové koeficienty jsou nulové, má-li $\hat{j}$ jakékoli opakování. Pokud nemá, zjednodušuje se c na $N!$, každý prvek sumy bude ortogonální na ostatní a objeví se se znaménkem $+1$ nebo -1 . Pravá strana má tak normu

$$\|A_N(\varphi_{\hat{j}_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_N})\| = \begin{cases} 1/\sqrt{N!} & \text{pokud } \hat{j} \text{ je ostře rostoucí,} \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases} \quad (11)$$

Ortonormální bázi prostoru $A_N \mathcal{H}_N$ tedy budeme konstruovat z vektorů

$$\varphi_N^{(A)} := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn } \sigma \varphi_{\hat{j}_{\sigma(1)}} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_{\sigma(N)}} \quad (12)$$

pro *ostře rostoucí* posloupnosti $\hat{j}$. (Pokud taková N -prvková posloupnost nelze sestavit, protože $N > \dim \mathcal{H}_1$, pak je také prostor $A_N \mathcal{H}_N$ prázdný.) Stejně jako u S_N můžeme zavést obsazovací čísla, která budou bez opakování členů vymezena na nulu a jedničku:

$$\varphi_N^{(A)}(\hat{j}) \leftrightarrow \Phi_A\{n_0, n_1, \dots\} : \quad (n_j) \in \{0, 1\}^d, \quad \sum_{j < d} n_j = N. \quad (13)$$

V obou případech jsme tedy získali ortonormální báze prostorů $S_N \mathcal{H}_N$, $A_N \mathcal{H}_N$ pro libovolné $N \in \mathbb{N}$. Víme, že každá dvojice těchto prostorů je v rámci $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)$ vzájemně ortogonální a také jsou všechny ortogonální na $\mathcal{H}_0 = S_0 \mathcal{H}_0 = A_0 \mathcal{H}_0$. Bázi Fockova prostoru tedy získáme jejich sjednocením a přidáním vakua, které popíšeme obsazovacími čísly $n_j = 0 \forall j < d$. Platí tedy

$$\left\{ \Phi_S \{n_0, n_1, \dots\} \mid n_j \in \mathbb{N}_0 \forall j < d, \sum_{j < d} n_j < \infty \right\} \text{ je ON bázi } \mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1), \quad (14)$$

$$\left\{ \Phi_A \{n_0, n_1, \dots\} \mid n_j \in \{0, 1\} \forall j < d, \sum_{j < d} n_j < \infty \right\} \text{ je ON bázi } \mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1). \quad (15)$$

Kreační a anihilační operátory – bazové vektory

Symetrický i antisymetrický Fockův prostor je tvořen direktním součtem prostorů tvaru $S_N \mathcal{H}_N$, resp. $A_N \mathcal{H}_N$, které jsou do něj vnořeny jako uzavřené vzájemně ortogonální podprostory. Můžeme tedy uvažovat zobrazení mezi nimi.

Pro naši zvolenou bázi φ_j kreační a anihilační operátory $\hat{a}^\dagger(\varphi_j)$, resp. $\hat{a}(\varphi_j)$ zavedeme **provizorně** jako zobrazení předepsaná právě takovými vztahy známými z každého kurzu kvantové mechaniky

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(\varphi_j) \Phi_S \{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \sqrt{n_j + 1} \Phi_S \{n_0, n_1, \dots, n_j + 1, \dots\}, \\ \hat{a}(\varphi_j) \Phi_S \{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \begin{cases} \sqrt{n_j} \Phi_S \{n_0, n_1, \dots, n_j - 1, \dots\}, & n_j \geq 1, \\ 0, & n_j = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (16)$$

pro symetrický případ a

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(\varphi_j) \Phi_A \{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \begin{cases} (-1)^{\sum_{i < j} n_i} \Phi_A \{n_0, n_1, \dots, n_j + 1, \dots\}, & n_j = 0, \\ 0, & n_j = 1, \end{cases} \\ \hat{a}(\varphi_j) \Phi_A \{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \begin{cases} (-1)^{\sum_{i < j} n_i} \Phi_A \{n_0, n_1, \dots, n_j - 1, \dots\}, & n_j = 1, \\ 0, & n_j = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (17)$$

pro antisymetrický, rozšířenými na *lineární obal* celé báze (14), resp. (15) (aby se jednalo o lineární zobrazení). Operátory $\hat{a}(\varphi_j)$, $\hat{a}^\dagger(\varphi_j)$ by také korektně měly mít označení S nebo A , ale jedná se bez indexu o tolik ustálené značení, že jej také nebudeme používat.

Tímto předpisem je pro každé φ_j , $j < d$ zadán operátor $\hat{a}^\dagger(\varphi_j)$, který pro každé $N \in \mathbb{N}_0$ zobrazuje hustou podmnožinu $\mathcal{H}_N$ do $\mathcal{H}_{N+1}$, a operátor $\hat{a}(\varphi_j)$, který působí v opačném směru. Nejedná se ještě o finální zápis – budeme se potřebovat oprostít od závislosti na pevné volbě báze $(\varphi_j)_{j < d}$. To si však ponecháme na příští hodinu a zakončíme doplněním některých vlastností konstrukce Fockova stavu a těchto provizorních operátorů.

Případ konečněrozměrného $\mathcal{H}_1$

Uvažujme jednočásticový stavový prostor $\mathcal{H}_1$ konečné dimenze, tedy $d < \omega$. Podmínka konečného součtu v (14) je pak automaticky splněna a bázi *symetrizovaného* Fockova prostoru lze psát v mnohem jednodušším tvaru, kde se pro lepší přehlednost vrátíme k indexaci od 1:

$$\{\Phi_S \{n_1, n_2, \dots, n_d\} \mid n_1, \dots, n_d \in \mathbb{N}_0\}. \quad (18)$$

Uvažujme nyní nějaký jiný, *nekonečněrozměrný* separabilní Hilbertův prostor $\mathcal{G}$, například $\mathcal{G} = L^2(\mathbb{R})$, s ortonormální bází $(e_0, e_1, e_2, \dots)$. Jeho d -násobný tenzorový součin sám se sebou $\mathcal{G}^{\otimes d}$ má bázi tvořenou všemi tenzorovými součiny d členů tvaru e_n , $n \in \mathbb{N}_0$. Zobrazení

$$\Phi_S \{n_1, \dots, n_d\} \mapsto e_{n_1} \otimes e_{n_2} \otimes \dots \otimes e_{n_d} \quad (19)$$

je evidentně izomorfismem mezi $\mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1)$ a $\mathcal{G}^{\otimes d}$.

Tento postup dává možnost, jak si představit strukturu Fockova prostoru $\mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1)$. Obzvláště zajímavé je za $(e_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ vzít bázi vlastních stavů jednorozměrného lineárního harmonického oscilátoru. Potom totiž nejen prvky $\mathcal{G}^{\otimes d}$ lze brát velmi názorně jako funkce $L^2(\mathbb{R}^d)$, ale ještě akce kreačního či anihilačního operátoru (16) v tomto izomorfismu přesně odpovídá akci operátoru známého jako kreační či anihilační operátor harmonického oscilátoru. Fockův prostor nad d -rozměrným prostorem $\mathcal{H}_1$ a operace nad ním lze tedy velmi přirozeně popisovat jako složený systém d (rozlišitelných) harmonických oscilátorů.

Co se týká *antisymetrického* případu, situace je mnohem jednodušší. Tím, že obsazovací čísla jsou vymezena na nulu a jedničku, dokážeme všechny kombinace vyčerpat, například v posloupnosti binárních zápisů čísel:

$$(\Phi_A\{0, \dots, 0, 0\}, \Phi_A\{0, \dots, 0, 1\}, \Phi_A\{0, \dots, 1, 0\}, \Phi_A\{0, \dots, 1, 1\}, \dots, \Phi_A\{1, \dots, 1, 1\}) \quad (20)$$

Prostor $\mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1)$ je tedy konečněrozměrným prostorem dimenze 2^d , na který můžeme pohlížet jako na prostor d qubitů.

Nekonečněrozměrný $\mathcal{H}_1$

Pokud dimenze $\mathcal{H}_1$ je nekonečná (uvažujeme dle úvodu jen spočetně nekonečnou), předchozí analogie již *nelze použít*. V symetrickém případě by nás vedla na prostor funkcí nad $\mathbb{R}^{\mathbb{N}_0}$, který je neseparabilní a navíc nemá smysl v něm mluvit o L^2 normě, protože nemá Lebesgueovu míru (viz přednáška o Feynmanově integrálu). Nelze tedy již říci, že systém bosonů s nekonečně dimenzionálním jednočásticovým prostorem byl ekvivalentní soustavě harmonických oscilátorů.

Prostor nekonečně mnoha harmonických oscilátorů lze zavést metodami tenzorového součinu nekonečně mnoha prostorů (které jsme neprobírali) – předchozí odstavec ale říká, že mu již nelze rozumět jako prostoru funkcí. Dostaneme tak prostor nespočetné dimenze, tedy neseparabilní. Kde se obě konstrukce rozcházejí, je právě dodatečná podmínka na konečný celkový počet částic v (14). Pokud bychom ji nezařadili, kardinalita báze konstruované nad posloupnostmi $\{n_j\}_{j < d}$ by vskutku byla $\mathbb{N}_0^{\mathbb{N}_0}$, což je kontinuum. Stejně dopadne v tomto případě i antisymetrizovaný Fockův prostor – z konečné dimenze pro $d < \omega$ přeskóčí rovnou do nespočetné, pokud $d = \omega$. Dodatečná podmínka ale posloupnosti obsazovacích čísel vymezuje na spočetně mnoho možností, takže Fockův prostor zůstává separabilní.

Přímé zobecnění metod z předchozí sekce (uvažování soustavy harmonických oscilátorů, resp. dvouhladinových systémů) je tedy chybou v tom smyslu, že by dalo jiný stavový prostor než $\mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1)$, resp. $\mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1)$. Není však takovou chybou, která by zneplatnila veškeré výsledky. Fockův prostor v tomto větším prostoru tvoří uzavřený podprostor, který žádné operace získané z jednočásticových pozorovatelných nebo interakcí konečného počtu částic nemohou opustit. Je tedy možné v této analogii pracovat, držíme-li na paměti, že fyzikální budou jen takové stavy, ke kterým lze dospět čistě z těch bázeových vektorů, v nichž celkový počet excitací harmonických oscilátorů, resp. počet excitovaných stavů dvouhladinových systémů, je konečné číslo.