SZZ - Kvantová Fyzika

1. Popis stavu v kvantové mechanice – Hilbertův prostor, stavy a pozorovatelné, ortonormální báze, fyzikální význam stavu – de Broglieova hypotéza, Bornova interpretace vlnové funkce, souřadnicová, hybnostní a energetická reprezentace, jednoduché kvantové systémy – operátor kartézské složky souřadnice a hybnosti, princip korespondence – lineární harmonický oscilátor a báze vlastních stavů jeho Hamiltoniánu.

Postulát 1 | • Každému kvantovému systému přísluší komplexní (separabilní) Hilbertův prostor $\mathcal{H}$, který nazýváme stavovým prostorem daného systému

• Každému stavu systému odpovídá statistický operátor na $\mathcal{H}$

• Každé pozorovatelné veličině odpovídá samosdružený operátor na $\mathcal{H}$

Def | Hilbertův prostor je úplný vektorový prostor vybavený skalárním součinem
$\hookrightarrow$ každá Cauchyovská posloupnost v něm konverguje

Def | Statistický operátor je jaderný operátor s jednotkovou stopou

Def | Ortonormální báze Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$ je množina $\{e_\alpha\}_{\alpha \in I}$ taková, že
1) $\langle e_\alpha | e_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$

2) $\mathrm{span}\{e_\alpha\}_{\alpha \in I}$ je hustá podmnožina $\mathcal{H}$

• v některých situacích lze místo statistických operátorů pracovat s projektory na jednorozměrné podprostory a ty lze modulo fáze reprezentovat pomocí jednotkových vektorů z $\mathcal{H}$

De Broglieova hypotéza

• světlo má jak částicový tak vlnový charakter : vlnové jevy: interference, ohyb
částicové jevy: Comptonův rozptyl, fotoefekt

• „Pro popis jevů na atomární úrovni je třeba přiřadit volným kvantovým částicím s hybností $\vec{p}$ a energií E rovinnou monochromatickou vlnu $\psi_{\vec{p},E}$, nikoliv bod fázového prostoru. Tato monochromatická vlna má frekvenci úměrnou energii a její vlnová délka je nepřímo úměrná hybnosti částice, přesněji

$$\psi_{\vec{p},E}(\vec{x},t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)\right)$$ "

• de Broglieova vlna splňuje rovnici $\left(E = \frac{p^2}{2m}\right)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi_{\vec{p},E} = E\psi_{\vec{p},E} = \frac{p^2}{2m}\psi_{\vec{p},E} = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}\left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\right)\psi_{\vec{p},E} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_{\vec{p},E}$$

$\hookrightarrow$ Schrödingerova rovnice pro volnou částici

• dvouštěrbinový experiment a difrakce elektronů na krystalové mřížce potvrdily očekávané vlnové vlastnosti elektronu (hmotné částice)

Bornova interpretace vlnové funkce

- řešením Schrödingerovy rovnice jsou funkce s hodnotami v komplexních číslech
- „Řešení Schrödingerovy rovnice udává časový vývoj pravděpodobnosti nalezení částice v různých oblastech prostoru: Je-li $\psi(t,x,y,z)$ řešení Schrödingerovy rovnice popisující kvantovou částici, pak kvadrát její absolutní hodnoty $|\psi(t,x,y,z)|^2$ je úměrný hustotě pravděpodobnosti nalezení částice v okamžiku t v místě s kartézskými souřadnicemi (x,y,z)"
- Fyzikálně relevantní vlnové funkce jsou z prostoru kvadraticky integrabilních funkcí $L^2(\mathbb{R}^3)$
- $L^2(\mathbb{R}^3)$ je Hilbertův prostor, t.j. vektorový prostor se skalárním součinem
- Skalární součin dvou vlnových funkcí ϕ a ψ je definován

$$(\phi,\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\phi}(\vec{x},t)\,\psi(\vec{x},t)\, d^3x$$

Operátor polohy

- na vlnových funkcích $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ je operátor polohy definován jako

$$Q_i \psi = x_i \psi$$

- jde o operátor násobení funkcí $\Rightarrow \sigma(Q_i) = Im(x_i) = \mathbb{R}$
- souřadnicová reprezentace je přímo ta vlnová funkce

$$|\psi\rangle \equiv \psi(x) = \int_{\mathbb{R}^3} \langle \vec{x}'|\psi\rangle\, |\vec{x}'\rangle\, d^3x' = \int_{\mathbb{R}^3} \psi(\vec{x}')\, |\vec{x}'\rangle\, d^3x \qquad \text{kde } |\vec{x}'\rangle = \delta(\vec{x}'-\vec{x})$$

- definiční obor $\mathrm{Dom}\, Q_i = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) \mid x_i\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)\}$ – na tomto je i samosdružený

Operátor hybnosti

- na vlnových funkcích $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ je definován jako

$$P_j \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}\psi$$

- definičním oborem samosdruženého je Sobolevův prostor H^1, t.j. všechny kvadraticky integrabilní funkce, jejichž slabá derivace je kvadraticky integrabilní
- zobecněné vlastní funkce jsou exponenciály $|\vec{p}\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}$
- hybnostní reprezentace je Fourierova transformace vlnové funkce $\psi(\vec{x})$

$$\psi(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \langle \vec{p}|\psi\rangle\, |\vec{p}\rangle\, d^3p = \int_{\mathbb{R}} \tilde{\psi}(\vec{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}\, d^3p \qquad \tilde{\psi}(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}\, \psi(\vec{x})\, d^3x$$

Zobecněné vlastní funkce

- jsou to temperované distribuce $\mathcal{S}^*$ splňující rovnici na vlastní čísla ve slabém smyslu

$$P_j|\vec{p}\rangle = p_j|\vec{p}\rangle$$

- splňují $\int d^3_p\, |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = \mathbb{1}$ a $\langle\vec{p}|\vec{p}'\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}')$

Energetická reprezentace

- pro systémy s Hamiltoniánem s čistě bodovým spektrem můžeme zavést energetickou reprezentaci
- vlnová funkce se rozvine do báze vlastních vektorů Hamiltoniánu

Princip korespondence: Fyzikální veličiny jakožto funkce $F(x_i, p_j)$ na fázovém prostoru jsou v kvantové mechanice reprezentovány operátory, které jsou dány funkcí $F(Q_i, P_i)$ operátorů polohy Q_i a hybnosti P_i

Lineární harmonický oscilátor

- z principu korespondence máme hamiltonián $H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 Q^2$
- rovnice na vlastní čísla $H\psi = E\psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{m}{2}\omega^2 x^2 \psi = E\psi$
- substituce $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ vede na rovnici $\phi'' - \xi^2\phi + \lambda\phi = 0$, kde $\phi(\xi) = \psi(x)$ a $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$

- kvadratická integrabilita řešení vynucuje $E_n = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right)$ tedy spočetně mnoho vlastních hodnot
- příslušné vlastní funkce jsou

$$\psi_n = A_n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

kde $H_n(z)$ jsou Hermitovy polynomy definované $H_n(z) := (-1)^n e^{z^2}\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2}$

- Základní stav s energií $\frac{1}{2}\hbar\omega$ $\psi_0 = |0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$

- Zavádí se kreační a anihilační operátory $a_\pm = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}\left(Q \mp \frac{i}{M\omega}P\right)$

$\rightarrow [H, a_\pm] = \pm\hbar\omega\, a_\pm$ $\quad [a_-, a_+] = 1$

$\rightarrow a_\pm|n\rangle = \alpha_n^{(\pm)}|n\pm1\rangle$, $\quad \alpha_n^{(+)} = \sqrt{n+1}$ $\quad \alpha_n^{(-)} = \sqrt{n}$

- Základní stav splňuje $a_-|0\rangle = 0 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\psi_0 = 0 \Rightarrow \psi_0(\xi) = Ce^{-\frac{\xi^2}{2}}$

- Hamiltonián $H = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)$

2. Lineární operátory v kvantové mechanice – samosdružené operátory, unitární operátory, projektory, jaderné operátory, spektrální teorém, význam definičního oboru při hledání vlastních hodnot, projektorová míra a měření pozorovatelných s bodovým a spojitým spektrem, direktní součet a tenzorový součin operátorů, úplné soubory komutujících operátorů.

- Rozlišujeme dva druhy lineárních operátorů na Hilbertově prostoru
  1) omezené – $\|Ax\| \leq a\|x\| \quad \forall x \in \mathcal{H}$
  2) neomezené – uzavřené nemohou být všude definované
     – otevřené jsou patologické

Def| Sdružený operátor A^* k hustě definovanému operátoru A je dán následovně

pokud $\exists z \in \mathcal{H}$ takové, že $\forall x \in \mathrm{Dom}\ \langle y, Ax \rangle = \langle z, x \rangle$ pak $y \in \mathrm{Dom}\,A^*$ a $A^*y = z$

Def| Hustě definovaný uzavřený operátor A na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ je samosdružený pokud $A^* = A$

Def| Omezený operátor U nazveme unitární pokud $U^*U = UU^* = 1$

Def| Omezený operátor nazveme kompaktní pokud zobrazuje omezené množiny na prekompaktní

<=> zobrazuje omezené posloupnosti na posloupnosti s hromadným bodem

Věta| Množina kompaktních operátorů je ideálem v omezených operátorech

Věta| Každý kompaktní operátor lze aproximovat posloupností konečněrozměrných operátorů

Věta| (Singulární rozklad)
Pro každý kompaktní operátor C existují báze $(e_n)_{n<\dim\mathcal{H}}$, $(f_n)_{n<\dim\mathcal{H}}$ a posloupnost $(\mu_n)_{n<\dim\mathcal{H}}$ takové, že $\forall x \in \mathcal{H} \quad Cx = \sum_{n<\dim\mathcal{H}} \mu_n \langle e_n, x \rangle f_n$

Def| Operátor B nazveme jaderný, pokud existuje ortonormální báze $(e_n)_{n<\dim\mathcal{H}}$ taková, že
$$\sum_{n<\dim\mathcal{H}} \langle e_n, |B| e_n \rangle < \infty$$

pozn| ekvivalentně: $\sum \mu_n < \infty$

Věta| Pro jaderný operátor B konverguje řada $\sum \langle e_n, Be_n \rangle$ absolutně

Def| Stopu jaderného operátoru definujeme jako $\mathrm{Tr}\,B = \sum \langle e_n, Be_n \rangle$

<u>Vlastnosti projektorů</u>

- Operátor $E \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ je projektor <=> $E^* = E$ a $E^2 = E$
- $E \geq 0$ a $\mathrm{ran}\,E$ je vždy uzavřený podprostor
- $E+F$ je projektor <=> E a F jsou ortogonální <=> $EF = FE = 0$
- $E-F$ je projektor <=> $E \geq F$ <=> $\mathrm{Ran}\,E \supset \mathrm{Ran}\,F$ <=> $EF = FE = F$
- $E-F$ je projektor => $\mathrm{Ran}\,F \oplus \mathrm{Ran}(E-F) = \mathrm{Ran}\,E$
- EF je projektor <=> $EF = FE$ <=> $\mathrm{Ran}(EF) = \mathrm{Ran}\,E \cap \mathrm{Ran}\,F$
- každá monotónní posloupnost projektorů $\{E_n\}_{n=1}^{\infty}$ má silnou limitu $E = \text{s-}\lim_{n\to\infty} E_n$
  $\mathrm{Ran}\,E = \bigcap_{n=1}^{\infty} \mathrm{Ran}\,E_n$ ($\{E_n\}$ nerostoucí) $\quad \mathrm{Ran}\,E = \bigcup_{n=1}^{\infty} \mathrm{Ran}\,E_n$ ($\{E_n\}$ neklesající)

Projektorová míra

Def $\mathcal{A} \subset 2^X$ nazveme σ- algebrou pokud
1) $\emptyset \in \mathcal{A}$
2) $\forall n \in \mathbb{N}, M_n \in \mathcal{A} \Rightarrow \bigcup_{n=1}^{\infty} M_n \in \mathcal{A}$
3) $M \in \mathcal{A} \Rightarrow X \setminus M \in \mathcal{A}$

Def Zobrazení $E: \mathcal{A} \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$, kde $\mathcal{A}$ je σ-algebra v množině X, nazveme projektorovou mírou, pokud
1) $\forall M \in \mathcal{A}$ $E(M)$ je projektor
2) $E(X) = \mathbb{1}$
3) je-li $\{M_n\}$ nejvýše spočetný systém množin z $\mathcal{A}$, pak

$$E\left(\bigcup_n M_n\right) = \sum_n E(M_n)$$

Spektrální teorém

Věta Ke každému samosdruženému operátoru A existuje právě jedna projektorová míra E_A na $\mathbb{R}$ taková, že $A = \int_{\mathbb{R}} t \, dE_A(t)$

pozn Pro případ čistě bodového spektra $\sigma_p(A) = \{\lambda_j, j = 1, \dots\}$

$$E_A(M) = \sum_j \chi_M(\lambda_j) P_j \qquad M \text{... borellovská}$$

$$\Rightarrow A = \sum_j \lambda_j P_j$$

Postulát 2
- Možnými výsledky měření veličiny A jsou body spektra $\sigma(A)$ odpovídajícího operátoru A
- Pravděpodobnost jevu, že na systému ve stavu ϱ naměříme hodnotu pozorovatelné A ležící v borelovské množině $\Delta \subset \mathbb{R}$ je rovna
$$w(\Delta, A; \varrho) = Tr\,(E_A(\Delta) W)$$
- Je-li pro binární měření výsledek experimentu kladný, pak stav systému je popsán statistickým operátorem
$$\varrho' = \frac{E_A(\Delta)\,\varrho\, E_A(\Delta)}{Tr\,(E_A(\Delta)\varrho)}$$

Direktní součet operátorů $T_\oplus = \bigoplus_{\alpha \in I} T_\alpha$ $\quad Dom\, T_\oplus = \{ X \in \mathcal{H}_\oplus \mid \forall \alpha \in I: X(\alpha) \in D(T_\alpha), \sum_{\alpha \in I} \| T_\alpha X(\alpha) \|^2 < \infty$

$$(T_\oplus X)(\alpha) = T_\alpha X(\alpha)$$

Tenzorový součin operátorů: lineárním rozšířením vztahu $A(x \otimes y) = A_1 x \otimes A_2 y$ získáme algebraický tenzorový součin $A_1 \dot{\otimes} A_2$ s definičním oborem $Dom A_1 \dot{\otimes} Dom A_2$

$$A_1 \otimes A_2 = \overline{A_1 \dot{\otimes} A_2}$$

Komutativita operátorů

- $A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ komutují $\iff AB = BA \iff AB - BA = 0$
- $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}), T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ komutují $\iff BT \subset TB$ tzn. $BT\psi = TB\psi \quad \forall \psi \in \operatorname{Dom} T \subset \operatorname{Dom} TB$
- A_1, A_2 samosdružené komutují pokud komutují jejich spektrální míry

Úplné soubory komutujících operátorů

Def: Soubor samosdružených komutujících operátorů $\mathcal{S} = (A_1, \dots, A_n)$ je úplný, pokud každý další samosdružený operátor komutující s prvky $\mathcal{S}$ je funkcí prvků souboru $\mathcal{S}$

pozn: Pro separabilní Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ platí
$\mathcal{S}$ je úplný $\iff$ operátory, které komutují s prvky $\mathcal{S}$, komutují mezi sebou
$\iff$ existuje tzv. cyklický vektor $\varphi \in \mathcal{H}$ s vlastností: množina $\{A\varphi \mid A = f(A_1, \dots, A_n)\}$ je hustá v $\mathcal{H}$

Pokud $\mathcal{S} = \{A\}$, pak řekneme, že A má jednoduché spektrum

3. Postulát měření v kvantové mechanice – předpovědi výsledků měření, pravděpodobnostní interpretace stavu kvantové částice, pravděpodobnost přechodu mezi stavy, pravděpodobnost naměření dané množiny hodnot pozorovatelné, střední hodnota pozorovatelné, kompatibilní pozorovatelné, střední kvadratická odchylka, relace neurčitosti.

Postulát 2|

- Možnými výsledky měření veličiny A jsou body spektra $\sigma(A)$ odpovídajícího operátoru A
- Pravděpodobnost jevu, že na systému ve stavu ϱ naměříme hodnotu pozorovatelné A ležící v borelovské množině $\Delta \subset \mathbb{R}$ je rovna

$$w(\Delta, A; \varrho) = \mathrm{Tr}\,(E_A(\Delta) W)$$

- Je-li pro binární měření výsledek experimentu kladný, pak stav systému je popsán statistickým operátorem

$$\varrho' = \frac{E_A(\Delta)\, \varrho\, E_A(\Delta)}{\mathrm{Tr}\,(E_A(\Delta)\varrho)}$$

Bornova interpretace vlnové funkce

- řešením Schrödingerovy rovnice jsou funkce s hodnotami v komplexních číslech
- „Řešení Schrödingerovy rovnice udává časový vývoj pravděpodobnosti nalezení částice v různých oblastech prostoru: Je-li $\psi(t,x,y,z)$ řešení Schrödingerovy rovnice popisující kvantovou částici, pak kvadrát její absolutní hodnoty $|\psi(t,x,y,z)|^2$ je úměrný hustotě pravděpodobnosti nalezení částice v okamžiku t v místě s kartézskými souřadnicemi (x,y,z)"
- Fyzikálně relevantní vlnové funkce jsou z prostoru kvadraticky integrabilních funkcí $L^2(\mathbb{R}^3)$
- $L^2(\mathbb{R}^3)$ je Hilbertův prostor, t.j. vektorový prostor se skalárním součinem
- Skalární součin dvou vlnových funkcí ϕ a ψ je definován

$$(\phi, \psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\phi}(\vec{x}, t)\, \psi(\vec{x}, t)\, d^3x$$

Postulát měření pro čisté stavy $(\varrho = E_\psi)$

$$w(\Delta, A; E_\psi) = \mathrm{Tr}\,(E_A(\Delta) E_\psi) = \langle \psi | E_A(\Delta) \psi \rangle = \| E_A(\Delta) \psi \|^2$$

- pro veličinu s čistě bodovým spektrem máme $E_A(\Delta) = \sum_j \chi_\Delta(\lambda_j) P_j$

– je-li navíc nedegenerované, pak $P_j = |j\rangle\langle j|$

$\Rightarrow w(A = \lambda_j, \psi) = \langle \psi | j \rangle \langle j | j \rangle \langle j | \psi \rangle = |\langle j | \psi \rangle|^2$ ... pravděpodobnost přechodu do stavu $|j\rangle$

$\rightarrow$ Pravděpodobnost přechodu $\psi \rightarrow \phi$: $w_{\psi \rightarrow \phi} = |\langle \phi | \psi \rangle|^2$

Střední hodnota pozorovatelné

$$w(\Delta, A; E_\psi) = \mathrm{Tr}(E_A(\Delta) E_\psi) = \langle \psi | E_A(\Delta) | \psi \rangle =: \mu_\psi^{(A)}(\Delta)$$

$$\langle A \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, d\mu_\psi^{(A)}(\lambda) = \langle \psi | \int_{\mathbb{R}} \lambda \, dE_A(\lambda) | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

$\to$ ψ musí ležet v definičním oboru A jinak výraz nemá smysl

- pro smíšený stav je pravděpodobnostní míra rovna $\mu_\rho^{(A)}(\Delta) = \mathrm{Tr}(E_A(\Delta)\rho)$

$$\langle A \rangle_\rho = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, d\mu_\rho^{(A)}(\lambda) = \mathrm{Tr}(A\rho)$$

$\hookrightarrow$ pokud $A\rho$ je jaderný operátor, ale existují i dvojice A, ρ, kdy $A\rho$ není jaderný ale integrál existuje

Kompatibilita pozorovatelných

- pořadí měření kompatibilních veličin nemá vliv na výsledek

$$w(A_1, \Delta_1; A_2, \Delta_2; \psi) = \mathrm{Tr}(E_{A_2}(\Delta_2)\rho') \, w(A_1, \Delta_1; \psi) = \mathrm{Tr}(E_{A_2}(\Delta_2) E_{A_1}(\Delta_1) E_\psi E_{A_1}(\Delta_1))$$

$$= \langle \psi | E_1 E_2 E_1 | \psi \rangle$$

$$w(A_2, \Delta_2; A_1, \Delta_1; \psi) = \langle \psi | E_2 E_1 E_2 | \psi \rangle$$

- pokud $\langle \psi | E_1 E_2 E_1 - E_2 E_1 E_2 | \psi \rangle = 0$ pro všechna ψ, pak $E_1 E_2 E_1 - E_2 E_1 E_2 = 0$

$$\to (E_1 E_2 - E_2 E_1)^* (E_1 E_2 - E_2 E_1) = -(E_1 E_2 - E_2 E_1)^2 = -E_1 E_2 E_1 E_2 + E_1 E_2 E_1 + E_2 E_1 E_2 - E_2 E_1 E_2 E_1$$

$$= (E_1 - E_2)(E_1 E_2 E_1 - E_2 E_1 E_2) = 0$$

$\Rightarrow E_1 E_2 = E_2 E_1 \iff A_1$ komutuje s A_2

Střední kvadratická odchylka

$$(\Delta A)_\rho = \sqrt{\langle A^2 \rangle_\rho - \langle A \rangle_\rho^2} \qquad (\Delta A)_\rho^2 = \int_{\mathbb{R}} (\lambda - \langle A \rangle_\rho)^2 \, d\mu_\rho^{(A)}(\lambda)$$

Relace neurčitosti

$$(\Delta A_1)_\rho (\Delta A_2)_\rho \geq \frac{1}{2} |\mathrm{Tr}((A_1 A_2 - A_2 A_1)\rho)|$$

Důkaz BÚNO $\langle A_1 \rangle_\rho = \langle A_2 \rangle_\rho = 0$

$$\varphi \in \mathrm{Ran}\,\rho \quad 0 \leq \|(A_1 + i\alpha A_2)\varphi\|^2 = \|A_1\varphi\|^2 - 2\alpha \,\mathrm{Im} \langle A_1\varphi, A_2\varphi \rangle + \alpha^2 \|A_2\varphi\|^2$$

$$= \langle \varphi, A_1^2 \varphi \rangle + i\alpha \langle \varphi, (A_1 A_2 - A_2 A_1)\varphi \rangle + \alpha^2 \langle \varphi, A_2^2 \varphi \rangle$$

$\Rightarrow \mathrm{Tr}(A_1^2 \rho) + \alpha \,\mathrm{Tr}(i(A_1 A_2 - A_2 A_1)\rho) + \alpha^2 \mathrm{Tr}(A_2^2 \rho) \geq 0 \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}$

$\Rightarrow$ diskriminant je záporný $D^2 = (\mathrm{Tr}(i(A_1 A_2 - A_2 A_1)\rho))^2 - 4\,\mathrm{Tr}(A_1^2 \rho)\,\mathrm{Tr}(A_2^2 \rho)$

Heisenbergovy relace neurčitosti $(\Delta Q_j)_\rho (\Delta P_k)_\rho \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{jk}$

4. Čisté a smíšené stavy, matice hustoty – fyzikální odůvodnění statistického popisu pomocí matice hustoty, definice matice hustoty, smíšené stavy po průchodu měřicím přístrojem, matice hustoty dvouhladinového systému, Blochova sféra, časový vývoj matice hustoty, předpovědi výsledků měření pro smíšené stavy.

Analogie se statistickou fyzikou

- hustota pravděpodobnosti $\rho(x,p)$ splňuje

$$\int \rho(x,p)\,dx\,dp = 1 \qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = 0$$

- střední hodnota pozorovatelné A je dána

$$\langle A \rangle_\rho = \int A(x,p)\,\rho(x,p)\,dx\,dp$$

Matice hustoty

- Stavu $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ můžeme přiřadit projektor $|\psi\rangle\langle\psi|$ ... čistý stav
- V analogii s hustotou pravděpodobnosti můžeme zavést matici hustoty jako kombinaci těchto projektorů

$$\rho = \sum w_\gamma |\psi_\gamma\rangle\langle\psi_\gamma| \,, \quad \sum w_\gamma = 1 \iff \mathrm{Tr}\,\rho = 1$$

Postulát 1| Každému stavu kvantového systému odpovídá nějaká matice hustoty splňující

- $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$
- $\rho^\dagger = \rho$
- $\rho \geq 0$

Postulát 2| Pravděpodobnost naměření hodnoty a pozorovatelné $\hat{A}$ je dána

$w_{A=a}(\rho) = \mathrm{Tr}(P_{A=a}\,\rho)$, kde $P_{A=a}$ je projektor na vlastní podprostor k a

Po naměření tohoto výsledku se systém nachází ve stavu

$$\rho' = \frac{P_{A=a}\,\rho\,P_{A=a}}{\mathrm{Tr}(P_{A=a}\,\rho)}$$

Postulát 3| Časový vývoj matice hustoty se řídí (von Neumannovou) rovnicí $i\hbar \frac{d}{dt}\rho(t) = [H, \rho(t)]$

Matice hustoty pro dvojhladinový systém ($\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$)

- $(\mathbb{1}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ tvoří bázi samosdružených operátorů na $\mathbb{C}^2$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- $\mathrm{Tr}\,\sigma_i = 0$, $\mathrm{Tr}\,\mathbb{1} = 2 \Rightarrow \rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{\alpha}\cdot\vec{\sigma})$
- ρ musí být pozitivní operátor a jeho vlastní čísla

$$\lambda_\pm = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Tr}\,\rho \pm \sqrt{(\mathrm{Tr}\,\rho)^2 - 4\det\rho}\right) \qquad \det\rho = \frac{1}{4}\left(1 - \alpha_3^2 - \alpha_1^2 - \alpha_2^2\right)$$

$$= \frac{1 \pm \sqrt{\vec{\alpha}\cdot\vec{\alpha}}}{2} \Rightarrow |\vec{\alpha}| \leq 1 \text{ ... Blochova sféra}$$

- Matice hustoty je vhodná pro popis složených systémů, protože můžeme získat lokální popis podsystému odtracováním zbytku systému a tím postihnout provázání
- Entropie kvantového systému je $S = -\mathrm{Tr}(\rho \ln \rho)$, ta je nulová pro čisté stavy
- Provázání snižuje čistotu stavu $\mathrm{Tr}\,\rho^2$ a zvyšuje entropii

Měření bez zaznamenání výsledků

$$\rho_A = \sum_{a \in \sigma(A)} P_{A=a}\,\rho\,P_{A=a}$$

5. Částice ve sféricky symetrickém poli – kompatibilní pozorovatelné, operátory orbitálního momentu hybnosti, kulové funkce, hamiltonián částice v centrálně symetrickém potenciálu, efektivní potenciál, degenerace hladin, izotropní harmonický oscilátor, částice v Coulombickém poli.

Kompatibilní pozorovatelné

- stav kvantové částice chceme jednoznačně určit pomocí změření několika pozorovatelných
- ty by se navzájem neměly ovlivňovat, t.j. změřením jedné se nezmění hodnota druhé

=> příslušné samosdružené operátory musí komutovat

- $AB - BA = 0$
- komutují spektrální míry dvou samosdružených neomezených operátorů

Orbitální moment hybnosti

- z principu korespondence máme

$$L_i = \varepsilon_{ijk} Q_j P_k = -i\hbar\, \varepsilon_{ijk}\, x_j \frac{\partial}{\partial x_k}$$

- komutační relace $[L_i, L_j] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk} L_k$, $[L_i, L^2] = 0$

Kulové funkce

- společné vlastní funkce L_3 a L^2

$$L_3 Y_{lm} = m\hbar\, Y_{lm} \qquad m = -l, \dots, l$$

$$L^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2\, Y_{lm} \qquad l = 0, 1, 2, \dots$$

- $Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_{lm} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$, $P_l^m(t) = \frac{(1-t^2)^{m/2}}{2^l\, l!} \frac{d^{l+m}}{dt^{l+m}} (t^2 - 1)^l$ ... přidružený Legendreův polynom
- po volbu normalizace $|C_{lm}|^2 = \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi (l+m)!}$ tvoří kulové funkce ortonormální bázi prostoru $L^2(\langle 0, \pi\rangle \times \langle 0, 2\pi\rangle, \sin\theta\, d\theta\, d\varphi)$
- $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\theta d\varphi$ hustota pravděpodobnosti nalezení částice v prostorovém úhlu $d\Omega$

Částice v centrálně symetrickém potenciálu

- z principu korespondence máme $H = \frac{1}{2M} P^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(r)$
- úplný soubor kompatibilních pozorovatelných: H, L_3, L^2
- úloha se řeší ve sférických souřadnicích $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$
- úhlová závislost se vyřeší v kulových funkcích $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi)$
- bezčasová Schrödingerova rovnice

$$E\psi = H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \right) + V(r) \right] R(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

- substitucí $R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ se úloha redukuje na částici na polopřímce s okrajovou podmínkou $\chi(0) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \chi'' + V_{ef}(r) \chi = E\chi \text{ , kde } V_{ef}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

- energetické hladiny mají degeneraci alespoň $2l+1$

Izotropní harmonický oscilátor $V(r) = \frac{1}{2} M\omega^2 r^2$

- $E_{n,l,m} = \hbar\omega \left(\frac{3}{2} + 2n + l\right)$ $n, l \in \mathbb{N}_0$, $m = -l, \dots, l$
- zavádí se $N = 2n + l$ hlavní kvantové číslo
- degenerace energetické hladiny $\hbar\omega(N + \frac{3}{2})$ je $\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$
- $V(r)$ je zdola omezená funkce $\Rightarrow$ na $\mathrm{Dom}\, H = \{\psi \in H^2(\mathbb{R}^3) \mid H\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)\}$ je H samosdružený

Coulombický potenciál $V(r) = -\frac{Q}{r}$

- Kato-Rellichova věta $\Rightarrow$ $H = H_0 + V(r)$ je samosdružený a zdola omezený
- $E_{N,l,m} = -\frac{R}{N^2}$, $N = n + l + 1$, $R = \frac{MQ^2}{2\hbar^2}$
- degenerace energetické hladiny $-\frac{R}{N^2}$ je rovna $\sum_{l=0}^{N-1} (2l+1) = N^2$

6. Částice v elektromagnetickém poli – nabitá kvantová částice ve vnějším elektromagnetickém poli, atom vodíku ve vnějším homogenním magnetickém poli, Zeemanův jev, spin elektronu, operátory spinu a jejich komutační relace, Pauliho matice, Sternův-Gerlachův experiment, časová a bezčasová Pauliho rovnice.

Částice ve vnějším elektromagnetickém poli

- z principu korespondence máme $H = \frac{1}{2M}(\vec{P} - q\vec{A})^2 + q\phi$
- operátory $\vec{P}$ a $\vec{A}$ nekomutují $[\vec{P}, \vec{A}] = -i\hbar \operatorname{div}\vec{A}$

$\longrightarrow$ $H = \frac{1}{2M}P^2 - \frac{q}{2M}(\vec{P}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{P}) + \frac{q^2}{2M}A^2 + q\phi = \frac{1}{2M}P^2 - \frac{q}{M}\vec{A}\cdot\vec{P} + \frac{q^2}{2M}A^2 + q\phi - i\hbar\operatorname{div}\vec{A}$

Částice ve vnějším homogenním magnetickém poli

- $\vec{B}(\vec{x},t) = \text{const}$ je dáno $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{x}$

$\longrightarrow$ $H = \frac{1}{2M}P^2 - \frac{q}{2M}\vec{B}\cdot\vec{L} + \frac{q^2}{8M}(\vec{B}\times\vec{Q})^2 + q\phi$

- pro popis atomu vodíku lze třetí člen $\frac{q^2}{8M}(\vec{B}\times\vec{Q})^2$ zanedbat a získáme Hamiltonián tvaru
  $H = H_0 - \vec{\mu}_{orb}\cdot\vec{B}$, $\vec{\mu}_{orb} = \frac{q}{2M}\vec{L}$
- pokud $\phi(\vec{x})$ je sféricky symetrický – jako Coulombovský potenciál, pak máme vlastní funkce

$$H_0\psi_{E,l,m} = E\,\psi_{E,l,m}$$
$$L^2\psi_{E,l,m} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{E,l,m}$$
$$L_3\psi_{E,l,m} = \hbar m\,\psi_{E,l,m}$$

- zvolíme-li souřadnice takové, že $\vec{B} = (0,0,B)$ pak dostaneme

$$H\psi_{E,l,m} = (E \mp \mu_0 m B)\psi_{E,l,m}, \quad \mu_0 = \frac{|q|\hbar}{2M}$$

  − kladně nabitá částice
  + záporně nabitá částice

$\longrightarrow$ v přítomnosti magnetického pole se původní hladiny rozštěpí na $2l+1$ hladin (Zeemanův jev)
 – zpětně navíc se štěpí i základní hladina

Spin

- Stern–Gerlachův experiment – svazek atomů stříbra v nehomogenním magnetickém poli se dělí na dva svazky

$\Rightarrow$ elektron má nějaký skrytý vnitřní stupeň volnosti – vlastní magnetický moment

- aby základní stav mohl být degenerovaný musíme uvažovat alespoň dvousložkové vlnové funkce
  $\Psi = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$
- operátoru projekce vlastního magnetického momentu do osy z je dán operátorem

$$\mu_3 = \begin{pmatrix}\mu_0 & 0\\ 0 & -\mu_0\end{pmatrix}$$

- G. Uhlenbeck, S. Goudsmit (1925): vlastní magnetický moment elektronu je důsledkem nenulového vlastního momentu hybnosti – spinu

- operátor spinu má tři složky S_x, S_y, S_z splňující komutační relace $[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k$

$\longrightarrow \vec{\mu} = \frac{2\mu_0}{\hbar} \vec{S}$

- operátory spinu jsou realizovány pomocí Pauliho matic
$S_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j \qquad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Pauliho rovnice

$H = \frac{1}{2M}(\vec{P} + e\vec{A})^2 - e\phi + \frac{2\mu_0}{\hbar}\vec{B}\cdot\vec{S}$, kde $\vec{P}, \vec{A}$ a ϕ působí na $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ a $\vec{S}$ působí na $\mathbb{C}^2$

- zvolíme souřadnice tak, aby $\vec{B} = (0, 0, \vec{B})$
$\longrightarrow H = H_0 + \frac{\mu_0 B}{\hbar}(L_3 + 2S_3)$

- H_0, L_3, L^2 mají společné vlastní funkce $\psi_{N,l,m}$

- S_3 má vlastní vektory $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ s vlastními čísly $\pm\frac{\hbar}{2}$

- vlastní funkce Pauliho hamiltoniánu jsou
$\Psi_{N,l,m,+} = \begin{pmatrix} \psi_{N,l,m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{N,l,m,-} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{N,l,m} \end{pmatrix}$
- energetické hladiny (bezčasová Pauliho rovnice)
$E_{N,l,m,\pm} = E_N + \frac{\mu_0 B}{\hbar}\left(m\hbar \pm 2\cdot\frac{\hbar}{2}\right) = E_n + \mu_0 B(m \pm 1)$

$\longrightarrow$ hladina s daným l se rozštěpí na $2l+3$ hladin a pro $l=0$ se rozštěpí na dvě (Zeemanův jev)

Časová Pauliho rovnice

$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi$
- separujeme hamiltonián na spinovou a nespinovou část $H = H_{L^2(\mathbb{R}^3)} + H_S$

- jsou-li ϕ_j, $j=1,2$ řešení Schrödingerovy rovnice
$i\hbar\frac{\partial\phi_j}{\partial t} = H_{L^2(\mathbb{R}^3)}\phi_j$
pak řešení Pauliho rovnice můžeme psát ve tvaru
$\Psi(\vec{x}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu_0\vec{B}\cdot\vec{\sigma}\, t\right)\begin{pmatrix} \phi_1(\vec{x}, t) \\ \phi_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix}$

7. Kvantování momentu hybnosti – algebraická teorie momentu hybnosti, posunovací operátory, orbitální a spinový moment hybnosti, skládání momentů hybnosti, ireducibilní tenzorové operátory, Wigner-Eckartův teorém.

Algebraická teorie momentu hybnosti

- moment hybnosti splňuje komutační relace

$$[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \quad , \quad [L_j, L^2] = 0$$

- typicky se hledají vlastní vektory L_3 a L^2 ozn. $|\lambda, \mu\rangle$

$$L_3|\lambda,\mu\rangle = \mu|\lambda,\mu\rangle$$

$$L^2|\lambda,\mu\rangle = \lambda|\lambda,\mu\rangle$$

- posunovací operátory $L_\pm = L_1 \pm i L_2$

$$[L^2, L_\pm] = 0, \; [L_3, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm \; , \; [L_+, L_-] = 2\hbar L_3$$

$$\longrightarrow \quad L^2(L_\pm|\lambda,\mu\rangle) = L_\pm(L^2|\lambda,\mu\rangle) = \lambda L_\pm|\lambda,\mu\rangle$$

$$L_3(L_\pm|\lambda,\mu\rangle) = (L_\pm L_3 \pm \hbar L_\pm)|\lambda,\mu\rangle = (\mu \pm \hbar) L_\pm|\lambda,\mu\rangle$$

$$\| L_\pm|\lambda,\mu\rangle\|^2 = \langle\lambda,\mu| L_\mp L_\pm|\lambda,\mu\rangle = \langle\lambda,\mu| L^2 - L_3^2 \mp \hbar L_3|\lambda,\mu\rangle = (\lambda - \mu^2 \mp \hbar\mu)\langle\lambda,\mu|\lambda,\mu\rangle \geq 0$$

$\Rightarrow \lambda \geq \mu(\mu \pm \hbar) \Rightarrow$ musí existovat nějaké maximální μ_{max} a minimální μ_{min}
vektor se zápornou normou jinak bychom vygenerovali

$$\Rightarrow \quad \lambda = \mu_{min}(\mu_{min} - \hbar) = \mu_{max}(\mu_{max} - \hbar)$$

- ozn $k\hbar := \mu_{max} - \mu_{min} \longrightarrow \lambda = \mu_{max}(\mu_{max} - \hbar) = (\mu_{max} - k\hbar)(\mu_{max} - (k+1)\hbar) \longrightarrow k = -1 \vee k = \frac{2\mu_{max}}{\hbar}$

$\Rightarrow \mu_{max} = -\mu_{min}$ a μ_{max} je celočíselný násobek $\hbar$

Skládání momentů hybnosti

- máme dva systémy s momenty hybnosti $\vec{L}_{(1)}$ a $\vec{L}_{(2)}$, $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_2$
- složením dostaneme systém $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ s $\vec{L} = \vec{L}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \vec{L}_2$

- cílem je přejít od pozorovatelných $L_{(1)3}, L^2_{(1)}, L_{(2)3}, L^2_{(2)}$ a báze $|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$
k pozorovatelným $L^2_{(1)}, L^2_{(2)}, L^2, L_3$ a bázi $|l_1, l_2; l, m\rangle$

- Transformace je dána Clebsh-Gordanovými koeficienty

$$|l_1, l_2; l, m\rangle = \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} (l_1, l_2, m_1, m_2 | l, m) \, |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$$

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

- Wignerovy 3j-symboly

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

Def: Ireducibilní tenzorový operátor k-tého řádu $\mathbb{T}(k)$ je soubor $2k+1$ operátorů $\left(T(k,q)\right)_{q=-k}^{k}$ tak, že

$$[L_3, T(k,q)] = q\hbar\, T(k,q)$$

$$[L_\pm, T(k,q)] = \alpha^{(\pm)}(k,q)\, T(k,q\pm1) \qquad |\alpha^{(\pm)}(k,q)| = \sqrt{k(k+1)-q(q\pm1)}$$

<u>Wigner–Eckartův teorém</u>

$$\langle a, l_1, m_1 | T(k,q) | b, l_2, m_2 \rangle = (-1)^{l_1-m_1}\begin{pmatrix} l_1 & k & l_2 \\ -m_1 & q & m_2 \end{pmatrix} (a, l_1 \| \mathbb{T}(k) \| b, l_2)$$

$$= (-1)^{l_1+k-l_2} \frac{(k, l_2, q, m_2 | l_1, m_1)}{\sqrt{2l_1+1}} (a, l_1 \| \mathbb{T}(k) \| b, l_2)$$

$(a, l_1 \| \mathbb{T}(k) \| b, l_2)$ je redukovaný maticový element, který stačí spočítat pro jednu volbu q, m_1, m_2 tak, že $(k, l_2, q, m_2 | l_1, m_1) \neq 0$

→ stačí spočítat jeden maticový element pro dané l_1, l_2, k a ostatní lze dopočítat formulkou výše

$k=0$ ... skalární operátory

$k=1$ ... vektorový operátor $\quad V(1,1) = -\frac{1}{\sqrt{2}}(V_1 + iV_2)$, $V(1,0) = V_3$, $V(1,-1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_1 - iV_2)$

$k=2$ ... tensor druhého řádu $\quad T_{ij} = \underset{\substack{\downarrow \\ \text{skalár}}}{D_{ij}} + \underset{\substack{\downarrow \\ \text{vektor}}}{A_{ij}} + S_{ij}$

$$T(2,2) = \frac{1}{\sqrt{6}}(S_{11} - S_{22} + 2i S_{12})$$

$$T(2,1) = -\sqrt{\tfrac{2}{3}}(S_{31} + iS_{32})$$

$$T(2,0) = S_{33}$$

$$T(2,-1) = \sqrt{\tfrac{2}{3}}(S_{31} - iS_{32})$$

$$T(2,-2) = \frac{1}{\sqrt{6}}(S_{11} - S_{22} - 2i S_{12})$$

8. Časový vývoj v kvantové mechanice – unitární propagátor, Schrödingerova rovnice, stacionární stavy, řešení časového vývoje rozkladem do stacionárních stavů, časový vývoj střední hodnoty pozorovatelné, integrály pohybu, Ehrenfestova věta, Schrödingerův, Heisenbergův a Diracův obraz kvantové mechaniky, přechod mezi obrazy, časový vývoj stavů a pozorovatelných v jednotlivých obrazech.

Postulát 3, • Je-li stav částice v čase t_0 popsán vektorem $|\psi\rangle$, pak stav částice $|\psi(t)\rangle$ v čase $t>t_0$ je určen řešením Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad \text{s počáteční podmínkou } |\psi(t_0)\rangle = |\psi\rangle$$

kde H je hamiltonián daného systému.

• Časový vývoj matice hustoty je dán von Neumannovou rovnicí $i\hbar \frac{d}{dt}\rho(t) = [H, \rho(t)]$

• Schrödingerova rovnice poskytuje unitární evoluci

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = 0$$

• hustota toku pravděpodobnosti $\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{i\hbar}{2M}\left(\psi(\vec{x},t)\nabla\psi(\vec{x},t)^* - \psi^*(\vec{x},t)\nabla\psi(\vec{x},t)\right)$

$$= \frac{1}{2M}\left(\psi^*(\vec{x},t)\vec{P}\psi(\vec{x},t) - \psi(\vec{x},t)\vec{P}\psi^*(\vec{x},t)\right)$$

• rovnice kontinuity $\frac{\partial\rho}{\partial t}(\vec{x},t) + \operatorname{div}\vec{j}(\vec{x},t) = 0$, $\rho(\vec{x},t) = |\psi(\vec{x},t)|^2$

• vlastní vektory Hamiltoniánu dávají stacionární stavy $\psi(\vec{x},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}\psi_E(\vec{x})$

• pokud vlastní funkce Hamiltoniánu tvoří bázi pak můžeme počáteční podmínku $\psi(\vec{x},0) = \psi_0(\vec{x})$ rozložit do této báze

$$\psi_0(\vec{x}) = \sum_n (\psi_n, \psi_0)\,\psi_n(\vec{x})$$

• řešení Schrödingerovy rovnice pak je $\psi(\vec{x},t) = \sum_n (\psi_n,\psi_0)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\psi_n(\vec{x})$

Def. Operátorovou funkci $U(t,s)$ s hodnotami v unitárních operátorech nazveme unitárním propagátorem, pokud splňuje $U(r,s)U(s,t) = U(r,t)$ $\forall r,s,t \in \mathbb{R}$

• splňuje diferenciální rovnici $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = H\,U(t,t_0)$

$\rightarrow$ pro konzervativní systémy $U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right)$

pro čistě bodové spektrum $U(t,t_0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$

Časový vývoj středních hodnot

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_\rho = \frac{d}{dt}\operatorname{Tr}(A\rho) = \operatorname{Tr}\left(\frac{\partial A}{\partial t}\rho + A\frac{d\rho}{dt}\right) = \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_\rho + \operatorname{Tr}\left(\frac{i}{\hbar}A[H,\rho]\right) = \left\langle\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[H,A]\right\rangle_\rho$$

• pozorovatelnou A nazveme integrálem pohybu, pokud pro jakékoli řešení Schrödingerovy rovnice platí $\frac{d}{dt}\langle A\rangle = 0$

$$\Longleftrightarrow \quad \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[H,A] = 0$$

Ehrenfestovy teorémy – evoluce střední hodnoty polohy a hybnosti

$$\frac{d}{dt}\langle Q_j\rangle = \left\langle \frac{P_j}{M}\right\rangle \qquad \frac{d}{dt}\langle P_j\rangle = \underbrace{\left\langle -\frac{\partial V}{\partial x_j}\right\rangle}_{\text{střední hodnota síly}}$$

- klasickou sílu by člověk dostal pokud $\left\langle -\frac{\partial V}{\partial x_j}\right\rangle = -\frac{\partial V}{\partial x_j}(\langle \vec{Q}\rangle) \rightarrow$ platí pro nejvýše kvadratické potenciály

Obrazy časového vývoje v kvantové mechanice

- Schrödingerův obraz – v čase se vyvíjejí pouze stavy
  - časová závislost pozorovatelných je vnesena zvenčí a není důsledkem dynamiky
  - evoluční operátor $U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right)$

- Heisenbergův obraz
  - stavy se dynamicky nevyvíjejí $|\psi^H\rangle \equiv |\psi(t_1)\rangle = U^{-1}(t,t_1)|\psi(t)\rangle$
  - dynamika je převedena do pozorovatelných
    $A^H = U^\dagger(t,t_1)\, A\, U(t,t_1)$
  - to nemění střední hodnoty pozorovatelných
  - časový vývoj: $\frac{d}{dt}A^H = \frac{1}{i\hbar}[A^H, H^H]\left(+\, U^\dagger(t,t_1)\frac{\partial A}{\partial t}U(t,t_1)\right)$

- Diracův (interakční) obraz
  - pro hamiltonián tvaru $H = H_0 + V$, kde H_0 nezávisí na čase
  $\rightarrow U_0(t,t_1) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_1)\right)$
  - stavy $|\psi^D\rangle = U_0^\dagger(t,t_1)|\psi(t)\rangle$
  - pozorovatelné $A^D = U_0^\dagger(t,t_1)\, A\, U_0(t,t_1)$
  - časový vývoj stavů $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi^D\rangle = V^D|\psi^D\rangle$
  - časový vývoj pozorovatelných $\frac{d}{dt}A^D = \frac{1}{i\hbar}[A^D, H_0]\left(+\, U_0^\dagger(t,t_0)\frac{\partial A}{\partial t}U_0(t,t_0)\right)$
  - evoluční operátor v Diracově obraze $|\psi^D(t)\rangle = S(t,t_0;t_1)|\psi^D(t_0)\rangle$
  $\rightarrow$ je řešením rovnice $i\hbar\frac{d}{dt}S(t,t_0;t_1) = V^D S(t,t_0;t_1)$ s počáteční podmínkou $S(t_0,t_0;t_1) = 1$
  - $S(t,t_0;t_1) = U_0^\dagger(t,t_1)\,U(t,t_0)\,U_0(t_0,t_1)$

9. Feynmanův dráhový integrál a propagátor – poruchový rozvoj evolučního operátoru, retardovaný a advanceovaný propagátor, jejich časový vývoj, Greenova funkce, vyjádření propagátoru pomocí dráhového integrálu, popis rozptylu pomocí dráhového integrálu.

Dysonův rozvoj evolučního operátoru

- časově nezávislý hamiltonián s poruchou $H = H_0 + \varepsilon V(t)$
- rozvoj evolučního operátoru v Diracově obrazu

$$S(t_f, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n S^{(n)}(t_f, t_0)$$

- z rovnice $i\hbar \frac{d}{dt} S(t, t_0) = \varepsilon V^D(t) S(t, t_0)$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} S^{(0)} = 0 \quad \Rightarrow S^{(0)} = 1$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} S^{(1)} = V^D(t) S^{(0)} = V^D(t) \quad \Rightarrow \quad S^{(1)}(t_f, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} V^D(t_1)\, dt_1$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} S^{(2)} = V^D(t) S^{(1)} \quad \Rightarrow \quad S^{(2)}(t_f, t_0) \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \; V^D(t_2) V^D(t_1)$$

$$\Rightarrow \quad S^{(n)}(t_f, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t_f} dt_n \int_{t_0} dt_{n-1} \cdots \int_{t_0} dt_1 \; V^D(t_n) V^D(t_{n-1}) V^D(t_{n-2}) \cdots V^D(t_1)$$

- využitím časového uspořádání dostaneme

$$S(t_f, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\right)^n \int_{t_0}^{t_f} dt_n \cdots \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \; T\left[V^D(t_n) \cdots V^D(t_1)\right] \equiv T\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon \int_{t_0}^{t_f} V^D(t)\, dt\right)\right]$$

Propagátor

- propagátor je integrální jádro, které převádí vlnovou funkci $\psi(\vec{x}_0, t_0)$ na $\psi(\vec{x}_f, t_f)$

$$\psi(\vec{x}_f, t_f) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_0 \; K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0)\, \psi(\vec{x}_0, t_0)$$

- tzv. propagátor je maticový element evolučního operátoru v x-reprezentaci

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \langle \vec{x}_f | U(t_f, t_0) | \vec{x}_0 \rangle$$

$\rightarrow$ je řešením Schrödingerovy rovnice s počáteční podmínkou

$$i\hbar \frac{d}{dt} K(\vec{x}_f, t; \vec{x}_0, t_0) = H K(\vec{x}_f, t; \vec{x}_0, t_0), \quad K(\vec{x}_f, t_0; \vec{x}_0, t_0) = \delta(\vec{x}_f - \vec{x}_0)$$

- retardovaný propagátor $K^{(+)}(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \Theta(t_f - t_0)\, K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0)$
- advancovaný propagátor $K^{(-)}(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \Theta(t_0 - t_f)\, K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0)$

Dráhový integrál

- interval $\langle t_0, t_f \rangle$ rozdělíme na úseky délky $\Delta t = \frac{t_f - t_0}{N+1}$

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \langle \vec{x}_f | U(t_f, t_0) | \vec{x}_0 \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_N \prod_{k=1}^{N+1} \langle \vec{x}_k | U(t_k, t_{k-1}) | \vec{x}_{k-1} \rangle, \quad \vec{x}_f \equiv \vec{x}_{N+1}, \; t_f \equiv t_{N+1}$$

- pro malá Δt $\quad U(t_k, t_{k-1}) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t\, H(t_k), \quad H(t) = \frac{P^2}{2M} + V(t)$

$$\approx 1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{P^2}{2M} - \frac{i}{\hbar} \Delta t\, V(t) \approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t\, V(t)\right)\left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{P^2}{2M}\right)$$

$$\approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t\, V(t)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{P^2}{2M}\right)$$

$$\langle \vec{x}_k | U(t_k, t_{k-1}) | \vec{x}_{k-1} \rangle \approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t\, V(t)\right) \langle \vec{x}_k | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t \frac{P^2}{2M}\right) | \vec{x}_{k-1} \rangle$$
$$= \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{3/2} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\Delta t \left(\frac{1}{2}\frac{\Delta \vec{x}^2}{\Delta t^2} - V(t)\right)\right]$$

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \lim_{N\to\infty} \int d^3x_1 \dots \int d^3x_N \prod_{k=1}^{N+1} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar} L(\vec{x}_k, \frac{\Delta \vec{x}_k}{\Delta t}, t_k)\Delta t}$$
$$= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{3(N+1)/2} \int \left(\prod_{k=1}^{N} d^3x_k\right) e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N+1} L(\vec{x}_j, \frac{\Delta \vec{x}_j}{\Delta t}, t_j)\Delta t}$$
$$= \int \mathcal{D}\vec{x}\, \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f} L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t)\, dt\right) = \int \mathcal{D}\vec{x}\, e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(t)]}$$

- převedeme-li Dysonovu řadu do Schrödingerova obrazu, dostaneme pro n-tý člen

$$U^{(n)}(t_f, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0 < t_1 < t_2 < t_f} \dots \int dt_1 \dots dt_n\, U_0(t_f, t_n) V(t_n) U_0(t_n, t_{n-1}) V(t_{n-1}) U_0(t_{n-1}, t_{n-2}) \dots U_0(t_2, t_1) V(t_1) U_0(t_1, t_0)$$

- pro propagátor tedy máme

$$K^{(n)}(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0 < t_1 < \dots < t_f} \dots \int dt_1 dt_2 \dots dt_n \int d^3x_1 \dots \int d^3x_n\, K_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_n, t_n) V(\vec{x}_n, t_n) K_0(\vec{x}_n, t_n; \vec{x}_{n-1}, t_{n-1}) \dots V(\vec{x}_1, t_1) K_0(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0)$$

- pro retardovaný propagátor nemusíme klást meze integrace

$$K^{(+)(n)}(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \prod_{k=1}^{n}\left(\int d^3x_k \int_{t_0}^{t_f} dt_k\right) K_0^{(+)}(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_n, t_n) V(\vec{x}_n, t_n) K_0^{(+)}(\vec{x}_n, t_n; \vec{x}_{n-1}, t_{n-1}) \dots K_0^{(+)}(\vec{x}_2, t_2; \vec{x}_1, t_1) V(\vec{x}_1, t_1) K_0^{(+)}(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0)$$

- pro maximálně kvadratický lagrangián platí $S[\vec{x}_{cl}(t) + \vec{y}(t)] = S[\vec{x}_{cl}(t)] + S[\vec{y}(t)]$

$$\to K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}_{cl}(t)]} \int_{\substack{\vec{y}(t_0)=0 \\ \vec{y}(t_f)=0}} \mathcal{D}\vec{y}\, e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{y}(t)]}$$

- při rozptylu se zkoumají maticové elementy S-matice $\mathbb{S} = \lim_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t_f \to +\infty}} S(t_f, t_0)$

$$\langle \psi_f | \mathbb{S} | \psi_0 \rangle = \lim_{t_0, t_f \to \infty} \int d^3x_0\, d^3x_f\, \psi_f^*(\vec{x}_f, t_f)\, K^{(+)}(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0)\, \psi_i(\vec{x}_0, t_0)$$

- propagátor volné částice

$$K_0(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \left(\frac{M}{2\pi i \hbar (t - t_0)}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{iM(\vec{x} - \vec{x}_0)^2}{2\hbar(t - t_0)}\right)$$

10. Složené systémy – tenzorový součin prostorů, stavů a pozorovatelných, stavy více nerozlišitelných částic, Pauliho princip, obsazovací čísla, anihilační a kreační operátory, Hamiltonián neinteragujících částic, druhé kvantování, Fockův prostor.

Postulát 4: Stavový prostor systému S složeného z podsystémů $S_1, \dots, S_N$ je tenzorovým součinem stavových prostorů těchto podsystémů $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$

- u nerozlišitelných částic nehraje roli označkování
  → soubor nerozlišitelných částic je invariantní vůči permutační grupě
- Na $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1^{\otimes N}$ zavedeme unitární reprezentaci grupy permutací $\mathcal{S}_N$ na faktorizovaných vektorech
  $U_\sigma (|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle) = |\psi_{\sigma(1)}\rangle \otimes |\psi_{\sigma(2)}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{\sigma(N)}\rangle$
- Definujeme symetrizační a antisymetrizační operátor
  $$S_N = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} U_\sigma \qquad A_N = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \operatorname{sgn}\sigma \, U_\sigma$$
- Pro $N > 1$ jsou S_N a A_N navzájem ortogonální projektory a platí $U_\sigma S_N = S_N$, $U_\sigma A_N = \operatorname{sgn}\sigma \, A_N$
- bosony $S_N \mathcal{H}$, fermiony $A_N \mathcal{H}$ (Pauliho princip)

Obsazovací čísla
- od tenzorové mocniny jednočásticové báze na $\mathcal{H}_1$ se přejde k nové bázi na $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$
- normalizovaný bazický stav bosonů $|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}; S\rangle = \mathcal{N}_S \, S_N (|\phi_{k_1}\rangle \otimes |\phi_{k_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{k_N}\rangle)$
  $(k_1 \le k_2 \le \dots \le k_N)$
  - buď n_k počet částic ve stavu $|\phi_k\rangle \Rightarrow \mathcal{N}_S = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots}}$

  $$\to |\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}; S\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \, n_1! n_2! \dots}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} (|\phi_{\sigma(k_1)}\rangle \otimes |\phi_{\sigma(k_2)}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{\sigma(k_N)}\rangle)$$
- normalizovaný bazický stav fermionu $|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}; A\rangle = \sqrt{N!} \, A (|\phi_{k_1}\rangle \otimes |\phi_{k_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{k_N}\rangle)$
- báze obsazovacích čísel (druhé kvantování)
  $$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; S/A\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots}} \, S/A \left(|\phi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes |\phi_2\rangle^{\otimes n_2} \otimes \dots \otimes |\phi_k\rangle^{\otimes n_k} \otimes \dots \right)$$

Fockův prostor
- pro částice s jednočásticovým prostorem $\mathcal{H}_1$ je Fockův prostor
  - pro bosony: $\mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1) = \bigoplus_{N=0}^{\infty} S_N \mathcal{H}_1^{\otimes N}$
  - pro fermiony: $\mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1) = \bigoplus_{N=0}^{\infty} A_N \mathcal{H}_1^{\otimes N}$
- kreační a anihilační operátory
  $$a^\dagger(\phi_j) |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots; S\rangle = \sqrt{n_j + 1} \, |n_1, n_2, \dots, n_j + 1, \dots; S\rangle$$
  $$a(\phi_j) |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots; S\rangle = \sqrt{n_j} \, |n_1, n_2, \dots, n_j - 1, \dots; S\rangle$$

  $$b^\dagger(\psi_j) |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots; A\rangle = \begin{cases} (-1)^{\sum_{i<j} n_i} |n_1, n_2, \dots, n_j + 1, \dots; A\rangle & n_j = 0 \\ 0 & n_j = 1 \end{cases}$$
  $$b(\psi_j) |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots; A\rangle = \begin{cases} (-1)^{\sum_{i<j} n_i} |n_1, n_2, \dots, n_j - 1, \dots; A\rangle & n_j = 1 \\ 0 & n_j = 0 \end{cases}$$

- kreační a anihilační operátory lze přepsat pomocí tenzorového součinu a kontrakce

$$a^\dagger(\phi)\, S_N(\phi_{j_1}\otimes\phi_{j_2}\otimes\cdots\otimes\phi_{j_N}) = \sqrt{N+1}\, S_{N+1}(\phi\otimes\phi_{j_1}\otimes\phi_{j_2}\otimes\cdots\otimes\phi_{j_N})$$

$$b^\dagger(\psi)\, A_N(\psi_{j_1}\otimes\psi_{j_2}\otimes\cdots\otimes\psi_{j_N}) = \sqrt{N+1}\, A_{N+1}(\psi\otimes\psi_{j_1}\otimes\psi_{j_2}\otimes\cdots\otimes\psi_{j_N})$$

$$a(\phi)\, S_N(\phi_{j_1}\otimes\phi_{j_2}\otimes\cdots\otimes\phi_{j_N}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=1}^{N}\langle\phi,\phi_{j_k}\rangle\, S_{N-1}(\phi_{j_1}\otimes\phi_{j_2}\otimes\cdots\otimes\phi_{j_{k-1}}\otimes\cancel{\phi_{j_k}}\otimes\phi_{j_{k+1}}\otimes\cdots\otimes\phi_{j_N})$$

$$b(\psi)\, A_N(\psi_{j_1}\otimes\psi_{j_2}\otimes\cdots\otimes\psi_{j_N}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=1}^{N}(-1)^{k-1}\langle\psi,\psi_k\rangle\, A_{N-1}(\psi_{j_1}\otimes\psi_{j_2}\otimes\cdots\otimes\psi_{j_{k-1}}\otimes\cancel{\psi_{j_k}}\otimes\psi_{j_{k+1}}\otimes\cdots\otimes\psi_{j_N})$$

- definiční obor $D_P = \sum_{N=0}^{\infty} P_N \mathcal{H}_1^{\otimes N}$ hustý v $\mathcal{F}_P(\mathcal{H}_1)$ $P = S, A$

<u>Komutační relace</u>

$$[a(\phi), a(\varphi)] = [a^\dagger(\phi), a^\dagger(\varphi)] = 0 \quad \text{a} \quad [a(\phi), a^\dagger(\varphi)] = \langle\phi,\varphi\rangle \quad \text{na } D_S$$

$$\{b(\psi), b(\chi)\} = \{b^\dagger(\psi), b^\dagger(\chi)\} = 0 \quad \text{a} \quad \{b(\psi), b^\dagger(\chi)\} = \langle\psi,\chi\rangle \quad \text{na } D_A$$

Operátor počtu částic

- lze získat buď rozšířením jednočásticového operátoru na $\mathcal{H}_1$ nebo z kreačních a anihilačních operátorů

$$N = \sum_k N_k = \sum_k a_k^\dagger a_k$$

- Jakoukoli pozorovatelnou T na $\mathcal{H}_1$ lze rozšířit pomocí kreačních a anihilačních operátorů

$$T = \sum_{k,l}\langle\phi_k|T|\phi_l\rangle\, |\phi_k\rangle\langle\phi_l| \longrightarrow T = \sum_{k,l}\langle\phi_k|T|\phi_l\rangle\, a^\dagger(\phi_k)\, a(\phi_l)$$

- Hamiltonián $H = \sum_k E_k\, a^\dagger(\phi_k)\, a(\phi_k)$ (neinteragující částice)