

Kvantová mechanika 2

11. února 2026

Obsah

1	Symetrie v kvantové mechanice, časový vývoj a translace	5
1.1	Symetrie	5
1.2	Časový vývoj jako spojitá transformace	7
1.3	Translace v kvantové mechanice	9
1.4	Periodické potenciály, Blochův teorém	11
1.5	Příklady	12
2	Rotace	26
2.1	Rotace v klasické mechanice	26
2.2	Rotace v kvantové mechanice	27
2.2.1	Operátory momentu hybnosti, maticové reprezentace	28
2.2.2	Maticové reprezentace rotací, Wignerovy D -funkce	30
2.2.3	Transformace pozorovatelných, kartézské tenzory	32
2.2.4	Maticové elementy skalárů ve stavech s momentem hybnosti	33
2.3	Příklady	34
3	Skládání momentů hybnosti	38
3.1	Skládání dvou nezávislých momentů hybnosti	38
3.2	Clebsch-Gordanovy koeficienty	41
3.3	Wignerovy $3j$ -symboly	43
3.4	Maticové reprezentace složeného momentu hybnosti, rotační matice	44
3.5	Příklady	45
4	Ireducibilní tenzorové operátory, Wigner-Eckartův teorém	56
4.1	Ireducibilní tenzorové operátory	56
4.2	Wigner-Eckartův teorém	58
4.3	Maticové elementy skalárů a vektorů	60
4.4	Starkův jev na vodíku pro $N = 3$	61
4.5	Tenzorový součin ITO	64
4.6	Příklady	66

5	Jemná struktura vodíku, anomální Zeemanův jev	74
5.1	Hamiltonián jemné struktury	74
5.1.1	Spin-orbitální vazba	75
5.1.2	Relativistická korekce kinetické energie	76
5.2	Jemná struktura v 1. řádu poruchového rozvoje	76
5.2.1	Relativistická korekce kinetické energie	77
5.2.2	Spin-orbitální vazba	78
5.2.3	Darwinův člen	79
5.2.4	Jemná struktura vodíku	80
5.3	Anomální Zeemanův jev	81
5.4	Příklady	83
6	Diskrétní symetrie, kalibrační invariance	85
6.1	Prostorová inverze	85
6.2	Časová inverze	88
6.3	Kalibrační invariance	92
7	Souřadnicová, hybnostní a sférická reprezentace	94
7.1	Souřadnicová reprezentace	94
7.2	Hybnostní reprezentace	96
7.3	Sférická souřadnicová reprezentace	98
7.3.1	Částice ve sféricky symetrickém potenciálu	99
7.3.2	Zobecněné vlastní funkce volné částice s momentem hybnosti	100
8	Matice hustoty	104
8.1	Zavedení matice hustoty	104
8.1.1	Předpovědi výsledků měření	105
8.1.2	Měření bez rozlišení výsledků	106
8.1.3	Entropie kvantového stavu	107
8.1.4	Dekoherence	108
8.1.5	Časový vývoj matice hustoty pro uzavřený systém	108
8.2	Matice hustoty pro spin $\frac{1}{2}$	109
8.3	Matice hustoty složeného kvantového systému, redukováné stavy	113
8.3.1	Dva spiny $\frac{1}{2}$ v singletním stavu	114
8.4	Časový vývoj otevřeného systému	116
8.5	Příklady	117
9	Variační metoda a WKB aproximace	123
9.1	Variační metoda	123
9.2	WKB aproximace	123
9.2.1	Vázané stavy a kvantovací podmínka	127
9.2.2	Rozptylové stavy, tunelový jev a Gamowův koeficient	129
9.3	Model radioaktivního rozpadu α	131

9.4	Příklady	135
10	Různé obrazy časového vývoje v kvantové mechanice	141
10.1	Schrödingerův obraz	141
10.2	Heisenbergův obraz	142
10.3	Diracův (interakční) obraz	143
10.4	Příklady	144
11	Přechody v dvouhladinových systémech	151
11.1	Spin v rotujícím magnetickém poli	151
11.1.1	Řešení Schrödingerovy rovnice přechodem do rotující soustavy . . .	152
11.1.2	Pravděpodobnost překlopení spinu, π - a $\frac{\pi}{2}$ -puls	154
11.1.3	Nukleární magnetická rezonance	155
11.2	Obecný dvouhladinový systém	156
11.2.1	Konstantní porucha pro dvouhladinový systém	157
11.2.2	Harmonická porucha pro dvouhladinový systém, rotating wave approximation	159
11.3	Precizní spektroskopie	160
11.3.1	Rabiho metoda měření ω_0	161
11.3.2	Ramseyho interferometr	161
11.4	Příklady	164
12	Nestacionární poruchová teorie	166
12.1	Dysonův rozvoj evolučního operátoru v Diracově obraze	166
12.2	Amplitudy přechodu	168
12.3	Přechody v 1. řádu poruchového rozvoje	169
12.3.1	Porucha nezávislá na čase	170
12.3.2	Harmonická porucha	172
12.3.3	Dlouhé působení poruchy, rychlosti přechodu	173
12.4	Interakce atomu s klasickým elektromagnetickým polem	174
12.5	Přechody do kontinua, Fermiho zlaté pravidlo	176
12.5.1	Konstantní porucha	178
12.5.2	Harmonická porucha	178
12.6	Příklady	179
13	Propagátor a dráhový integrál	182
13.1	Propagátor	182
13.2	Dráhový integrál	183
13.3	Matice hustoty termálního stavu	186
13.4	Příklady	187

14 Základy teorie rozptylu	194
14.1 Metoda parciálních vln	201
14.2 Příklady	205
15 Nerozlišitelné částice	216
15.1 Symetrizační a antisymetrizační projektory	216
15.2 Obsazovací čísla	220
15.3 Fockův prostor	221
15.4 Bosonové kreační a anihilační operátory	223
15.5 Pozorovatelné ve Fockově prostoru	227
15.6 Spojité stupně volnosti	229
15.7 Fockův prostor pro různé částice	230
15.8 Příklady	231
16 Kanonické kvantování polí	234
16.1 Přehled klasické teorie pole	234
16.2 Kvantování Klein-Gordonova pole	235
16.3 Kvantování elektromagnetického pole	240
17 Kvantová teorie interakce hmoty a záření	244
17.1 Hamiltonián pole a částice	244
17.2 Rychlosti emise a absorpce v 1. řádu poruchové teorie	245
17.3 Elektrická dipólová aproximace	247
17.4 Dipólová výběrová pravidla	248
17.5 Spontánní emise, přechod $2p \rightarrow 1s$ pro vodík	249
A Tabulky CG koeficientů	253

Kapitola 1

Symetrie v kvantové mechanice, časový vývoj a translace

1.1 Symetrie

Symetrie, tj. invariance vůči nějakým transformacím, hrají důležitou roli v klasické i kvantové mechanice. Umožňují nám např. převádět jedno řešení pohybových rovnic na druhé nebo vybrat kompatibilní pozorovatelné a najít jejich společné vlastní vektory. Symetrie také usnadňují výpočet maticových elementů. Generátory symetrií jsou pak integrály pohybu.

Transformace fyzikálního systému tvoří grupu, tj. množinu G s grupovou operací $\cdot$, která splňuje vlastnosti:

1. Uzavřenost: $\forall g_1, g_2 \in G, g_1 \cdot g_2 \in G$
2. Asociativita: $\forall g_1, g_2, g_3 \in G, (g_1 \cdot g_2) \cdot g_3 = g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3)$
3. Existence jednotky: $\exists_1 e \in G, \forall g \in G, g \cdot e = e \cdot g = g$
4. Existence inverze: $\forall g \in G, \exists_1 g^{-1} \in G, g \cdot g^{-1} = g^{-1} \cdot g = e$

V kvantové mechanice pracujeme v nějakém Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$. Transformace jsou potom realizovány pomocí reprezentace grupy G na $\mathcal{H}$, tj. homomorfismu z G do množiny invertibilních operátorů na $\mathcal{H}$. Každému prvku $g \in G$ je tedy přiřazen operátor $\hat{U}(g)$, přičemž platí

$$\forall g_1, g_2 \in G, \hat{U}(g_1 \cdot g_2) = \hat{U}(g_1) \cdot \hat{U}(g_2).$$

Působením operátoru $\hat{U}(g)$ na stavový vektor $|\psi\rangle$ dostaneme transformovaný stav $|\psi_g\rangle$

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi_g\rangle = \hat{U}(g)|\psi\rangle.$$

V tomto případě se jedná o tzv. aktivní interpretaci transformace. V kvantové mechanice požadujeme, aby transformace zachovávaly amplitudy přechodu mezi stavy, tj.

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi_g|\varphi_g\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger(g)\hat{U}(g)|\varphi\rangle, \quad \forall |\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Odtud plyne rovnost

$$\hat{U}^\dagger(g)\hat{U}(g) = \hat{I}, \quad \forall g \in G,$$

takže operátor $\hat{U}(g)$ musí být unitární lineární nebo antilineární. Antilineární operátory působí na superpozice vektorů následovně

$$\hat{A}(|\psi\rangle + c|\phi\rangle) = \hat{A}|\psi\rangle + \bar{c}\hat{A}|\phi\rangle. \quad (1.1)$$

Jak uvidíme později, spojitě prostoročasové transformace (translace, rotace, časový vývoj) a parita jsou reprezentovány pomocí unitárních operátorů, časová inverze je vyjádřena pomocí antiunitárního operátoru.

Při aktivní interpretaci transformace se mění fyzikální stav, souřadný systém a pozorovatelné veličiny se nemění. V případě pasivní interpretace naopak popisujeme stejný fyzikální stav z hlediska transformované soustavy (v opačném smyslu, tj. inverzní transformací g^{-1}). Musí se tedy odpovídajícím způsobem změnit pozorovatelné

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A}' = \hat{A}_{g^{-1}} = \hat{U}(g^{-1})\hat{A}\hat{U}^\dagger(g^{-1}) = \hat{U}^\dagger(g)\hat{A}\hat{U}(g),$$

kde jsme využili vztah

$$\hat{U}(g^{-1}) = \hat{U}^{-1}(g) = \hat{U}^\dagger(g).$$

Při aktivní změně stavu a současně změně souřadného systému (ve stejném smyslu) se maticové elementy pozorovatelných nezmění

$$\langle \psi_g | \hat{A}_g | \varphi_g \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger(g) \hat{U}(g) \hat{A} \hat{U}^\dagger(g) \hat{U}(g) | \varphi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle.$$

Uvažujme nyní jednoparametrickou unitární reprezentaci spojitě abelovské grupy transformací (grupová operace je komutativní a značí se symbolem $+$) $\hat{U}(g)$, tj. platí

$$\hat{U}(g_1)\hat{U}(g_2) = \hat{U}(g_1 + g_2).$$

Pokud je navíc množina silně spojitá, tj.

$$\forall g_0, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \lim_{g \rightarrow g_0} \hat{U}(g)|\psi\rangle = \hat{U}(g_0)|\psi\rangle,$$

pak lze dokázat Stoneův teorém: k $\hat{U}(g)$ existuje jednoznačně určený samosdružený operátor $\hat{B}$ takový, že

$$\hat{U}(g) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}g\hat{B}\right), \quad \hat{B} = i\hbar \left. \frac{d\hat{U}(g)}{dg} \right|_{g=0}. \quad (1.2)$$

Spojitá jednoparametrická grupa transformací $\hat{U}(g)$ je tedy generována nějakou pozorovatelnou veličinou $\hat{B}$.

Pro více parametrickou grupu (resp. její reprezentaci) $\hat{U}(\mathbf{g})$, $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_n)$, lze odvodit obdobný vztah

$$\hat{U}(\mathbf{g}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}g_i\hat{B}_i\right),$$

který ale obecně platí jen v nějakém okolí jednotky. Poznamenejme, že spojitě prostorové transformace tvoří Lieovu grupu. Operátory $\hat{U}(\mathbf{g})$ pak představují unitární reprezentaci této Lieovy grupy. Jejich generátory $\hat{B}_j$ tvoří hermitovskou reprezentaci příslušné Lieovy algebry.

Při prostorové transformaci budeme požadovat, aby se vlnová funkce měnila následujícím způsobem

$$\psi_{\mathbf{g}}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi_{\mathbf{g}} \rangle = \langle \vec{x} | \hat{U}(\mathbf{g}) | \psi \rangle = \langle \mathbf{g}^{-1} \vec{x} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{g}^{-1} \vec{x}). \quad (1.3)$$

Uvažujme infinitezimální transformaci, kdy $g_i \ll 1$, a tedy

$$\hat{U}(\mathbf{g}) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} g_i \hat{B}_i \right) \approx \hat{I} - \frac{i}{\hbar} g_i \hat{B}_i.$$

Pro změnu vlnové funkce pak platí

$$\psi_{\mathbf{g}}(\vec{x}) = \psi(\mathbf{g}^{-1} \vec{x}) \approx \psi(\vec{x}) - \frac{i}{\hbar} g_i \hat{B}_i \psi(\vec{x}).$$

Rozvojem $\psi(\mathbf{g}^{-1} \vec{x})$ do prvního řádu v g_i pak určíme generátory transformace $\hat{B}_i$. Analogicky, změna pozorovatelné $\hat{A}$ do prvního řádu v g_i je rovna

$$\hat{A}_{\mathbf{g}} = \hat{U}(\mathbf{g}) \hat{A} \hat{U}^\dagger(\mathbf{g}) \approx \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar} g_i \hat{B}_i \right) \hat{A} \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar} g_j \hat{B}_j \right) \approx \hat{A} - \frac{i}{\hbar} g_i [\hat{B}_i, \hat{A}]. \quad (1.4)$$

Při infinitezimálních transformacích se pozorovatelné mění o komutátor s generátory transformace.

Řekneme, že grupa G je grupou symetrie systému s hamiltoniánem $\hat{H}$ právě tehdy když platí

$$\forall g \in G, \quad [\hat{U}(g), \hat{H}] = 0.$$

Hamiltonián je tedy invariantní vůči grupě transformací G

$$\hat{H}_g = \hat{U}(g) \hat{H} \hat{U}^\dagger(g) = \hat{H}.$$

Generátory symetrie $\hat{B}_j$ jsou integrály pohybu

$$[\hat{U}(\mathbf{g}), \hat{H}] = 0 \implies [\hat{B}_j, \hat{H}] = 0.$$

1.2 Časový vývoj jako spojitá transformace

Časový vývoj uzavřeného kvantového systému se řídí Schrödingerovou rovnicí

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

Z linearity pak plyne, že ho můžeme popsat pomocí evolučního operátoru $\hat{U}(t, t_0)$

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

který je také řešením (oprátorové) Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0).$$

Protože časový vývoj zachovává skalární součin stavů, je evoluční operátor unitární

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \phi(t) \rangle &= \langle \psi(t_0) | \frac{d}{dt} \left(\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) \right) | \phi(t_0) \rangle = 0 \\ \implies \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) &= \hat{U}^\dagger(t_0, t_0) \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}. \end{aligned}$$

Evoluční operátor tvoří jednoparametrickou grupu

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1) \hat{U}(t_1, t_0), \quad \forall t_1 \in (t, t_0).$$

Časový vývoj tedy může chápat jako spojitou transformaci reprezentovanou unitárním evolučním operátorem, která je generovaná hamiltoniánem daného systému. Pokud je hamiltonián nezávislý na čase, pak má evoluční operátor tvar

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) \right) = \hat{U}(t - t_0),$$

tj. nezávisí na počátečním a koncovém čase, jen délce trvání časového vývoje.

Uvažujme hamiltonián s čistě bodovým spektrem

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle,$$

a grupou symetrií G , tj. $[\hat{H}, \hat{U}(g)] = 0$. Transformace $\hat{U}(g)$ zjevně převádí vlastní stavy hamiltoniánu $|n\rangle$ opět na vlastní stavy $|n, g\rangle = \hat{U}(g)|n\rangle$ se stejným vlastním číslem

$$\hat{H}|n, g\rangle = \hat{H} \hat{U}(g)|n\rangle = \hat{U}(g) \hat{H}|n\rangle = E_n|n, g\rangle.$$

Symetrie tedy indikuje degeneraci spektra hamiltoniánu. Příkladem může být částice ve sféricky symetrickém potenciálu. Hamiltonián je invariantní vůči rotacím, takže komutuje s jejich generátory, což jsou složky orbitálního momentu hybnosti $\hat{L}_j$. Ty navzájem kompatibilní nejsou, ale komutují s $\hat{L}^2$. Operátory $\hat{L}_3$, $\hat{L}^2$ a $\hat{H}$ jsou kompatibilní a jejich společné vlastní vektory lze označit pomocí trojice kvantových čísel n, l, m (radiální, orbitální a magnetické)

$$\begin{aligned} \hat{L}_3|n, l, m\rangle &= m\hbar|n, l, m\rangle, \quad m = l, l-1, \dots, -l, \\ \hat{L}^2|n, l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|n, l, m\rangle, \quad l \in \mathbb{Z}_+, \\ \hat{H}|n, l, m\rangle &= E_{n,l}|n, l, m\rangle. \end{aligned}$$

Sférická symetrie implikuje, že energie nezávisí na magnetickém kvantovém čísle m (osu z lze volit libovolně). Hladina $E_{n,l}$ má tedy degeneraci alespoň $2l + 1$.

Pro změnu střední hodnoty pozorovatelné $\hat{A}$ (nezávislé explicitně na čase) v řešeních Schrödingerovy rovnice platí

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_{\psi(t)} = \left\langle \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] \right\rangle_{\psi(t)}. \quad (1.5)$$

Vídíme, že $\hat{A}$ je integrál pohybu, právě tehdy když komutuje s hamiltoniánem. Místo časového vývoje můžeme uvažovat jinou spojitou transformaci $\hat{U}(g)$ generovanou samosdruženým operátorem $\hat{B}$ (1.2). Pro transformovaný stav $|\psi_g\rangle = \hat{U}(g)|\psi\rangle$ pak platí analogie Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dg} |\psi_g\rangle = \hat{B} |\psi_g\rangle,$$

kde roli hamiltoniánu hraje generátor transformace $\hat{B}$. Změna střední hodnoty $\hat{A}$ při transformaci $\hat{U}(g)$ se tedy řídí obdobou rovnice (1.5)

$$\frac{d}{dg}\langle\hat{A}\rangle_{\psi_g} = \left\langle \frac{i}{\hbar} [\hat{B}, \hat{A}] \right\rangle_{\psi_g}.$$

Pokud pozorovatelná $\hat{A}$ komutuje s generátorem $\hat{B}$, pak se při aktivní transformaci stavů nemění její střední hodnoty. Nemění se ani samotná pozorovatelná $\hat{A}$ při pasivní transformaci

$$\hat{A}_g = \hat{U}(g)\hat{A}\hat{U}^\dagger(g) = \hat{A}.$$

1.3 Translace v kvantové mechanice

Uvažujme nejprve jednorozměrný problém. Grupa translací na přímce je abelovská, odpovídá reálným číslům a grupovou operací je sčítání $(\mathbb{R}, +)$. Posunutí x o a je tedy $x + a$. Na Hilbertově prostoru kvantové částice na přímce $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}, dx)$ je reprezentována unitárním operátorem $\hat{T}_a$, který zavedeme působením na zobecněné vlastní stavy polohy

$$\hat{T}_a|x\rangle = |x + a\rangle.$$

Pro působení na vlnové funkce platí (viz (1.3))

$$\psi_a(x) = \langle x|\psi_a\rangle = \langle x|\hat{T}_a|\psi\rangle = \langle x - a|\psi\rangle = \psi(x - a).$$

Při infinitezimální translaci o $\varepsilon \ll 1$ dostaneme

$$\psi_\varepsilon(x) = \psi(x - \varepsilon) \approx \psi(x) - \varepsilon\psi'(x) = \psi(x) - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{P}\psi(x).$$

Generátorem translace je tedy operátor hybnosti. Konečná translace o a je pak dána exponenciálou

$$\hat{T}_a = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}a\hat{P}\right). \quad (1.6)$$

Pro částici v prostoru budeme postupovat analogicky. Posunutí o vektor $\vec{a}$ v Hilbertově prostoru $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ reprezentuje unitární operátor $\hat{T}_{\vec{a}}$ definovaný vztahem

$$\hat{T}_{\vec{a}}|\vec{x}\rangle = |\vec{x} + \vec{a}\rangle, \quad \text{resp.} \quad \psi_{\vec{a}}(\vec{x}) = \hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x} - \vec{a}).$$

Z infinitezimální translace odvodíme, že generátorem je operátor hybnosti

$$\psi_{\vec{a}}(\vec{x}) = \psi(\vec{x} - \vec{a}) \approx \psi(\vec{x}) - \vec{a} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}) - \frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{P}} \psi(\vec{x}).$$

Složky operátoru hybnosti komutují, což souvisí s tím, že grupa translací $\mathbb{R}^3$ je abelovská. Pro translaci o konečný vektor $\vec{a}$ pak platí

$$\hat{T}_{\vec{a}} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{P}}\right), \quad \hat{T}_{\vec{a}}\hat{T}_{\vec{b}} = \hat{T}_{\vec{a}+\vec{b}}.$$

Operátor hybnosti se při translacích nemění. Operátor polohy se posune o $-\vec{a}$ (viz Cvičení 1)

$$[\hat{X}_i, \hat{T}_{\vec{a}}] = i\hbar \frac{\partial \hat{T}_{\vec{a}}}{\partial p_i} = a_i \hat{T}_{\vec{a}} \implies \hat{X}_{\vec{a}} = \hat{T}_{\vec{a}} \hat{X} \hat{T}_{\vec{a}}^\dagger = \hat{X} - \vec{a}. \quad (1.7)$$

Analogickým způsobem se transformují i maticové elementy operátorů polohy a hybnosti

$$\langle \psi_{\vec{a}} | \hat{P}_j | \phi_{\vec{a}} \rangle = \langle \psi | \hat{P}_j | \phi \rangle, \quad \langle \psi_{\vec{a}} | \hat{X}_j | \phi_{\vec{a}} \rangle = \langle \psi | \hat{X}_j | \phi \rangle + a_j \langle \psi | \phi \rangle.$$

Pro jednu částici je hamiltonián translačně invariantní pouze když je potenciál konstantní

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{T}_{\vec{a}}] = 0 &\iff \hat{H}_{\vec{a}} = \hat{T}_{\vec{a}} \hat{H} \hat{T}_{\vec{a}}^\dagger = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(\hat{\vec{X}} - \vec{a}) \stackrel{!}{=} \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(\hat{\vec{X}}) \\ &\iff V = \text{const.} \end{aligned}$$

Hybnost se tak zachovává jen pro volnou částici. Pro dvoučásticovou úlohu už to platit nebude. Při transformaci vlnové funkce musíme posunout souřadnice obou částic

$$\psi_{\vec{a}}(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = \psi(\vec{x}^{(1)} - \vec{a}, \vec{x}^{(2)} - \vec{a}).$$

Pro infinitezimální translaci pak platí

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{a}}(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) &\approx \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) - \vec{a} \cdot \vec{\nabla}^{(1)} \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) - \vec{a} \cdot \vec{\nabla}^{(2)} \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) \\ &\approx \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) - \frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot (\hat{\vec{P}}^{(1)} + \hat{\vec{P}}^{(2)}) \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) \end{aligned}$$

Generátorem translací je tedy celková hybnost

$$\hat{P}_j = \hat{P}_j^{(1)} + \hat{P}_j^{(2)}. \quad (1.8)$$

Dvoučásticový hamiltonián je translačně invariantní právě tehdy když na sebe částice působí centrální silou, tj. potenciál je funkce rozdílu jejich poloh $V(\hat{x}^{(1)} - \hat{x}^{(2)})$. Vzhledem ke vztahu (1.7), který platí pro operátor polohy každé z částic, se rozdíl poloh při translaci nemění

$$\hat{x}_a^{(1)} - \hat{x}_a^{(2)} = \hat{x}^{(1)} - \hat{x}^{(2)}.$$

Hamiltonián je tedy translačně invariantní a celková hybnost je integrálem pohybu

$$[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{P}_j] = 0.$$

Můžeme pak provést redukci úlohy dvou těles zavedením polohy těžiště a relativní polohy

$$\hat{R}_j = \frac{M_1 \hat{X}_j^{(1)} + M_2 \hat{X}_j^{(2)}}{M_1 + M_2}, \quad \hat{r}_j \hat{X}_j^{(1)} - \hat{X}_j^{(2)},$$

celkové hybnosti (1.8) a hybnosti relativního pohybu částic

$$\hat{p}_j = \frac{M_2 \hat{P}_j^{(1)} - M_1 \hat{P}_j^{(2)}}{M_1 + M_2}.$$

V nových proměnných má hamiltonián tvar součtu hamiltoniánu volného pohybu těžiště a částice s redukovanou hmotností $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ v centrálním poli

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\hat{r}) = \hat{H}_t + \hat{H}_r$$

1.4 Periodické potenciály, Blochův teorém

Uvažujme částici na přímce v periodickém potenciálu s periodou a , tj. $V(x + a) = V(x)$. Ukážeme, že zobecněné vlastní funkce hamiltoniánu mají tvar Blochovy vlny

$$\psi_q(x) = e^{iqx} u_q(x), \quad (1.9)$$

kde funkce $u_q(x)$ má stejnou periodu jako potenciál. Využijeme toho, že Hamiltonián je invariantní vůči posunutí o libovolný celočíselný násobek periody a má společné vlastní zobecněné vektory s operátory $\hat{T}_{na}$, $n \in \mathbb{Z}$. Pro $\psi_q(x)$ tak platí

$$\hat{T}_{na} \psi_q(x) = c_n \psi_q(x) = \psi_q(x - na), \quad (1.10)$$

kde c_n je komplexní jednotka (jedná se o vlastní číslo unitárního operátoru T_{na}). Speciálně pro $n = -1$, tj. posunutí o $-a$, definujeme q předpisem $c_{-1} = e^{iqa}$, takže z (1.10) plyne

$$e^{iqa} \psi_q(x) = \psi_q(x + a). \quad (1.11)$$

Pro funkci $u_q(x) = e^{-iqx}\psi_q(x)$ pak snadno ukážeme, že má stejnou periodu a jako potenciál

$$u_q(x+a) = e^{-iq(x+a)}\psi_q(x+a) = e^{-iq(x+a)}e^{iqa}\psi_q(x) = e^{-iqx}\psi_q(x) = u_q(x),$$

čímž je vztah (1.9) dokázán.

Blochův teorém platí i trojrozměrném případě. Uvažujme potenciál krystalové mříže s periodicitou danou mřížkovými vektory $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, tj.

$$V(\vec{x} + n_i\vec{a}_i) = V(\vec{x}), \quad n_i \in \mathbb{Z}.$$

Zobecněný vlastní stav hamiltoniánu $\psi_{\vec{q}}$ je současně vlastní vektor operátorů $\hat{T}_{n_i\vec{a}_i}$. Uvažujme posunutí o $-\vec{a}_j$ a zapišme příslušné vlastní číslo jako $e^{2\pi i\alpha_j}$

$$\hat{T}_{-\vec{a}_j}\psi_{\vec{q}}(\vec{x}) = e^{2\pi i\alpha_j}\psi_{\vec{q}}(\vec{x}) = \psi_{\vec{q}}(\vec{x} + \vec{a}_j).$$

Definujeme vektor $\vec{q}$ vztahem

$$\vec{q} = \alpha_j\vec{b}_j,$$

kde $\vec{b}_j$ jsou vektory reciproké mřížky splňující podmínky

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}.$$

Pro funkci $u_{\vec{q}}(\vec{x}) = e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}\psi_{\vec{q}}(\vec{x})$ pak snadno ověříme, že má stejnou periodu jako potenciál

$$u_{\vec{q}}(\vec{x} + \vec{a}_j) = e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{x}+\vec{a}_j)}\psi_{\vec{q}}(\vec{x} + \vec{a}_j) = e^{-i\vec{q}\cdot\vec{a}_j}e^{2\pi i\alpha_j}e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}\psi_{\vec{q}}(\vec{x}) = u_{\vec{q}}(\vec{x}).$$

Pro Blochovu vlnu platí

$$\psi_{\vec{q}}(\vec{x} + n_j\vec{a}_j) = e^{in_j\vec{q}\cdot\vec{a}_j}\psi_{\vec{q}}(\vec{x}).$$

Díky tomu stačí řešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici

$$\hat{H}\psi_{\vec{q}} = E_{\vec{q}}\psi_{\vec{q}},$$

uvnitř jedné buňky krystalové mříže. Periodické potenciály typicky vedou na tzv. pásovou strukturu spektra hamiltoniánu, kde se střídají povolené a zakázané pásy. Spojité spektrum je sjednocení intervalů $\bigcup(E_j, E'_j)$ (povolené pásy), body z intervalů (E'_j, E_{j+1}) do spektra nepatří (zakázané pásy), viz Cvičení 6.

1.5 Příklady

Cvičení 1. Ukažte, že pro operátory polohy a hybnosti částice na přímce platí vztahy

$$[\hat{X}^n, \hat{P}] = ni\hbar\hat{X}^{n-1}, \quad [\hat{X}, \hat{P}^n] = ni\hbar\hat{P}^{n-1}, \quad (1.12)$$

$$[f(\hat{X}), \hat{P}] = i\hbar f'(\hat{X}), \quad [\hat{X}, f(\hat{P})] = i\hbar f'(\hat{P}). \quad (1.13)$$

Návod: Důkaz vztahů (1.12) provedeme indukcí. Pro $n = 1$ vztah platí, protože se zredukuje na kanonické komutační relace

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar. \quad (1.14)$$

U indukce z n na $n + 1$ využijeme vztah pro komutátor součinu

$$\begin{aligned} [\hat{X}^{n+1}, \hat{P}] &= [\hat{X}^n, \hat{P}]\hat{X} + \hat{X}^n[\hat{X}, \hat{P}] = ni\hbar\hat{X}^{n-1}\hat{X} + \hat{X}^ni\hbar = (n+1)i\hbar\hat{X}^n, \\ [\hat{X}, \hat{P}^{n+1}] &= [\hat{X}, \hat{P}^n]\hat{P} + \hat{P}^n[\hat{X}, \hat{P}] = ni\hbar\hat{P}^{n-1}\hat{P} + \hat{P}^ni\hbar = (n+1)i\hbar\hat{P}^n. \end{aligned}$$

Pro výpočet komutátorů (1.13) stačí využít vztahy (1.12)

$$\begin{aligned} [f(\hat{X}), \hat{P}] &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} [\hat{X}^n, \hat{P}] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} ni\hbar\hat{X}^{n-1} = i\hbar \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m+1)}(0)}{m!} \hat{X}^m \\ &= i\hbar f'(\hat{X}), \\ [\hat{X}, f(\hat{P})] &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} [\hat{X}, \hat{P}^n] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} ni\hbar\hat{P}^{n-1} = i\hbar \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m+1)}(0)}{m!} \hat{P}^m \\ &= i\hbar f'(\hat{P}). \end{aligned}$$

Cvičení 2. 1. Ukažte, že pro komutující operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ platí

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}. \quad (1.15)$$

2. Ukažte, že pro libovolné nekomutující operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ platí tzv. Baker-Campbell-Hausdorfova formule (BCH)

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{K}_n}{n!}, \quad \text{kde } \hat{K}_0 = \hat{B}, \quad \hat{K}_{n+1} = [\hat{A}, \hat{K}_n]. \quad (1.16)$$

3. Ukažte, že pro libovolné nekomutující operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ platí

$$e^{\hat{A}\hat{B}\hat{A}^{-1}} = \hat{A}e^{\hat{B}}\hat{A}^{-1}. \quad (1.17)$$

Návod:

1. Uvažujme funkci

$$f(t) = e^{t(\hat{A}+\hat{B})}e^{-t\hat{A}}e^{-t\hat{B}}.$$

Její derivace podle t je rovna

$$\frac{df}{dt} = (\hat{A} + \hat{B})e^{t(\hat{A}+\hat{B})}e^{-t\hat{A}}e^{-t\hat{B}} - e^{t(\hat{A}+\hat{B})}\hat{A}e^{-t\hat{A}}e^{-t\hat{B}} - e^{t(\hat{A}+\hat{B})}e^{-t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{B}}.$$

Protože $\hat{A}$ a $\hat{B}$ komutují, komutují i jejich funkce, takže platí

$$\frac{df}{dt} = (\hat{A} + \hat{B} - \hat{A} - \hat{B})e^{t(\hat{A}+\hat{B})}e^{-t\hat{A}}e^{-t\hat{B}} = 0.$$

Funkce je f je tedy konstantní a rovna jednotce

$$f(t) \equiv f(0) = \hat{\mathbb{I}}.$$

Pro $t = 1$ dostaneme

$$e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{-\hat{A}}e^{-\hat{B}} = \hat{\mathbb{I}},$$

odkud plyne dokazovaný vztah.

2. Označíme $f(\xi) = e^{\xi\hat{A}}\hat{B}e^{-\xi\hat{A}}$ a najdeme rozvoj funkce f do mocninné řady se středem v nule

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \xi^n.$$

První tři koeficienty rozvoje jsou

$$\begin{aligned} f(0) &= \hat{B} = \hat{K}_0, \\ f'(0) &= \left\{ e^{\xi\hat{A}}\hat{A}\hat{B}e^{-\xi\hat{A}} - e^{\xi\hat{A}}\hat{B}\hat{A}e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} = \left\{ e^{\xi\hat{A}}[\hat{A}, \hat{B}]e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} \\ &= \left\{ e^{\xi\hat{A}}[\hat{A}, \hat{K}_0]e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} = [\hat{A}, \hat{K}_0] = \hat{K}_1, \\ f''(0) &= \left\{ \frac{d}{d\xi} e^{\xi\hat{A}}\hat{K}_1e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} = \left\{ e^{\xi\hat{A}}\hat{A}\hat{K}_1e^{-\xi\hat{A}} - e^{\xi\hat{A}}\hat{K}_1\hat{A}e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} \\ &= \left\{ e^{\xi\hat{A}}[\hat{A}, \hat{K}_1]e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} = [\hat{A}, \hat{K}_1] = \hat{K}_2. \end{aligned}$$

Dále budeme pokračovat indukci. Indukční předpoklad je

$$f^{(n)}(0) = \left\{ e^{\xi\hat{A}}[\hat{A}, \hat{K}_{n-1}]e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} = [\hat{A}, \hat{K}_{n-1}] = \hat{K}_n.$$

Pro $n + 1$ derivaci v nule pak dostaneme

$$\begin{aligned} f^{(n+1)}(0) &= \left\{ \frac{d}{d\xi} e^{\xi\hat{A}}\hat{K}_ne^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} = \left\{ e^{\xi\hat{A}}\hat{A}\hat{K}_ne^{-\xi\hat{A}} - e^{\xi\hat{A}}\hat{K}_n\hat{A}e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} \\ &= \left\{ e^{\xi\hat{A}}[\hat{A}, \hat{K}_n]e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} = [\hat{A}, \hat{K}_n] = \hat{K}_{n+1}. \end{aligned}$$

3. Levou stranu rozvineme do řady a nalezneme

$$\begin{aligned} e^{\hat{A}\hat{B}\hat{A}^{-1}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\hat{A}\hat{B}\hat{A}^{-1})^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}\hat{B}^n\hat{A}^{-1} = \hat{A} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{B}^n \right) \hat{A}^{-1} \\ &= \hat{A}e^{\hat{B}}\hat{A}^{-1}. \end{aligned}$$

Kombinací vztahů (1.16) a (1.17) dostaneme jinou variantu BCH formule

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\hat{A}} = \exp\left(e^{\hat{A}}\hat{B}e^{\hat{A}^{-1}}\right) = \exp\left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{K}_n}{n!}\right) \quad (1.18)$$

Cvičení 3. Uvažujte částici na přímce a operátor translace o $a \in \mathbb{R}$ zavedený vztahem (1.6)

$$\hat{T}_a = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{P}}.$$

Ověřte, že platí

1. $\hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_a^\dagger = \hat{T}_{-a}, \quad \hat{T}_a\hat{T}_b = \hat{T}_{a+b}.$
2. $\hat{P}_a = \hat{T}_a\hat{P}\hat{T}_a^\dagger = \hat{P}, \quad \hat{X}_a = \hat{T}_a\hat{X}\hat{T}_a^\dagger = \hat{X} - a.$
3. $\hat{T}_a|x\rangle = |x+a\rangle, \quad \psi_a(x) = \hat{T}_a\psi(x) = \psi(x-a).$

Návod:

1. Využijeme toho, že operátor hybnosti je samosdružený, takže

$$\hat{T}_a^\dagger = \left(e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{P}}\right)^\dagger = e^{\frac{i}{\hbar}a\hat{P}} = \hat{T}(-a).$$

S využitím (1.15) pak platí

$$\hat{T}_a^\dagger\hat{T}_a = e^{\frac{i}{\hbar}a\hat{P}}e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{P}} = e^0 = \hat{\mathbb{1}},$$

takže operátor translace je unitární a $\hat{T}^{-1}(a) = \hat{T}_a^\dagger = \hat{T}(-a)$. Vztah $\hat{T}_a\hat{T}_b = \hat{T}_{a+b}$ plyne opět díky (1.15).

2. První vztah, tj. že operátor hybnosti se při translacích nemění, plyne z toho, že každý operátor komutuje s libovolnou svojí funkcí. Pro určení posunutí operátoru polohy můžeme použít buď vztah (1.13), nebo BCH formuli ve tvaru (1.16), kde

$$\hat{A} = -\frac{i}{\hbar}a\hat{P}, \quad \hat{B} = \hat{X}.$$

S použitím kanonických komutačních relací (1.14) nalezneme

$$\begin{aligned} \hat{K}_0 &= \hat{X}, \\ \hat{K}_1 &= -\left[\frac{i}{\hbar}a\hat{P}, \hat{X}\right] = -a, \\ \hat{K}_2 &= [\hat{A}, \hat{K}_1] = 0 = \hat{K}_n, \quad n \geq 2. \end{aligned}$$

Dosazením do (1.16) najdeme výsledek

$$\hat{X}_a = \hat{T}_a\hat{X}\hat{T}_a^\dagger = \hat{X} - a.$$

3. Z předchozího výsledku plyne

$$\hat{X}\hat{T}_a = \hat{T}_a(\hat{X} + a).$$

Odsud vidíme, že platí rovnost

$$X\hat{T}_a|x\rangle = \hat{T}_a(\hat{X} + a)|x\rangle = \hat{T}_a(x + a)|x\rangle = (x + a)\hat{T}_a|x\rangle.$$

Ket $\hat{T}_a|x\rangle$ je tedy zobecněný vlastní vektor operátoru polohy odpovídající hodnotě $x + a$, tj.

$$\hat{T}_a|x\rangle = |x + a\rangle.$$

Poslední vztah pak dokážeme např. rozvojem do řady

$$\psi_a(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{P}}\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}a\hat{P}\right)^n \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi^{(n)}(x)}{n!} (-a)^n = \psi(x - a).$$

Cvičení 4. Ukažte, že platí vztah

$$e^{it\hat{P}}e^{is\hat{X}} = e^{ihst}e^{is\hat{X}}e^{it\hat{P}}.$$

Návod: Využijeme BCH formuli ve tvaru (1.18) a výsledků předchozího příkladu

$$e^{it\hat{P}}e^{is\hat{X}}e^{-it\hat{P}} = \exp\left(is\hat{T}^\dagger(t\hbar)\hat{X}\hat{T}(t\hbar)\right) = \exp\left(is(\hat{X} + t\hbar)\right).$$

Přenásobením $e^{it\hat{P}}$ zprava dostaneme hledaný vztah.

Cvičení 5. Uvažujte částici v potenciálu tvaru

$$V(x) = \alpha\delta(x).$$

1. Napište příslušnou bezčasovou Schrödingerovu rovnici a nalezněte podmínky, které musí vlnová funkce splňovat.
2. Nalezněte vázané stavy a určete jejich energie.
3. Nalezněte rozptylové stavy a určete koeficienty odrazu $R(E)$ a průniku $T(E)$ potenciálem.

Návod:

1. Bezčasová Schrödingerova rovnice má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\psi''(x) + \alpha\delta(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (1.19)$$

Rovnici zintegrujeme přes malý interval $(-\varepsilon, \varepsilon)$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} [\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)] + \alpha\psi(0) = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx,$$

a provedeme limitu $\varepsilon \rightarrow 0^+$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} [\psi'(0^+) - \psi'(0^-)] + \alpha\psi(0) = 0.$$

Řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice (1.19) tedy bude spojitá funkce $\psi(x)$, jejíž derivace má v nule skok daný vztahem

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2M\alpha}{\hbar^2} \psi(0). \quad (1.20)$$

2. Hledáme kvadraticky integrabilní řešení rovnice (1.19). Pro $x \neq 0$ rovnice přejde na tvar

$$\psi''(x) = \kappa^2 \psi(x), \quad \kappa = \sqrt{-\frac{2ME}{\hbar^2}}.$$

Její obecné řešení je

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}.$$

Kvadraticky integrabilní řešení může existovat jen pro $\kappa \in \mathbb{R}$, tj. $E < 0$. V tom případě je $\kappa > 0$ a na záporné, resp. kladné poloose, má řešení tvar

$$\begin{aligned} x < 0 & : \psi_I(x) = Ae^{\kappa x}, \\ x > 0 & : \psi_{II}(x) = Be^{-\kappa x}. \end{aligned}$$

Ze spojitosti funkce v nule plyne rovnost $A = B$. Z podmínky na skok derivace v nule (1.20)

$$\psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = -2A\kappa = \frac{2M\alpha}{\hbar^2} A \quad \Rightarrow \quad \kappa = -\frac{M\alpha}{\hbar^2} > 0,$$

plyne, že vázaný stav existuje jen pro $\alpha < 0$, tj. pokud se jedná o potenciálovou jámu. Energie vázaného stavu je rovna

$$E_\alpha = -\frac{M\alpha^2}{2\hbar^2}.$$

Příslušná normovaná vlastní funkce je

$$\psi_\alpha(x) = \sqrt{-\frac{M\alpha}{\hbar^2}} e^{-\kappa|x|}.$$

Pro $\alpha > 0$ (potenciálová bariéra) existují jen rozptylové stavy.

3. Nezávisle na znaménku α patří energie $E > 0$ do spojité části spektra. Rozptylové stavy lze zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} x < 0 & : \psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \\ x > 0 & : \psi_{II}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \end{aligned}$$

kde k je určeno energií

$$k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}.$$

Podmínky spojitosti funkce a skok derivace v nule dávají následující vztahy pro koeficienty A, B, C, D

$$A + B = C + D, \quad (1.21)$$

$$ik(C - D - A + B) = \frac{2M\alpha}{\hbar^2}(A + B). \quad (1.22)$$

Uvažujme nyní rozptyl částice s energií E nalétávající na potenciál tvaru δ -funkce zleva. Na záporné poloose bude jak dopadající tak odražená vlna (s amplitudami A , resp. B), na kladné poloose jen prošlá vlna (s amplitudou C), tj. $D = 0$. Koeficienty odrazu a průniku pak jsou

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2, \quad T = \left| \frac{C}{A} \right|^2. \quad (1.23)$$

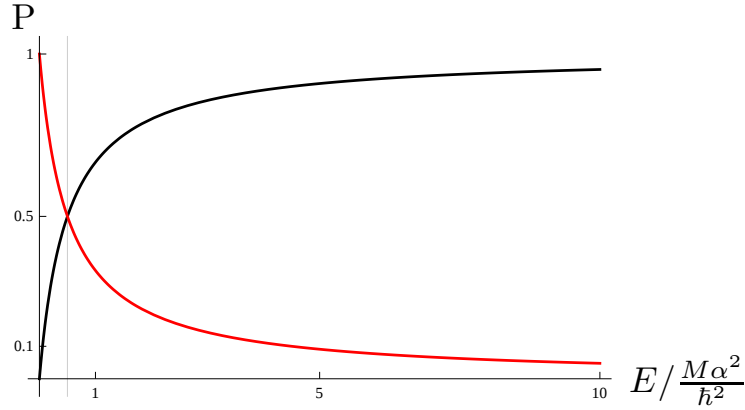
Řešením soustavy rovnic (1.21), (1.22) dostaneme

$$C = \frac{A}{1 - \frac{M\alpha}{ik\hbar^2}}, \quad B = -\frac{A}{1 - \frac{ik\hbar^2}{M\alpha}}.$$

Dosazením do (1.23) nalezneme závislost koeficientů průniku a odrazu na energii dopadající částice

$$\begin{aligned} T(E) &= \left| \frac{1}{1 - \frac{M\alpha}{ik\hbar^2}} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{M\alpha^2}{2\hbar^2 E}}, \\ R(E) &= \left| \frac{1}{1 - \frac{ik\hbar^2}{M\alpha}} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{M\alpha^2}}. \end{aligned}$$

Výsledek nezávisí na znaménku α , tj. pravděpodobnost odrazu (nebo průchodu) je stejná pro potenciálovou bariéru i jámu. Evidentně platí rovnost $T + R = 1$. Pro ilustraci je závislost pravděpodobností na energii znázorněna na obrázku 1.1.



Obrázek 1.1: Pravděpodobnosti průchodu (černě) a odrazu (červeně) v závislosti na energii dopadající částice.

Cvičení 6. Uvažujte částici v periodickém potenciálu (tzv. Diracův hřeben)

$$V(x) = \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na), \quad \alpha > 0,$$

kde a je mřížková konstanta. Nalezněte tvar energetického spektra.

Návod: Hledáme řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\psi''(x) - \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)\psi(x) = E\psi(x). \quad (1.24)$$

Díky periodicitě potenciálu lze vlnovou funkci hledat ve tvaru Blochovy vlny

$$\psi_q(x) = e^{iqx}u_q(x), \quad (1.25)$$

kde $u_q(x)$ je periodická funkce s periodou a . Pro Blochovu vlnu platí

$$\psi_q(x - a) = e^{iq(x-a)}u_q(x - a) = e^{-iqa}e^{iqx}u_q(x) = e^{-iqa}\psi_q(x). \quad (1.26)$$

Díky tomu stačí najít řešení na intervalu $(0, a)$, na interval $(-a, 0)$ ho převést vztahem (1.26), a funkce v nule spojitě navázat se skokem v derivaci daným rovnicí (1.20).

Na intervalu $(0, a)$ je potenciál nulový a rovnice (1.24) se zredukuje na

$$\psi_q''(x) = -k^2\psi_q(x),$$

kde k závisí na energii následujícím způsobem

$$k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (1.27)$$

Řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice je funkce

$$x \in (0, a) : \psi_q(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (1.28)$$

Funkci posuneme do intervalu $(-a, 0)$ vztahem (1.26)

$$\psi_q(x - a) = e^{-iqa}(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}),$$

tj. po přeznačení $x - a \rightarrow x$ dostaneme

$$x \in (-a, 0) : \psi_q(x) = e^{-iqa} [Ae^{ik(x+a)} + Be^{-ik(x+a)}].$$

Z navazovacích podmínek v nule dostaneme soustavu rovnic

$$A + B = Ae^{i(k-q)a} + Be^{-i(k+q)a}, \quad (1.29)$$

$$ik(A - B) - ike^{-iqa}(Ae^{ika} - Be^{-ika}) = \frac{2M\alpha}{\hbar^2}(A + B), \quad (1.30)$$

kterou lze zapsat v maticovém tvaru

$$U \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0, \quad U = \begin{pmatrix} 1 - e^{i(k-q)a} & 1 - e^{-i(k+q)a} \\ ik(1 - e^{i(k-q)a}) - \frac{2M\alpha}{\hbar^2} & -ik(1 - e^{-i(k+q)a}) - \frac{2M\alpha}{\hbar^2} \end{pmatrix}.$$

Netriviální řešení existuje pokud je matice soustavy singulární, tj.

$$\det U = 0 = 2ie^{-iaq} \left(2k \cos(ak) + \frac{2M\alpha}{\hbar^2} \sin(ak) - 2k \cos(aq) \right).$$

To je ekvivalentní podmínce

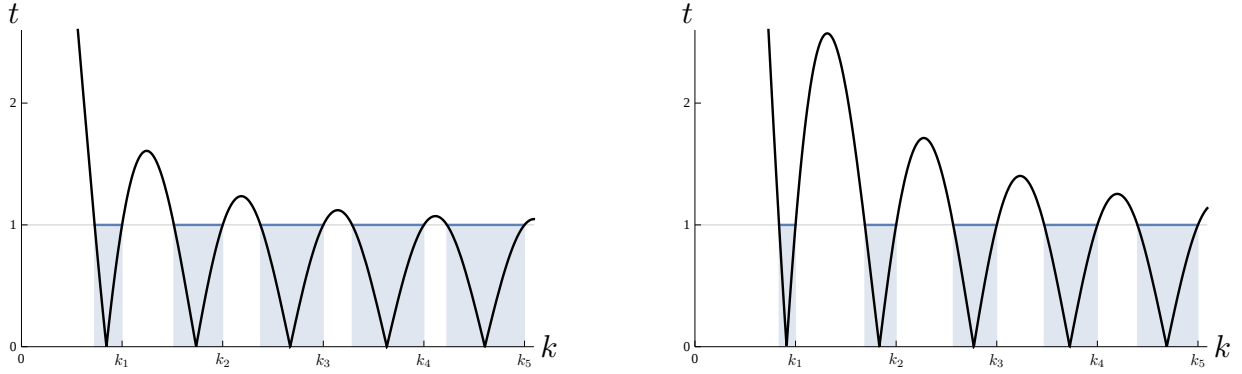
$$\cos(aq) = \cos(ak) + \frac{M\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ak), \quad (1.31)$$

která určuje možné energie částice v Diracově hřebenu. Aby tato rovnice měla řešení, musí být pravá strana v absolutní hodnotě menší nebo rovna jedné

$$t = \left| \cos(ak) + \frac{M\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ak) \right| \leq 1. \quad (1.32)$$

Průběh funkce t v závislosti na k je znázorněn na obrázku 1.2 pro dvě různé hodnoty α (ve všech obrázcích uvažujeme $M = \hbar = a = 1$). Obecně lze vypočítat následující vlastnosti funkce t :

- Pro $\alpha = 0$, tj. volnou částici, platí vždy $t \leq 1$
- Pro $\alpha > 0$ se střídají zakázané ($t > 1$) a povolené pásy ($t \leq 1$)
- Pro $k = 0$ je $t = \left| 1 + \frac{aM\alpha}{\hbar^2} \right| > 1$, tj. nula leží v zakázaném pásu



Obrázek 1.2: Průběh funkce (1.32) v závislosti na k pro $\alpha = 5$ (vlevo) a $\alpha = 10$ (vpravo). Modře jsou vyznačeny pásy, kde je podmínka $t \leq 1$ splněna. Horní mez pásu je na fixních bodech $k_n = \frac{n\pi}{a}$.

- Horní meze pásů se nachází na hodnotách $k_n = \frac{n\pi}{a}$ nezávisle na α
- S rostoucím α se pásy zužují, v limitě $\alpha \rightarrow +\infty$ přejdou v jednotlivé body k_n

Dosazením (1.27) do rovnice (1.31) dostaneme implicitní vztah pro energii (tj. disperzní relace)

$$\cos(aq) = \cos\left(a\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}\right) + \frac{M\alpha}{\hbar^2\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}} \sin\left(a\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}\right). \quad (1.33)$$

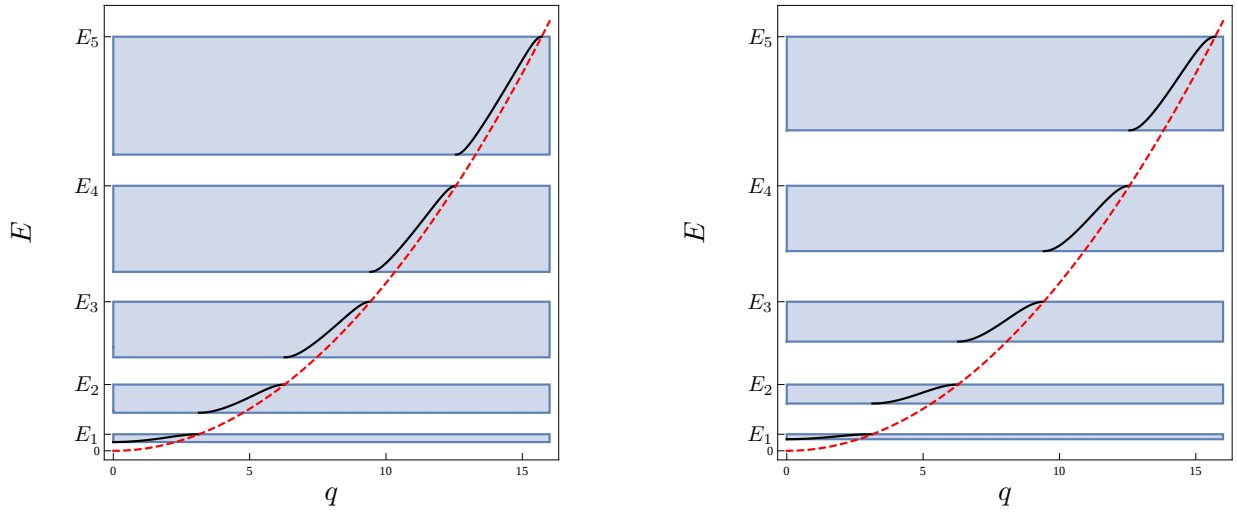
Vidíme, že obdobné závěry jako pro k platí i pro energii:

- Pro $\alpha = 0$ je jsou povolené všechny energie $E \geq 0$
- Pro $\alpha > 0$ se střídají zakázané a povolené energetické pásy
- Horní meze pásů jsou na hodnotách $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2Ma^2}$, které odpovídají energiím částice v nekonečné potenciálové jámě šířky a
- S rostoucím α se pásy zužují, v limitě $\alpha \rightarrow +\infty$ bude energetické spektrum diskrétní a tvořeno vlastními čísly E_n

Pro ilustraci je na obrázku 1.3 znázorněna energie v závislosti na q pro dvě různé hodnoty α . Poznamenejme, že pokud pro dané k je q řešením rovnice (1.31), pak je řešením i $q + \frac{2\pi n}{a}$, $n \in \mathbb{Z}$. V obrázku je použita konvence, kdy každé hodnotě $k \in \langle \frac{\pi n}{a}, \frac{\pi(n+1)}{a} \rangle$ přiřadíme q tak, že spadá do stejného intervalu. Tím je pro každé k hodnota q určena jednoznačně, a $E(q)$ je rovněž jednoznačně definovaná funkce.

Z disperzních relací (1.33) můžeme určit grupovou rychlost

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dq},$$



Obrázek 1.3: Černá čára vyznačuje energie v závislosti na q pro $\alpha = 5$ (vlevo) a $\alpha = 10$ (vpravo). Modře jsou vyznačeny povolené energetické pásy. Červená čárkovaná čára odpovídá energii volné částice ($\alpha = 0$), kdy $k = q$ a tedy $E = \frac{\hbar^2 q^2}{2M}$.

pomocí derivace implicitní funkce. Grupová rychlost v závislosti na energii je znázorněna na obrázku 1.4, resp. v závislosti na q je na obrázku 1.5. Z grafů je vidět, že grupová rychlost pro E , resp. q , blízké krajům pásu klesá k nule.

Na závěr ještě určíme vlnové funkce pro dané k a q . Na intervalu $(0, a)$ má tvar (1.28). Díky Blochově teorému ji můžeme na intervalu $(na, (n+1)a)$ zapsat způsobem

$$x \in (na, (n+1)a) : \psi_q(x) = e^{iqna} (Ae^{ik(x-na)} + Be^{-ik(x-na)}).$$

Zbývá určit koeficienty A , B , které jsou dané soustavou rovnic (1.29), (1.30). Z rovnice (1.29) vyjádříme A pomocí B

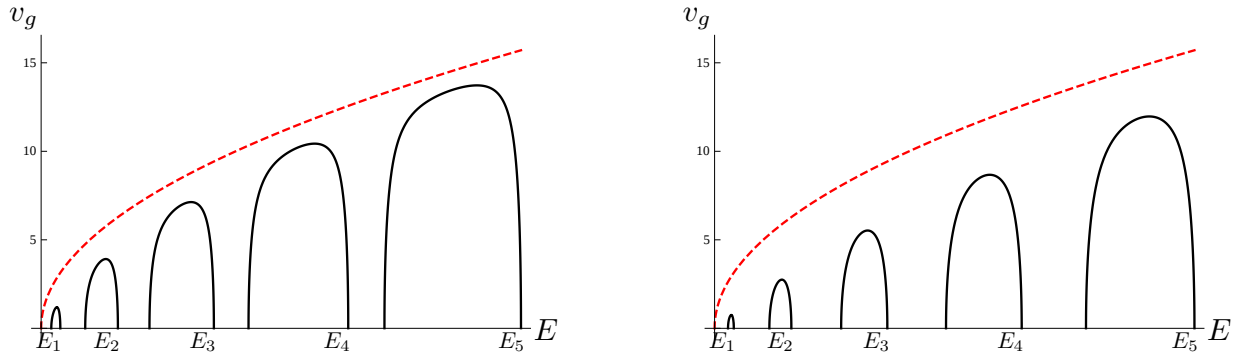
$$A = B \frac{\sin\left(\frac{1}{2}a(k+q)\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}a(k-q)\right)} e^{-iak}. \quad (1.34)$$

Budeme uvažovat dodatečnou normalizační podmínku mezi dvěma δ -funkcemi (ψ_q není kvadraticky integrabilní na $\mathbb{R}$, je to zobecněná vlastní funkce příslušející bodu ze spojitého spektra)

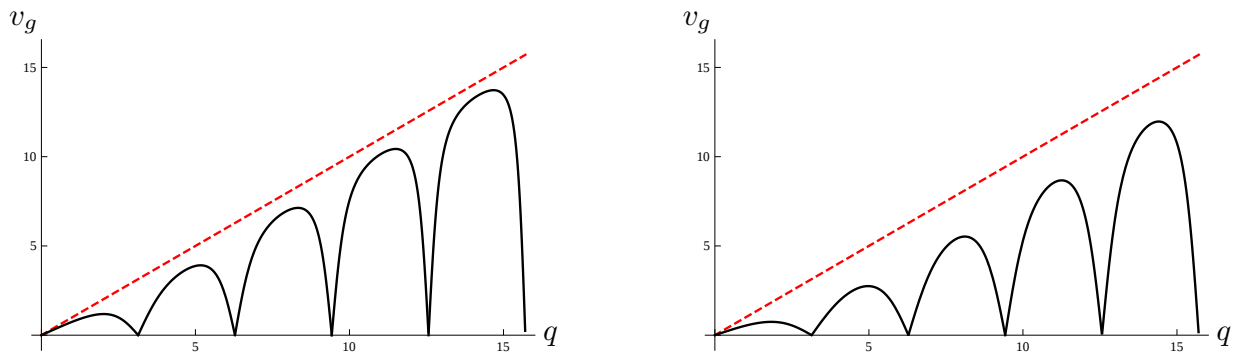
$$\int_0^a |\psi_q(x)|^2 dx = 1. \quad (1.35)$$

Normalizační podmínka vede na rovnici

$$a(|A|^2 + |B|^2) + \frac{\sin(ak)}{k} (\overline{A}B e^{-iak} + A\overline{B} e^{iak}) = 1.$$



Obrázek 1.4: Grupová rychlost v_g v závislosti na energii E pro $\alpha = 5$ (vlevo) a $\alpha = 10$ (vpravo). Červená čárkovaná čára odpovídá grupové rychlosti volné částice ($\alpha = 0$), kdy $v_g = \sqrt{2E}$.



Obrázek 1.5: Grupová rychlost v_g v závislosti na kvazihybnosti q pro $\alpha = 5$ (vlevo) a $\alpha = 10$ (vpravo). Červená čárkovaná čára odpovídá grupové rychlosti volné částice ($\alpha = 0$), kdy $v_g = \frac{\hbar q}{M}$.

Dosadíme za A ze vztahu (1.34), $\frac{\sin(ak)}{k}$ nahradíme pomocí (1.31) a po řadě algebraických úprav dostaneme

$$2a|B|^2 \frac{1 - \cos(ak) \cos(aq) + \frac{4M\alpha}{ah^2} (\cos(aq) - \cos(ak))^2}{1 - \cos(a(k - q))} = 1.$$

Analogicky můžeme získat i vztah pro $|A|^2$

$$2a|A|^2 \frac{1 - \cos(ak) \cos(aq) + \frac{4M\alpha}{ah^2} (\cos(aq) - \cos(ak))^2}{1 - \cos(a(k + q))} = 1.$$

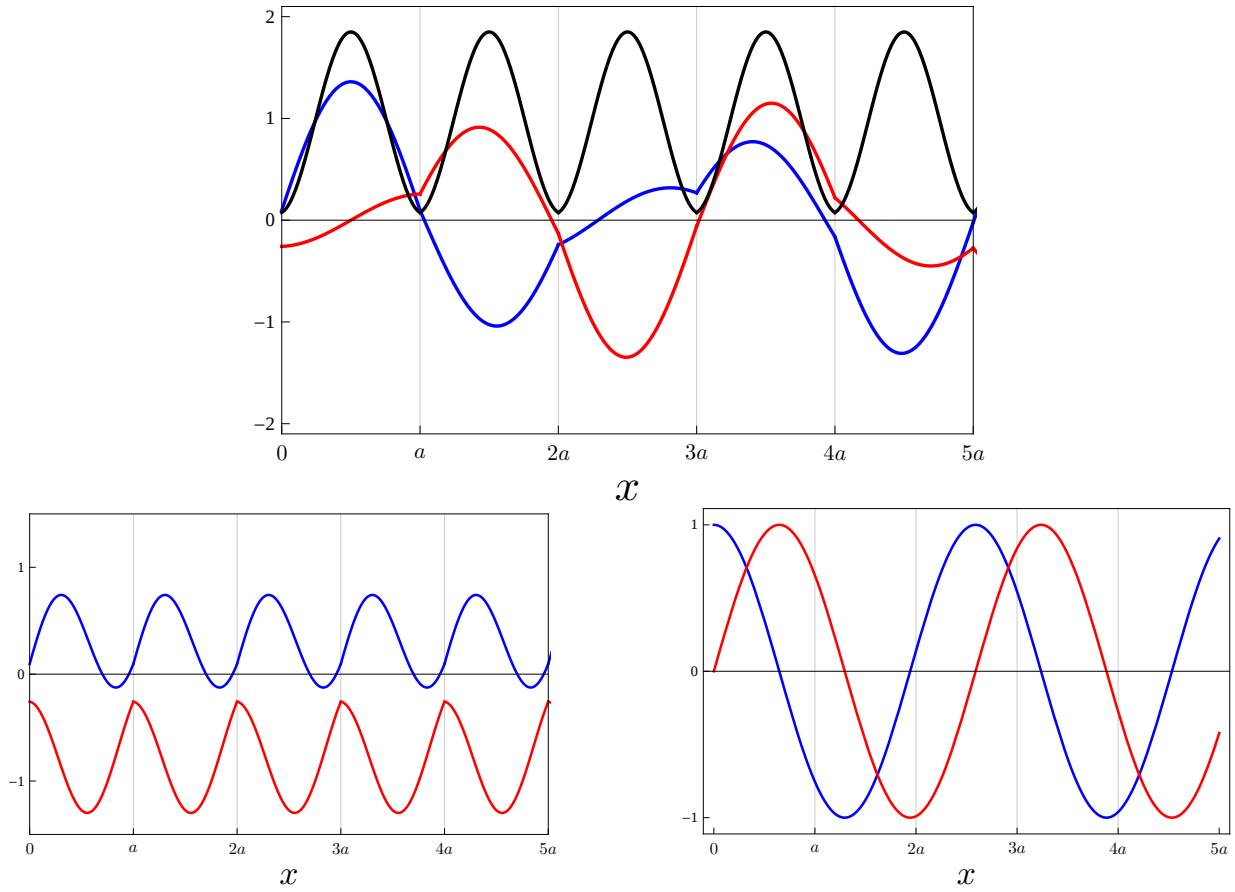
Z těchto dvou rovnic pak můžeme vyjádřit A a B ve tvaru

$$\begin{aligned} B &= C \sqrt{1 - \cos(a(k - q))} e^{-i\frac{ak}{2}}, \\ A &= s C \sqrt{1 - \cos(a(k + q))} e^{i\frac{ak}{2}}, \\ C &= \frac{1}{\sqrt{2a}} \frac{1}{\sqrt{1 - \cos(ak) \cos(aq) + \frac{4M\alpha}{ah^2} (\cos(aq) - \cos(ak))^2}}, \\ s &= \text{sgn}[\cos(aq) - \cos(ak)]. \end{aligned}$$

Vlnová funkce na intervalu $(na, (n + 1)a)$ normalizovaná na jednu periodu je tedy rovna

$$\psi_q(x) = C e^{iqna} \left(s \sqrt{1 - \cos(a(k + q))} e^{ik(x - (n - \frac{1}{2})a)} + \sqrt{1 - \cos(a(k - q))} e^{-ik(x - (n - \frac{1}{2})a)} \right)$$

Pro ilustraci je na obrázku 1.6 vlnová funkce pro $\alpha = 5$, $k = 3$ (odpovídající $q = 2.426$) a její rozklad na periodickou funkci $u_q(x)$ a rovinnou vlnu e^{iqx} .



Obrázek 1.6: Vlnová funkce pro $\alpha = 5$, $k = 3$ (odpovídající $q = 2.426$) a její rozklad na periodickou funkci $u_q(x)$ a rovinnou vlnu e^{iqx} . Reálná část je vyznačena modře, imaginární část červeně. Nahoře je zobrazena celá vlnová funkce $\psi_q(x)$, černě je vyznačena hustota pravděpodobnosti nalezení částice. Vlnová funkce sice není periodická, ale hustota pravděpodobnosti ano, protože $|\psi_q(x)|^2 = |u_q(x)|^2$. Dole je zobrazena periodická funkce $u_q(x)$ (vlevo) a rovinná vlna e^{iqx} (vpravo).

Kapitola 2

Rotace

2.1 Rotace v klasické mechanice

V klasické mechanice se vektory z $\mathbb{R}^3$ při rotacích transformují pomocí matic R tvořících grupu $SO(3)$ (tj. 3×3 ortogonálních matic s jednotkovým determinantem)

$$\vec{x} \xrightarrow{R} \vec{x}_R \equiv \vec{x}', \quad \vec{x}' = R \vec{x}, \quad R^T = R^{-1}, \quad \det R = 1.$$

Rotacím okolo hlavních os x, y, z ($\equiv 1, 2, 3$) odpovídají matice

$$\begin{aligned} R_x(\alpha) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}, \\ R_y(\alpha) &= \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & \sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix}, \\ R_z(\alpha) &= \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Infinitezimální rotace (tj. do 1. řádu Taylorova rozvoje) můžeme zapsat ve tvaru

$$R_i(\alpha) \simeq \mathbb{I} - i\alpha M_i,$$

kde matice M_i jsou rovny

$$M_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad M_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Prvky matic M_i lze zapsat způsobem

$$(M_i)_{jk} = -i\varepsilon_{ijk}, \quad (2.2)$$

ze kterého plynou komutační relace

$$[M_i, M_j] = i\varepsilon_{ijk}M_k. \quad (2.3)$$

Matice M_i tvoří Lieovu algebru $\mathfrak{so}(3) \simeq \mathfrak{su}(2)$. Rotace kolem hlavních os vyjádříme jako exponenciálu matic M_i

$$R_i(\alpha) = e^{-i\alpha M_i}.$$

Rotace kolem obecné osy dané jednotkovým vektorem $\vec{n}$ je potom

$$R_{\vec{n}}(\alpha) = e^{-i\alpha\vec{n}\cdot\vec{M}}, \quad \vec{M} = (M_1, M_2, M_3). \quad (2.4)$$

Při infinitezimální rotaci okolo osy $\vec{n}$ se vektor $\vec{x}$ transformuje způsobem

$$\vec{x}' \approx \vec{x} - i\alpha(\vec{n} \cdot \vec{M})\vec{x} = \vec{x} + \alpha \vec{n} \times \vec{x}. \quad (2.5)$$

Alternativně můžeme rotaci zapsat pomocí Eulerových úhlů α, β, γ (odpovídají rotacím okolo pevných os z, y a z)

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma) = e^{-i\alpha M_3} e^{-i\beta M_2} e^{-i\gamma M_3}. \quad (2.6)$$

Grupa rotací $SO(3)$, resp. odpovídající Lieova algebra $\mathfrak{so}(3) \simeq \mathfrak{su}(2)$ není komutativní (2.3), takže nelze snadno převést rotaci zapsanou pomocí Eulerových úhlů (2.6) do tvaru (2.4).

2.2 Rotace v kvantové mechanice

V kvantové mechanice rotacím odpovídají unitární operátory $\hat{R}$, které představují reprezentaci grupy rotací $SO(3)$ na příslušném Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$. Uvažujme nejprve částici bez spinu, kde $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$. Působením rotace se má vlnová funkce transformovat podle (1.3)

$$\psi_R(\vec{x}) = \hat{R}\psi(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x}).$$

Použijeme rotaci okolo osy z a přepíšeme vlnovou funkci ve sférických souřadnicích, rotace pak odpovídá změně azimutálního úhlu

$$\psi_R(r, \theta, \varphi) = \hat{R}_z(\alpha)\psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi - \alpha).$$

Pro infinitezimální rotaci o $\varepsilon \ll 1$ pak nalezneme

$$\hat{R}_z(\varepsilon)\psi(r, \theta, \varphi) \approx \psi(r, \theta, \varphi) - \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial \varphi}(r, \theta, \varphi) = \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{L}_z \right) \psi(r, \theta, \varphi)$$

Generátorem rotace okolo osy z je tedy z -ová složka orbitálního momentu hybnosti. Analogicky, generátor rotace okolo osy $\vec{n}$ je projekce orbitálního momentu na tento směr, tj.

operátor $\vec{n} \cdot \hat{\vec{L}}$, jak se lze přesvědčit pro infinitezimální rotaci s použitím vztahu (2.5)

$$\begin{aligned}\hat{R}_{\vec{n}}(\varepsilon)\psi(\vec{x}) &= \psi(R_{\vec{n}}^{-1}(\varepsilon)\vec{x}) \approx \psi(\vec{x} - \varepsilon \vec{n} \times \vec{x}) \approx \psi(\vec{x}) - \varepsilon \varepsilon_{ijk} n_j x_k \frac{\partial \psi}{\partial x_i}(\vec{x}) \\ &\approx \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}} \right) \psi(\vec{x})\end{aligned}$$

Rotaci o konečný úhel pak zapíšeme jako exponenciálu

$$\hat{R}_{\vec{n}}(\alpha) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}}\right).$$

Pro částici se spinem je nutné transformovat jak prostorovou část tak i spinovou část stavu. Hilbertův prostor je tenzorový součin

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_O \otimes \mathcal{H}_S,$$

orbitálních ($\mathcal{H}_O = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$) a spinových stupňů volnosti ($\mathcal{H}_S = C^{2s+1}$ pro částici se spinem velikosti $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$). Rotace spinových stavů jsou generovány operátory spinu $\hat{\vec{S}}$, takže rotaci na $\mathcal{H}$ reprezentuje operátor

$$\hat{R}_{\vec{n}}(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}}} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{S}}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot (\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}})} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{J}}}.$$

Zde jsme využili toho, že operátory spinu a orbitálního momentu hybnosti komutují. Obecně je tedy generátorem rotací celkový moment hybnosti

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}.$$

2.2.1 Operátory momentu hybnosti, maticové reprezentace

Připomeňme, že složky momentu hybnosti splňují komutační relace

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_l] = i\hbar \varepsilon_{klm} \hat{J}_m, \quad (2.7)$$

které souvisí s tím, že se jedná o hermitovskou reprezentaci Lieovy algebry $\mathfrak{so}(3) \simeq \mathfrak{su}(2)$ (2.3). Z těchto relací plyne jednak to, že $\hat{J}^2$ je kompatibilní se všemi složkami $\hat{J}_i$, a také existence posunovacích operátorů $\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2$

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_{\pm}] = \pm\hbar \hat{J}_{\pm}, \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_{\pm}] = 0.$$

Společné vlastní vektory $|j, m\rangle$ operátorů $\hat{J}_3, \hat{J}^2$ splňují

$$\hat{J}_3|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle, \quad \hat{J}^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle.$$

Rozsah kvantových čísel j a m je

$$\begin{aligned} j &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ m &= j, j-1, \dots, -j. \end{aligned}$$

Posunovací operátory působí na kety $|j, m\rangle$ následujícím způsobem

$$\hat{J}_{\pm}|j, m\rangle = \alpha_{j,m}^{\pm}|j, m \pm 1\rangle, \quad \alpha_{j,m}^{\pm} = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}.$$

Matice operátorů $\hat{J}_3$ a $\hat{J}^2$ jsou v této bázi diagonální

$$\begin{aligned} (\mathbb{J}_3)_{(j',m'),(j,m)} &= \langle j', m' | \hat{J}_3 | j, m \rangle = m\hbar\delta_{jj'}\delta_{mm'}, \\ \mathbb{J}_3 &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & & \\ 0 & -\frac{1}{2} & & \\ & & 1 & 0 & 0 \\ & & 0 & 0 & 0 \\ & & 0 & 0 & -1 \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix}, \\ (\mathbb{J}^2)_{(j',m'),(j,m)} &= \langle j', m' | \hat{J}^2 | j, m \rangle = \hbar^2 j(j+1)\delta_{jj'}\delta_{mm'}, \\ \mathbb{J}^2 &= \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & & & \\ \frac{3}{4} & 0 & & \\ 0 & \frac{3}{4} & & \\ & & 2 & 0 & 0 \\ & & 0 & 2 & 0 \\ & & 0 & 0 & 2 \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Bloky odpovídají hodnotám $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$, kvantové číslo m bereme od $m = j$ sestupně. Matice operátorů $\hat{J}_{1,2}$ jsou blokově diagonální

$$\begin{aligned}
(\mathbb{J}_1)_{(j',m'),(j,m)} &= \langle j', m' | \hat{J}_1 | j, m \rangle = \delta_{jj'} \frac{1}{2} (\alpha_{j,m}^+ \delta_{m',m+1} + \alpha_{j,m}^- \delta_{m',m-1}), \\
\mathbb{J}_1 &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ & 0 & \frac{1}{2} & & \\ & \frac{1}{2} & 0 & & \\ & & & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ & & & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ & & & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix}, \\
(\mathbb{J}_2)_{(j',m'),(j,m)} &= \langle j', m' | \hat{J}_2 | j, m \rangle = \delta_{jj'} \frac{1}{2i} (\alpha_{j,m}^+ \delta_{m',m+1} - \alpha_{j,m}^- \delta_{m',m-1}), \\
\mathbb{J}_2 &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ & 0 & -\frac{i}{2} & & \\ & \frac{i}{2} & 0 & & \\ & & & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ & & & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ & & & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Bloky tvoří matice $\mathbb{J}_k^{(j)}$ s prvky

$$(\mathbb{J}_k^{(j)})_{m',m} = \langle j, m' | \hat{J}_k | j, m \rangle. \quad (2.8)$$

Tyto matice tvoří iderucibilní reprezentaci Lieovy algebry $\mathfrak{so}(3) \simeq \mathfrak{su}(2)$ na prostoru $\mathbb{C}^{2j+1}$, tj. splňují stejné komutační relace jako $\hat{J}_k$ (2.7)

$$[\mathbb{J}_k^{(j)}, \mathbb{J}_l^{(j)}] = i\hbar \varepsilon_{klm} \mathbb{J}_m^{(j)}.$$

$\mathbb{J}_k^{(j)}$ jsou matice operátorů složek spinu velikosti j . Působení operátorů $\hat{J}_k$ na kety $|j, m\rangle$ nemění hodnotu j a můžeme ho zapsat pomocí matic $\mathbb{J}_k^{(j)}$ ve tvaru

$$\hat{J}_k |j, m\rangle = \sum_{m'=-j}^j (\mathbb{J}_k^{(j)})_{m',m} |j, m'\rangle.$$

2.2.2 Maticové reprezentace rotací, Wignerovy D -funkce

Matice operátorů rotací jsou v bázi $|j, m\rangle$ rovněž blokově diagonální, tj. platí

$$\hat{R} |j, m\rangle = \sum_{m'=-j}^j \langle j, m' | \hat{R} | j, m \rangle |j, m'\rangle.$$

Označíme matice rotace okolo osy $\vec{n}$ pro velikost momentu hybnosti j jako $R_{\vec{n}}^{(j)}(\alpha)$, její maticové elementy jsou

$$\left(R_{\vec{n}}^{(j)}(\alpha)\right)_{m',m} = \langle j, m' | \hat{R}_{\vec{n}}(\alpha) | j, m \rangle.$$

Pro spin $\frac{1}{2}$ je snadno určíme explicitně z vlastností Pauliho matic

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{I}, \quad \sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\mathbb{I} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \quad (2.9)$$

a rozvojem exponenciály do Taylorovy řady

$$R_{\vec{n}}^{(\frac{1}{2})}(\alpha) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha\vec{n} \cdot \hat{\vec{S}}\right) = \cos\frac{\alpha}{2}\mathbb{I} - i\sin\frac{\alpha}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma}. \quad (2.10)$$

Při parametrizaci rotace pomocí Eulerových úhlů se maticové elementy $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ označují jako Wignerovy D -funkce

$$D_{m',m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle j, m' | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | j, m \rangle.$$

Dohromady tvoří Wignerovy D -matice, které představují ireducibilní unitární reprezentaci grupy rotací $SO(3)$ na prostoru momentu hybnosti velikosti j , tj. $\mathbb{C}^{2j+1}$. Lze je zapsat způsobem

$$\begin{aligned} D_{m',m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle j, m' | e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_3} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_2} e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{J}_3} | j, m \rangle \\ &= e^{-i\alpha m'} e^{-i\gamma m} \underbrace{\langle j, m' | e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_2} | j, m \rangle}_{d_{m',m}^{(j)}(\beta)}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

kde $d_{m',m}^{(j)}(\beta)$ jsou tzv. malé d -funkce, které jsou ryze reálné. Matice $d^{(j)}(\beta)$ je ortogonální. Wignerovy D -funkce mají řadu vlastností, např. z unitarity D -matic pro ně platí relace

$$\begin{aligned} \sum_m \overline{D_{k,m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)} D_{l,m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \delta_{kl}, \\ \sum_m \overline{D_{m,k}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)} D_{m,l}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \delta_{kl}. \end{aligned}$$

Dále splňují vztahy

$$\overline{D_{k,m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)} = D_{m,k}^{(j)}(-\alpha, -\beta, -\gamma) = (-1)^{k-m} D_{-k,-m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma).$$

Analogicky pro d -funkce platí vztahy

$$d_{k,m}^{(j)}(\beta) = d_{m,k}^{(j)}(-\beta) = (-1)^{k-m} d_{m,k}^{(j)}(\beta) = (-1)^{k-m} d_{-k,-m}^{(j)}(\beta). \quad (2.12)$$

Pro celočíselné $j = l$ Wignerovy D -funkce úzce souvisí s kulovými funkcemi

$$\begin{aligned} D_{m,0}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \bar{Y}_{l,m}(\beta, \alpha), \\ D_{0,m}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l,m}(\beta, \gamma). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Wignerovy D -funkce tvoří ortogonální množinu funkcí Eulerových úhlů

$$\int_0^\pi \sin \beta d\beta \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{2\pi} d\gamma \bar{D}_{m,k}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m',k'}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{8\pi^2}{2j+1} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \delta_{k,k'}. \quad (2.14)$$

Označme jako $D^{(j)}(R)$ Wignerovu D -matici rotace $\hat{R}$ pro moment hybnosti j . Kety $|j, m\rangle$ se pak transformují způsobem

$$\hat{R}|j, m\rangle = \sum_{m'=-j}^j D_{m',m}^{(j)}(R) |j, m'\rangle. \quad (2.15)$$

2.2.3 Transformace pozorovatelných, kartézské tenzory

Pozorovatelné se při rotacích transformují způsobem

$$\hat{A} \xrightarrow{R} \hat{A}' = \hat{R} \hat{A} \hat{R}^\dagger.$$

Pro infinitezimální rotace okolo osy $\vec{n}$ o malý úhel α platí

$$\hat{A}' \simeq \hat{A} - \frac{i}{\hbar} \alpha n_k [\hat{J}_k, \hat{A}].$$

Skalární pozorovatelné se při rotacích nemění, takže se nemění jejich střední hodnoty ani maticové elementy. Skaláry komutují se všemi složkami celkového momentu hybnosti

$$\hat{A}' = \hat{A} \iff [\hat{J}_k, \hat{A}] = 0. \quad (2.16)$$

Příkladem skalárního operátoru jsou např. $\hat{J}^2$, $\hat{L}^2$, $\hat{X}^2$, $\hat{P}^2$.

Vektorový operátor $\hat{\vec{V}}$ je trojice operátorů $\hat{V}_j$, které se při rotacích transformují podle předpisu

$$\hat{V}'_j = R_{j,k}^{-1} \hat{V}_k, \quad (2.17)$$

kde $R_{j,k}^{-1}$ jsou prvky $SO(3)$ matice rotace R^{-1} . Důvodem pro tuto definici je, že maticové elementy vektorových operátorů se pak transformují jako složky vektoru

$$\langle \psi' | \hat{V}_j | \phi' \rangle = \langle \psi | \hat{R}^\dagger \hat{V}_j \hat{R} | \phi \rangle = R_{j,k} \langle \psi | \hat{V}_k | \phi \rangle.$$

Přechodem k infinitezimálním rotacím (1.4) s využitím tvaru matic M_i (2.2) nalezneme

$$\hat{V}'_j \approx \hat{V}_j - \frac{i}{\hbar} \varepsilon n_i \left[\hat{J}_i, \hat{V}_j \right] = (I + i\varepsilon n_i M_i)_{jk} \hat{V}_k = \hat{V}_j + \varepsilon n_i \varepsilon_{ijk} \hat{V}_k.$$

Odsud plyne, že složky vektorového operátoru musí splňovat následující komutační relace s momentem hybnosti

$$\left[\hat{J}_i, \hat{V}_j \right] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{V}_k. \quad (2.18)$$

Příkladem kartézských vektorových operátorů jsou např. $\hat{\vec{J}}, \hat{\vec{L}}, \hat{\vec{X}}, \hat{\vec{P}}$.

Analogicky vztahu (2.17) můžeme zavést kartézský tenzorový operátor řádu n jako sadu 3^n operátorů $\hat{T}_{i_1, \dots, i_n}$, které splňují

$$\hat{T}'_{i_1, \dots, i_n} = R_{i_1, j_1}^{-1} \cdots R_{i_n, j_n}^{-1} \hat{T}_{j_1, \dots, j_n}. \quad (2.19)$$

Maticové elementy se pak transformují jako složky tenzoru

$$\langle \psi' | \hat{T}_{i_1, \dots, i_n} | \phi' \rangle = R_{i_1, j_1} \cdots R_{i_n, j_n} \langle \psi | \hat{T}_{j_1, \dots, j_n} | \phi \rangle.$$

Pro kartézský tenzor 2. řádu lze přechodem k infinitezimální rotaci odvodit komutační relace s momentem hybnosti

$$\left[\hat{J}_k, \hat{T}_{ij} \right] = i\hbar \left(\varepsilon_{kil} \hat{T}_{lj} + \varepsilon_{kjl} \hat{T}_{il} \right). \quad (2.20)$$

Podobný vztah platí i pro tenzory vyššího řádu - za každý tenzorový index přibude na pravé straně jeden člen.

2.2.4 Maticové elementy skalárů ve stavech s momentem hybnosti

Uvažujme dvě ON báze stavů s momentem hybnosti $\{|a, j, m\rangle\}$ a $\{|b, j, m\rangle\}$, kde a (b) značí další kvantová čísla odpovídající pozorovatelným kompatibilním s momentem hybnosti. Z komutačních relací (2.16) pro maticové elementy skalárního operátoru snadno odvodíme, že mohou být nenulové pouze pro $j_1 = j_2$ a $m_1 = m_2$. Platí totiž

$$\begin{aligned} \langle a, j_1, m_1 | \hat{J}_3 \hat{A} | b, j_2, m_2 \rangle &= m_1 \hbar \langle a, j_1, m_1 | \hat{A} | b, j_2, m_2 \rangle = \langle a, j_1, m_1 | \hat{A} \hat{J}_3 | b, j_2, m_2 \rangle = \\ &= m_2 \hbar \langle a, j_1, m_1 | \hat{A} | b, j_2, m_2 \rangle, \end{aligned}$$

a tedy

$$(m_1 - m_2) \langle a, j_1, m_1 | \hat{A} | b, j_2, m_2 \rangle = 0.$$

Postup pro $\hat{J}^2$ je analogický. S použitím posunovacích operátorů navíc snadno ukážeme, že maticové elementy nezávisí na m . Skalární operátor komutuje i s $\hat{J}_{\pm}$, z čehož plyne

$$\begin{aligned} \langle a, j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ \hat{A} | b, j, m \rangle &= \langle a, j, m | \hat{J}_- \hat{A} \hat{J}_+ | b, j, m \rangle = (\alpha_{j,m}^+)^2 \langle a, j, m+1 | \hat{A} | b, j, m+1 \rangle \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - m(m+1)) \langle a, j, m+1 | \hat{A} | b, j, m+1 \rangle. \end{aligned}$$

S využitím vztahu $\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar \hat{J}_3$ ale současně platí

$$\langle a, j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ \hat{A} | b, j, m \rangle = \hbar^2 (j(j+1) - m(m+1)) \langle a, j, m | \hat{A} | b, j, m \rangle,$$

takže musí platit rovnost

$$\langle a, j, m | \hat{A} | b, j, m \rangle = \langle a, j, m+1 | \hat{A} | b, j, m+1 \rangle.$$

Celkem tedy pro maticové elementy skalárního operátoru platí

$$\langle a, j_1, m_1 | \hat{A} | b, j_2, m_2 \rangle = \delta_{j_1, j_2} \delta_{m_1, m_2} F(j_1, a, b). \quad (2.21)$$

Pro kartézské vektory, resp. tenzory vyššího řádu, takto jednoduché vztahy pro maticové elementy nedostaneme. Důvodem je, že se při rotacích transformují jinak, než stavy momentu hybnosti $|a, j, m\rangle$. Kartézské tenzory se transformují přímo podle $SO(3)$ matic R (2.19), kdežto stavy $|a, j, m\rangle$ se transformují působením Wignerových D-matic (2.15), tj. podle ireducibilní reprezentace $SO(3)$. V kapitole 4 zavedeme tzv. *ireducibilní tenzorové operátory* (ITO), které se při rotacích transformují stejně jako kety $|a, j, m\rangle$, tj. podle ireducibilních reprezentací grupy $SO(3)$. S využitím teorie skládání momentů hybnosti z následující kapitoly pak lze výpočet maticových elementů ITO podstatně zjednodušit.

2.3 Příklady

Cvičení 7. Částice se spinem $\frac{1}{2}$ je ve vlastním stavu $\hat{S}_z$ s kladnou projekcí. Jakým spinorem ψ' je popsán stav po rotaci okolo osy y o úhel α ? Určete vektor polarizace $\vec{p}' = (\langle\sigma_1\rangle, \langle\sigma_2\rangle, \langle\sigma_3\rangle)$ pro výsledný spinor.

Návod: Výchozí stav částice je popsán vektorem $\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Rotací okolo osy y dostaneme stav

$$\psi' = R_y^{(\frac{1}{2})}(\alpha)\psi = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} & -\sin \frac{\alpha}{2} \\ \sin \frac{\alpha}{2} & \cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}.$$

Vektor polarizace pro stav ψ' je roven

$$\vec{p}' = (\sin \alpha, 0, \cos \alpha),$$

což odpovídá rotaci původního vektoru polarizace $\vec{p} = (0, 0, 1)$ okolo osy y o úhel α

$$\vec{p}' = R_y(\alpha) \cdot \vec{p} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & \sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \alpha \\ 0 \\ \cos \alpha \end{pmatrix}.$$

Cvičení 8. Určete Wignerovy d -matice pro $j = \frac{1}{2}$ a $j = 1$. Čemu je rovno $d^{(j)}(2\pi)$?

Návod:

$j = \frac{1}{2}$: V tomto případě díky vztahu (2.10) okamžitě nalezneme

$$R_y^{(\frac{1}{2})}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \equiv d^{(\frac{1}{2})}(\beta). \quad (2.22)$$

Pro $\beta = 2\pi$ dostaneme

$$d^{(\frac{1}{2})}(2\pi) = -\mathbb{1}.$$

$j = 1$: Musíme nalézt matici

$$d^{(1)}(\beta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\mathbb{J}_2^{(1)}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\beta\right)^n \mathbb{J}_2^{(1)n}, \quad (2.23)$$

kde

$$\mathbb{J}_2^{(1)} = i\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Přímým výpočtem určíme druhou a třetí mocninu matice

$$\mathbb{J}_2^{(1)2} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbb{J}_2^{(1)3} = i\frac{\hbar^3}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \hbar^2 \mathbb{J}_2^{(1)}.$$

Obecně tedy platí

$$\mathbb{J}_2^{(1)2n} = \hbar^{2(n-1)} \mathbb{J}_2^{(1)2} \quad (n > 0), \quad \mathbb{J}_2^{(1)2n+1} = \hbar^{2n} \mathbb{J}_2^{(1)}.$$

Rozdělením řady (2.23) na nultý, sudé a liché členy postupně dostaneme

$$\begin{aligned} d^{(1)}(\beta) &= \mathbb{1} + \underbrace{\frac{1}{\hbar^2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \beta^{2n} \right)}_{\cos \beta - 1} \mathbb{J}_2^{(1)2} - \underbrace{\frac{i}{\hbar} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \beta^{2n+1} \right)}_{\sin \beta} \mathbb{J}_2^{(1)} \\ &= \mathbb{1} + \frac{1}{\hbar^2} (\cos \beta - 1) \mathbb{J}_2^{(1)2} - \frac{i}{\hbar} \sin \beta \mathbb{J}_2^{(1)} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Pro $\beta = 2\pi$ nalezneme

$$d^{(1)}(2\pi) = \mathbb{1}.$$

Přímý výpočet d -matic pro vyšší hodnoty j už není použitelný.

Cvičení 9. *Explicitním výpočtem ukažte, jak se transformují složky operátoru spinu pro částici se spinem $\frac{1}{2}$ při rotaci o úhel α okolo osy z .*

Návod: Matice složek spinu se při rotaci transformují způsobem

$$S'_i = R_z^{(\frac{1}{2})}(\alpha) S_i R_z^{(\frac{1}{2})\dagger}(\alpha),$$

kde

$$R_z^{(\frac{1}{2})}(\alpha) = \cos \frac{\alpha}{2} I - i \sin \frac{\alpha}{2} \sigma_3, \quad R_z^{(\frac{1}{2})\dagger}(\alpha) = \cos \frac{\alpha}{2} I + i \sin \frac{\alpha}{2} \sigma_3.$$

S použitím komutačních relací a vztahů pro součin Pauliho matic (2.9) pro první složku operátoru spinu postupně dostaneme

$$\begin{aligned} S'_1 &= \frac{\hbar}{2} \left(\cos^2 \frac{\alpha}{2} \sigma_1 + i \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} [\sigma_1, \sigma_3] + \sin^2 \frac{\alpha}{2} \sigma_3 \sigma_1 \sigma_3 \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \left(\cos^2 \frac{\alpha}{2} \sigma_1 + \sin \alpha \sigma_2 - \sin^2 \frac{\alpha}{2} \sigma_1 \right) \\ &= \cos \alpha S_1 + \sin \alpha S_2. \end{aligned}$$

Analogickým způsobem nalezneme

$$\begin{aligned} S'_2 &= -\sin \alpha S_1 + \cos \alpha S_2, \\ S'_3 &= S_3. \end{aligned}$$

Výsledek odpovídá tomu, že $\hat{S}_i$ jsou složky vektorového operátoru, takže platí

$$\hat{S}' = R_z^{-1}(\alpha) \hat{S} = R_z(-\alpha) \hat{V} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{S}_1 \\ \hat{S}_2 \\ \hat{S}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha \hat{S}_1 + \sin \alpha \hat{S}_2 \\ -\sin \alpha \hat{S}_1 + \cos \alpha \hat{S}_2 \\ \hat{S}_3 \end{pmatrix}$$

Cvičení 10. Uvažujte vektorový operátor $\hat{V}$, tj. jeho složky splňují komutační relace (2.18). S použitím BCH formule explicitním výpočtem ověřte, že platí vztahy (2.17). Uvažujte rotaci kolem osy x o úhel α .

Návod: Máme explicitním výpočtem ověřit, že platí

$$\hat{V}' = R_x^{-1}(\alpha) \hat{V} = R_x(-\alpha) \hat{V} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & \sin \alpha \\ 0 & -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{V}_1 \\ \hat{V}_2 \\ \hat{V}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{V}_1 \\ \cos \alpha \hat{V}_2 + \sin \alpha \hat{V}_3 \\ -\sin \alpha \hat{V}_2 + \cos \alpha \hat{V}_3 \end{pmatrix},$$

přičemž složky operátoru se při rotaci okolo osy x transformují způsobem

$$\hat{V}'_i = \hat{R}_x(\alpha) \hat{V}_i \hat{R}_x^\dagger(\alpha).$$

K výpočtu využijeme BCH formuli ve tvaru (1.16), kde

$$\hat{A} = -\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{J}_1, \quad \hat{B} = \hat{V}_i.$$

Pro $i = 1$ je $\hat{K}_0 = \hat{V}_1$ a $\hat{K}_2 = [\hat{J}_1, \hat{V}_1] = 0 \equiv \hat{K}_n, n \geq 1$, takže

$$\hat{V}'_1 = \hat{V}_1.$$

Pro $i = 2$ postupně dostaneme

$$\begin{aligned}\hat{K}_0 &= \hat{V}_2, & \hat{K}_1 &= -\frac{i}{\hbar}\alpha [\hat{J}_1, \hat{V}_2] = \alpha \hat{V}_3, \\ \hat{K}_2 &= -\frac{i}{\hbar}\alpha^2 [\hat{J}_1, \hat{V}_3] = -\alpha^2 \hat{V}_2,\end{aligned}$$

takže platí

$$\hat{K}_{2k} = (-1)^k \alpha^{2k} \hat{V}_2, \quad \hat{K}_{2k+1} = (-1)^k \alpha^{2k+1} \hat{V}_3.$$

Z BCH formule pak dostaneme

$$\begin{aligned}\hat{V}'_2 &= \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \alpha^{2k} \right) \hat{V}_2 + \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \alpha^{2k+1} \right) \hat{V}_3 \\ &= \cos \alpha \hat{V}_2 + \sin \alpha \hat{V}_3.\end{aligned}$$

Analogickým způsobem pro $i = 3$ nalezneme

$$\hat{V}'_3 = -\sin \alpha \hat{V}_2 + \cos \alpha \hat{V}_3.$$

Kapitola 3

Skládání momentů hybnosti

3.1 Skládání dvou nezávislých momentů hybnosti

V klasické mechanice je moment hybnosti složených systémů dán prostým sčítání vektorů, tj. vektorovým součtem momentů hybnosti jednotlivých složek. Pro kvantově mechanické stavy tomu tak být nemůže, neboť víme, že projekce momentu hybnosti do libovolného směru může nabývat pouze celočíselných nebo poločíselných násobků $\hbar$. Je proto užitečné zjistit jaké stavy složeného systému odpovídají těmto hodnotám. Složitost problému skládání momentů hybnosti narůstá s počtem částic, a proto se v dalším omezíme na systém složený ze dvou podsystémů, kde každý je v nějakém vlastním stavu momentu hybnosti, tj. společném vlastním stavu $\hat{J}^{(\alpha)2}$ a $\hat{J}_3^{(\alpha)}$, $\alpha = 1, 2$. Poznamenejme, že se nemusí nutně jednat o skládání momentů hybnosti dvou různých částic. Postup bude využívat pouze komutační relace složek momentu hybnosti, a lze ho tak využít i pro skládání orbitálního momentu hybnosti a spinu jedné částice.

Nechť tedy máme systém složený ze dvou rozlišitelných podsystémů, pro které byly naměřeny hodnoty momentů hybnosti odpovídající kvantovým číslům j_α, m_α . Znamená to tedy, že prvnímu lze přiřadit ket $|a_1, j_1, m_1\rangle$ a druhému $|a_2, j_2, m_2\rangle$, kde hodnoty a_1, a_2 představují hodnoty ostatních pozorovatelných kompatibilních s $\hat{J}^{(\alpha)2}$ a $\hat{J}_3^{(\alpha)}$, např. celkové energie. Zanedbáme-li závislost stavů na vlastních číslech a_1, a_2 , pak stav celého systému můžeme popsat ketem $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$, pro který platí

$$\hat{J}^{(1)2}|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (3.1)$$

$$\hat{J}^{(2)2}|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (3.2)$$

$$\hat{J}_3^{(1)}|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = m_1\hbar |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (3.3)$$

$$\hat{J}_3^{(2)}|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = m_2\hbar |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle. \quad (3.4)$$

Pro dané j_1, j_2 (a a_1, a_2) tvoří tyto stavy Hilbertův prostor $\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$ dimenze $(2j_1+1)(2j_2+1)$, který můžeme zapsat jako tenzorový součin

$$\mathcal{H}^{(j_1, j_2)} = \mathcal{H}^{(j_1)} \otimes \mathcal{H}^{(j_2)}, \quad \mathcal{H}^{(j_i)} = [\{|j_i, m_i\rangle, m_i = j_i, j_i - 1, \dots, -j_i\}]_\lambda.$$

Otázka je, jaké lze naměřit hodnoty momentu hybnosti celého systému a s jakou pravděpodobností?

Složkám celkového momentu hybnosti podle principu korespondence přiřadíme operátory $\hat{J}_k = \hat{J}_k^{(1)} + \hat{J}_k^{(2)}$, kde $\hat{J}_k^{(1)}$ působí netriviálně pouze na $\mathcal{H}^{(j_1)}$ a $\hat{J}_k^{(2)}$ působí pouze na $\mathcal{H}^{(j_2)}$. Znamená to tedy, že operátory $\hat{J}_k^{(1)}$ a $\hat{J}_j^{(2)}$ komutují. Odtud je pak snadné ukázat, že

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_l] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{J}_m, \quad (3.5)$$

a tedy operátory $\hat{J}_k$ komutují jako složky momentu hybnosti. Z toho pak plyne, že operátory $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_3$ jsou kompatibilní a jejich vlastní hodnoty musí mít tvar $j(j+1)\hbar^2$ a $m\hbar$, kde j a m jsou (polo)celá čísla, $|m| \leq j$. Zdůrazněme, že $\hat{J}^2$ nekomutuje s $\hat{J}_3^{(\alpha)}$ samostatně pro $\alpha = 1, 2$, pouze s jejich součtem $\hat{J}_3$, protože platí

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_3^{(1)}] = 2i\hbar \left(\hat{J}_1^{(1)}\hat{J}_2^{(2)} - \hat{J}_2^{(1)} - \hat{J}_1^{(2)} \right) = -[\hat{J}^2, \hat{J}_3^{(2)}].$$

Zároveň lze snadno ukázat že

$$[\hat{J}_k, \hat{J}^{(1)2}] = 0, \quad [\hat{J}_k, \hat{J}^{(2)2}] = 0, \quad (3.6)$$

takže operátory $\hat{J}^{(1)2}$, $\hat{J}^{(2)2}$, $\hat{J}^2$, $\hat{J}_3$ jsou kompatibilní a mohou (spolu s dalšími operátory) být součástí úplné množiny pozorovatelných systému dvou částic. Označme tedy $|j_1, j_2, j, m\rangle$ ket, který je vlastním stavem těchto pozorovatelných. Znamená to, že splňuje rovnice

$$\hat{J}^{(1)2}|j_1, j_2, j, m\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2 |j_1, j_2, j, m\rangle \quad (3.7)$$

$$\hat{J}^{(2)2}|j_1, j_2, j, m\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2 |j_1, j_2, j, m\rangle \quad (3.8)$$

$$\hat{J}^2|j_1, j_2, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j_1, j_2, j, m\rangle \quad (3.9)$$

$$\hat{J}_3|j_1, j_2, j, m\rangle = m\hbar |j_1, j_2, j, m\rangle. \quad (3.10)$$

Poznamenejme, že vlastní vektory celkového momentu hybnosti jsou i vlastní vektory operátoru $\hat{J}^{(1)} \cdot \hat{J}^{(2)}$. Platí totiž vztah

$$\hat{J}^{(1)} \cdot \hat{J}^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 - \hat{J}^{(1)2} - \hat{J}^{(2)2} \right), \quad (3.11)$$

odkud už snadno nalezneme

$$\hat{J}^{(1)} \cdot \hat{J}^{(2)}|j_1, j_2, j, m\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1) \right) |j_1, j_2, j, m\rangle. \quad (3.12)$$

Naším úkolem je nyní stavy $|j_1, j_2, j, m\rangle$ nalézt, přesněji, sestavit je ze stavů $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ popisujících momenty hybnosti jednotlivých částic.

V prvním kroku se přesvědčíme, že stav $|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle$ splňuje rovnice (3.7)–(3.10) pro $j = m = j_1 + j_2$. Rovnice (3.7), (3.8) se shodují s (3.1), (3.2) a rovnice (3.10) je jednoduchým důsledkem (3.1), (3.2), protože pro libovolné m_1 a m_2 platí

$$\hat{J}_3|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = (m_1 + m_2)\hbar|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle. \quad (3.13)$$

K odvození (3.9) se využije formule

$$\hat{J}^2 = (\hat{J}^{(1)} + \hat{J}^{(2)})^2 = \hat{J}^{(1)2} + \hat{J}^{(2)2} + 2\hat{J}_3^{(1)}\hat{J}_3^{(2)} + \hat{J}_+^{(1)}\hat{J}_-^{(2)} + \hat{J}_-^{(1)}\hat{J}_+^{(2)}, \quad (3.14)$$

kterou lze snadno odvodit z definice posunovacích operátorů $\hat{J}_\pm^{(\alpha)}$. S využitím vztahu $\hat{J}_+^{(\alpha)}|j_\alpha, j_\alpha\rangle = 0$ už snadno nalezneme

$$\begin{aligned} \hat{J}^2|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle &= \left(\hat{J}^{(1)2} + \hat{J}^{(2)2} + 2\hat{J}_3^{(1)}\hat{J}_3^{(2)} + \hat{J}_+^{(1)}\hat{J}_-^{(2)} + \hat{J}_-^{(1)}\hat{J}_+^{(2)} \right) |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle \\ &= \hbar^2 (j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1) + 2j_1j_2) |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle \\ &= \hbar^2 (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle. \end{aligned}$$

Znamená to tedy, že

$$|j_1, j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle. \quad (3.15)$$

Nyní můžeme použít posunovací operátory pro celkový moment hybnosti

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2 = \hat{J}_\pm^{(1)} + \hat{J}_\pm^{(2)}, \quad (3.16)$$

a snížit hodnotu m , čímž dostaneme stav

$$\begin{aligned} |j_1, j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \frac{1}{\alpha_{j_1+j_2, j_1+j_2}^-} \hat{J}_- |j_1, j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle \\ &= \frac{1}{\alpha_{j_1+j_2, j_1+j_2}^-} (\hat{J}_-^{(1)} + \hat{J}_-^{(2)}) |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle \\ &= \frac{1}{\alpha_{j_1+j_2, j_1+j_2}^-} (\alpha_{j_1, j_1}^- |j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle + \alpha_{j_2, j_2}^- |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 1\rangle). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Opakováním tohoto postupu pak z vektoru (3.15) vytvoříme $2(j_1 + j_2) + 1$ stavů

$$|j_1, j_2, j_1 + j_2, m\rangle, \quad m = j_1 + j_2, \dots, -j_1 - j_2.$$

V dalších krocích (pro $j_1, j_2 \neq 0$) je nutné vytvořit stavy $|j_1, j_2, j, m\rangle$ s $j < j_1 + j_2$. Začneme s vektorem $|j_1, j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$. Z vlastností (3.13) je zřejmé, že musí být lineární kombinací stavů $|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 1\rangle$ a $|j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle$. Ze vztahu (3.17) vidíme, že vektor $|j_1, j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$ je rovněž lineární kombinací stejných ketů. Protože kety $|j_1, j_2, j, m\rangle$ splňují rovnice (3.7)–(3.10) pro různá vlastní čísla, jsou pro různá j nebo m navzájem ortogonální. Musí tedy platit

$$\begin{aligned} |j_1, j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \frac{1}{\alpha_{j_1+j_2, j_1+j_2}^-} (\alpha_{j_2, j_2}^- |j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle - \\ &\quad - \alpha_{j_1, j_1}^- |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 1\rangle). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Přímým výpočtem lze ukázat, že tento vektor splňuje rovnice (3.7)–(3.10) pro $j = m = j_1 + j_2 - 1$. Postupnou aplikací operátoru $\hat{J}_-$ na tento stav dostaneme $2(j_1 + j_2 - 1) + 1$ stavů s $j = j_1 + j_2 - 1$, $|m| \leq j$.

Stejným postupem dostaneme stavy s $j = j_1 + j_2 - 2, j = j_1 + j_2 - 3, \dots, j_{min}$. Vektor $|j_1, j_2, j_1 + j_2 - k, j_1 + j_2 - k\rangle$ musí být lineární kombinací $k+1$ ketů $|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - k\rangle$, $|j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2 - k + 1\rangle, \dots, |j_1, j_1 - k\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle$. V tomto podprostoru již z předchozího postupu známe k vektorů celkového momentu hybnosti $|j_1, j_2, j_1 + j_2 - n, j_1 + j_2 - k\rangle$, $n = 0, 1, \dots, k-1$. Hledaný ket $|j_1, j_2, j_1 + j_2 - k, j_1 + j_2 - k\rangle$ je pak jednoznačně určený jako jejich ortogonální doplněk. Zbývá zjistit, kolik je j_{min} . Rozměr podprostoru stavů s daným j je $2j + 1$ a rozměr Hilbertova prostoru $\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$ pro dané j_1, j_2 je $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. Musí tedy platit

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = \sum_{j=j_{min}}^{j_1+j_2} (2j + 1) = (j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{min}^2, \quad (3.19)$$

z čehož plyne $j_{min} = |j_1 - j_2|$.

Na závěr této části se podívejme na úlohu skládání momentů hybnosti z hlediska teorie reprezentací. Operátory $\hat{J}_k^{(\alpha)}$ představují reprezentace Lieovy algebry $\mathfrak{su}(2)$ na prostorech $\mathcal{H}^{(j_\alpha)}$. Tyto reprezentace jsou ireducibilní, tj. operátory $\hat{J}_k^{(\alpha)}$, $k = 1, 2, 3$, nemají společný invariantní podprostor. Operátory celkového momentu hybnosti $\hat{J}_k$ tvoří opět reprezentaci $\mathfrak{su}(2)$ na $\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$. Tato reprezentace je ale reducibilní - operátory $\hat{J}_k$ mají společné vlastní podprostory, které jsou určeny hodnotou celkového momentu hybnosti, resp. kvantového čísla j . V bázi tvořené vlastními vektory celkového momentu hybnosti $|j_1, j_2, j, m\rangle$ jsou matice operátorů $\hat{J}_k$ blokově diagonální, jak se lze snadno přesvědčit přímým výpočtem s použitím posunovacích operátorů $\hat{J}_\pm$. Reducibilní reprezentaci $\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$ tak lze rozložit na direktní součet ireducibilních reprezentací

$$\mathcal{H}^{(j_1, j_2)} = \mathcal{H}^{(j_1)} \otimes \mathcal{H}^{(j_2)} = \bigoplus_{k=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \mathcal{H}^{(j=k)},$$

kde

$$\mathcal{H}^{(j=k)} = [\{|j_1, j_2, k, m\rangle, m = k, k-1, \dots, -k\}]_\lambda.$$

3.2 Clebsch-Gordanovy koeficienty

Množiny stavů

$$\{|j_1, j_2, j, m\rangle | j = |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2, m = j, \dots, -j\},$$

a

$$\{|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle | m_1 = j_1, \dots, -j_1, m_2 = j_2, \dots, -j_2\}$$

tvoří dvě ortonormální baze v prostoru $\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$. Elementy unitární matice přechodu mezi těmito dvěma bazemi se nazývají Clebschovy–Gordanovy koeficienty (CG) a značí se

$$(j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) \equiv (\langle j_1, m_1 | \otimes \langle j_2, m_2 |) | j_1, j_2, j, m \rangle.$$

Pro Condon-Shortleyovu konvenci, kdy

$$\alpha_{jm}^{\pm} = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \geq 0,$$

jsou CG reálné, tj. matice přechodu je ortogonální. Platí tedy

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} (j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle, \quad (3.20)$$

a současně

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^j (j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) |j_1, j_2, j, m\rangle. \quad (3.21)$$

Tento vztah dává CG následující fyzikální význam - pokud je systém ve stavu $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$, pak pravděpodobnost naměření hodnoty celkového momentu hybnosti s danými kvantovými čísly j a m je rovna $|(j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m)|^2$.

Pro CG platí výběrová pravidla

$$(j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) \neq 0 \Rightarrow m_1 + m_2 = m, \quad |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2, \quad (3.22)$$

a symetrie vůči záměně $j_1 \leftrightarrow j_2$, $m_1 \leftrightarrow m_2$, resp. znamének m_i a m

$$(j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) = (-1)^{j_1+j_2-j} (j_2, j_1, m_2, m_1 | j, m) \quad (3.23)$$

$$= (-1)^{j_1+j_2-j} (j_1, j_2, -m_1, -m_2 | j, -m) \quad (3.24)$$

$$= (j_2, j_1, -m_2, -m_1 | j, -m).$$

Z unitarity matice přechodu mezi ortonormálními bazemi plynou vztahy

$$\sum_{m_1, m_2} (j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) (j_1, j_2, m_1, m_2 | j', m') = \delta_{j, j'} \delta_{m, m'}, \quad (3.25)$$

$$\sum_j \sum_{m=-j}^j (j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) (j_1, j_2, m'_1, m'_2 | j, m) = \delta_{m_1, m'_1} \delta_{m_2, m'_2}.$$

Speciálně tedy platí

$$\begin{aligned} \sum_{m_1, m_2} (j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m)^2 &= 1, \\ \sum_j \sum_{m=-j}^j (j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m)^2 &= 1. \end{aligned} \quad (3.26)$$

CG pro maximální hodnoty $m_i = j_i$ a minimální hodnoty $m_i = -j_i$ jsou rovny jedné

$$(j_1, j_2, j_1, j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2) = 1, \quad (j_1, j_2, -j_1, -j_2 | j_1 + j_2, -j_1 - j_2) = 1. \quad (3.27)$$

S využitím posunovacích operátorů (3.16) nalezneme

$$\begin{aligned}\langle j_1, m_1 | \langle j_2, m_2 | \hat{J}_\pm | j_1, j_2, j, m \mp 1 \rangle &= \alpha_{j, m \mp 1}^\pm(j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) \\ &= \alpha_{j_1 m_1}^\mp(j_1, j_2, m_1 \mp 1, m_2 | j, m \mp 1) + \alpha_{j_2 m_2}^\mp(j_1, j_2, m_1, m_2 \mp 1 | j, m \mp 1).\end{aligned}$$

Explicitním vyjádřením $\alpha_{jm}^\pm$ pak dostaneme rekurentní relace pro CG

$$\begin{aligned}\sqrt{(j \mp m + 1)(j \pm m)}(j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) &= \\ &= \sqrt{(j_1 \pm m_1)(j_1 \mp m_1 + 1)}(j_1, j_2, m_1 \mp 1, m_2 | j, m \mp 1) + \\ &+ \sqrt{(j_2 \pm m_2)(j_2 \mp m_2 + 1)}(j_1, j_2, m_1, m_2 \mp 1 | j, m \mp 1),\end{aligned}\quad (3.28)$$

Tento vztah spolu s fázovou konvencí

$$(j_1, j_2, j_1, j - j_1 | j, j) > 0, \quad (3.29)$$

umožňuje jednoznačné určení CG.

3.3 Wignerovy $3j$ -symboly

Místo CG koeficientů se občas využívají Wignerovy $3j$ -symboly zavedené vztahem

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1 - j_2 - m_3}}{\sqrt{2j_3 + 1}} (j_1, j_2, m_1, m_2 | j_3, -m_3). \quad (3.30)$$

Jejich výhodou je větší symetrie při permutacích sloupců a změně znamének m_i . Při sudé permutaci sloupců se nemění, při liché permutaci se vynásobí fázovým faktorem $(-1)^{j_1 + j_2 + j_3}$, tj.

$$\begin{pmatrix} j_{\pi_1} & j_{\pi_2} & j_{\pi_3} \\ m_{\pi_1} & m_{\pi_2} & m_{\pi_3} \end{pmatrix} = \begin{cases} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}, & \text{sgn } \pi = 1, \\ (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}, & \text{sgn } \pi = -1 \end{cases}. \quad (3.31)$$

Stejný fázový faktor se objeví při změně znamének všech m_i

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

Ze symetrií Wignerových $3j$ -symbolů můžeme snadno odvodit např. vztah pro CG koeficient $(j, j, m, -m | 0, 0)$. Vyjdeme z toho, že pro $j_2 = m_2 = 0$ platí

$$(j, 0, m, 0 | j, m) = 1 \quad \forall m \in \{j, j-1, \dots, -j\}.$$

Z definice (3.30) plyne

$$\begin{pmatrix} j & 0 & j \\ m & 0 & -m \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j+m}}{\sqrt{2j+1}}.$$

Prohozením 2. a 3. sloupce pak dostaneme

$$(j, j, m, -m | 0, 0) = \begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{2j} \begin{pmatrix} j & 0 & j \\ m & 0 & -m \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{3j+m}}{\sqrt{2j+1}}. \quad (3.33)$$

Poznamenejme, že CG koeficienty $(j_1, j_2, m_1, m_2 | 0, 0)$ jsou nulové pro $j_1 \neq j_2$ nebo $m_1 \neq -m_2$, protože nejsou splněna výběrová pravidla (3.22).

3.4 Maticové reprezentace složeného momentu hybnosti, rotační matice

Uvažujme rotace $\hat{R}$ složeného systému, které jsou generovány celkovým momentem hybnosti $\hat{J} = \hat{J}^{(1)} + \hat{J}^{(2)}$, tj.

$$\hat{R} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{J}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{J}^{(1)}} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{J}^{(2)}} = \hat{R}^{(1)} \otimes \hat{R}^{(2)}.$$

Pro maticové reprezentace rotací pak s využitím (3.20) odvodíme následující CG rozklad

$$D_{m', m}^{(j)}(R) = \sum_{m_1, m'_1} \sum_{m_2, m'_2} (j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) (j_1, j_2, m'_1, m'_2 | j, m') D_{m'_1, m_1}^{(j_1)}(R) D_{m'_2, m_2}^{(j_2)}(R). \quad (3.34)$$

Analogický vztah platí i pro malé d -funkce

$$d_{m', m}^{(j)}(\beta) = \sum_{m_1, m'_1} \sum_{m_2, m'_2} (j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) (j_1, j_2, m'_1, m'_2 | j, m') d_{m'_1, m_1}^{(j_1)}(\beta) d_{m'_2, m_2}^{(j_2)}(\beta). \quad (3.35)$$

Tyto vztahy umožňují konstruovat Wignerovy D -matice rekurentně.

S použitím rozvoje (3.21) pak dostaneme inverzní vztah - součin dvou d -funkcí vyjádřený pomocí jedné d -funkce

$$d_{m'_1, m_1}^{(j_1)}(\beta) d_{m'_2, m_2}^{(j_2)}(\beta) = \sum_j \sum_{m, m'} (j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) (j_1, j_2, m'_1, m'_2 | j, m') d_{m', m}^{(j)}(\beta), \quad (3.36)$$

respektive pro velké D -funkce

$$D_{m'_1, m_1}^{(j_1)}(R) D_{m'_2, m_2}^{(j_2)}(R) = \sum_j \sum_{m, m'} (j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) (j_1, j_2, m'_1, m'_2 | j, m') D_{m', m}^{(j)}(R). \quad (3.37)$$

Díky vztahu mezi kulovými funkcemi a D -funkcemi (2.13) pak můžeme odvodit vzorec pro integrál součinu 3 kulových funkcí (viz Cvičení 16)

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \bar{Y}_{l,m}(\theta, \varphi) Y_{l_1, m_1}(\theta, \varphi) Y_{l_2, m_2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} (l_1, l_2, 0, 0 | l, 0) \times (l_1, l_2, m_1, m_2 | l, m). \quad (3.38)$$

3.5 Příklady

Cvičení 11. Uvažujte dvě částice se spinem $\frac{1}{2}$. Najděte bazické stavy odpovídající celkovému momentu hybnosti a určete nenulové CG.

Návod: Bazickým stavům jednotlivých spinů odpovídají kety $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$. Stavy celkového momentu hybnosti $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, j, m\rangle$, kde j může nabývat hodnot $j = 1$ (a pak $m = 1, 0, -1$) nebo $j = 0$ (a pak $m = 0$), najdeme přímým výpočtem použitím posunovacích operátorů. Kety odpovídající hodnotě $j = 1$ a $m = 1, -1$ jsou rovny

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \quad |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, -1\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle.$$

Stav s $j = 1$ a $m = 0$ dostaneme aplikací posunovacího operátoru $\hat{J}_- = \hat{J}_-^{(1)} + \hat{J}_-^{(2)}$ na stav $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1\rangle$, tj.

$$\begin{aligned} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0\rangle &= \frac{1}{\alpha_{1,1}^-} \hat{J}_- |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1\rangle = \frac{1}{\alpha_{1,1}^-} \left(\hat{J}_-^{(1)} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes \hat{J}_-^{(2)} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right). \end{aligned}$$

Zbývajících vektorů s $j = m = 0$ leží ve stejném dvourozměrném podprostoru (který odpovídá $m = 0$) jako $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0\rangle$ a je na něj ortogonální, takže (díky fázové konvenci (3.29))

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right). \quad (3.39)$$

Trojice stavů $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m\rangle$, $m = 1, 0, -1$, tvoří tzv. *tripletní podprostor*, k němu ortogonální stav $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle$ se označuje jako *singlet*. Nenulové CG tedy jsou

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 1, 1 \right) &= 1, & \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 1, -1 \right) &= 1, \\ \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 1, 0 \right) &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 1, 0 \right) &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}, & \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right) &= \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

Cvičení 12. Určete tzv. hyperjemnou strukturu základního stavu atomu vodíku, která je důsledkem interakce spinu elektronu a protonu. Hamiltonián popisující interakci spinů má tvar

$$\hat{H} = E_1 \mathbb{I} + \tilde{A} \hat{S}^{(e)} \cdot \hat{S}^{(p)},$$

kde $E_1 = -13,6$ eV je energie základní hladiny, $\tilde{A}$ je zatím neurčená konstanta a $\hat{S}^{(e,p)}$ jsou operátory spinu elektronu a protonu.

Návod: Spektrum hamiltoniánu lze snadno určit přímým výpočtem. Označíme-li $A = \frac{\hbar^2}{4} \tilde{A}$, pak matice hamiltoniánu je

$$H = E_1 \mathbb{I} + A \sigma_i \otimes \sigma_i = \begin{pmatrix} E_1 + A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 - A & 2A & 0 \\ 0 & 2A & E_1 - A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_1 + A \end{pmatrix}.$$

Její vlastní čísla jsou rovna

$$E_{1,1} = E_1 + A, \quad E_{1,0} = E_1 - 3A, \quad (3.40)$$

přičemž hodnota $E_{1,1}$ je trojnásobně degenerovaná. Tento výsledek můžeme obdržet s využitím teorie skládání momentů hybnosti, konkrétně vztahu (3.12). V našem případě je $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$, takže platí

$$\begin{aligned} \hat{S}^{(e)} \cdot \hat{S}^{(p)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m \right\rangle &= \frac{\hbar^2}{4} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m \right\rangle, \quad m = 1, 0, -1, \\ \hat{S}^{(e)} \cdot \hat{S}^{(p)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle &= -\frac{3}{4} \hbar^2 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle. \end{aligned}$$

Vlastní čísla hamiltoniánu jsou tedy skutečně (3.40), přičemž kety $\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m \right\rangle$, $m = 1, 0, -1$, odpovídají hodnotě $E_{1,1}$ a ket $\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle$ přísluší hodnotě $E_{1,0}$. Vidíme, že při započtení interakce spinů elektronu a protonu se základní energie rozdělí na dvě hladiny podle velikosti celkového spinu atomu vodíků, resp. kvantového čísla j . Z měření spektra vodíku je možné určit hodnotu konstanty A . Přeskoku mezi dvěma hladinami hyperjemné struktury odpovídá mikrovlnné záření o frekvenci $\nu \approx 1420$ MHz ($\lambda \approx 21$ cm), tj. $\Delta E = E_{1,1} - E_{1,0} = 4A = h\nu \approx 5,9 \mu\text{eV}$.

Cvičení 13. Celkový moment hybnosti elektronu je dán součtem jeho orbitálního momentu hybnosti a spinu

$$\hat{J}_k = \hat{L}_k + \hat{S}_k.$$

Najděte bazické stavy odpovídající celkovému momentu hybnosti $|l, \frac{1}{2}, l \pm \frac{1}{2}, m\rangle$ a určete nenulové CG. Čemu je rovno $(\hat{S} \cdot \hat{L}) |l, \frac{1}{2}, l \pm \frac{1}{2}, m\rangle$? Napište explicitní tvar všech stavů pro $l = 1$.

Návod: V tomto případě jde o skládání momentů hybnosti s $j_1 = l \in \mathbb{Z}_+$ a $j_2 = \frac{1}{2}$. Příklad $l = 0$ je triviální, protože $\mathcal{H}^{(0)}$ má dimenzi jedna. Vlastní vektory celkového momentu hybnosti jsou v tomto případě

$$|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |0, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \quad |0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |0, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle. \quad (3.41)$$

Pro $l \geq 1$ má Hilbertův prostor

$$\mathcal{H}^{(l, \frac{1}{2})} = \mathcal{H}^{(l)} \otimes \mathcal{H}^{(\frac{1}{2})},$$

dimenzi $2(2l + 1)$ a můžeme ho rozdělit na direktní součet dvou podprostorů lišících se velikostí celkového momentu hybnosti, resp. kvantového čísla $j = l \pm \frac{1}{2}$

$$\mathcal{H}^{(l, \frac{1}{2})} = \mathcal{H}^{(j=l+\frac{1}{2})} \oplus \mathcal{H}^{(j=l-\frac{1}{2})}.$$

Ortonormální báze v těchto podprostorech tvoří vlastní vektory celkového momentu hybnosti $|l, \frac{1}{2}, l \pm \frac{1}{2}, m\rangle$, které rozepíšeme do bází orbitálního momentu hybnosti a spinu způsobem (3.20). Začneme s případem $j = l + \frac{1}{2}$, kdy díky výběrovým pravidlům (3.22) platí

$$\begin{aligned} |l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, m\rangle &= \left(l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m\right) |l, m + \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \\ &+ \left(l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m\right) |l, m - \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned}$$

CG určíme pomocí rekurentního vztahu (3.28). Dosazením $j = l + \frac{1}{2}$, $j_1 = l$, $j_2 = \frac{1}{2}$, $m_1 = m + \frac{1}{2}$ a $m_2 = -\frac{1}{2}$ do (3.28) s horním znaménkem dostaneme

$$\left(l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m\right) = \sqrt{\frac{l - m + \frac{1}{2}}{l - m + \frac{3}{2}}} \left(l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m - 1\right).$$

Analogicky můžeme vyjádřit CG na pravé straně

$$\left(l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m\right) = \sqrt{\frac{l - m + \frac{1}{2}}{l - m + \frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{l - m + \frac{3}{2}}{l - m + \frac{5}{2}}} \left(l, \frac{1}{2}, m - \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m - 2\right),$$

a postupně snižovat hodnotu m až k nejnižší možné hodnotě $-l - \frac{1}{2}$, kde dostaneme

$$\left(l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m\right) = \sqrt{\frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left(l, \frac{1}{2}, -l, -\frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, -l - \frac{1}{2}\right).$$

Kvůli (3.27) je CG na pravé straně je roven 1, takže platí

$$\left(l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m\right) = \sqrt{\frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}. \quad (3.42)$$

Koeficient $\left(l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m\right)$ získáme analogicky použitím vztahu (3.28) s dolním znaménkem, kam dosadíme $j = l + \frac{1}{2}$, $j_1 = l$, $j_2 = \frac{1}{2}$, $m_1 = m - \frac{1}{2}$ a $m_2 = \frac{1}{2}$. Dostaneme rekurentní relaci

$$\left(l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m\right) = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}} \left(l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m + 1\right),$$

a postupným zvyšováním m na pravé straně až k maximální možné hodnotě $l + \frac{1}{2}$ dostaneme s využitím (3.27) výsledek

$$\left(l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m\right) = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}. \quad (3.43)$$

V případě $j = l - \frac{1}{2}$ díky výběrovým pravidlům (3.22) platí

$$\begin{aligned} |l, \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, m\rangle &= \left(l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, m\right) |l, m + \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \\ &+ \left(l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, m\right) |l, m - \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned}$$

CG na pravé straně spočítáme podobným postupem jako v případě $j = l + \frac{1}{2}$. Volbou $j = l - \frac{1}{2}$, $j_1 = l$, $j_2 = \frac{1}{2}$, $m_1 = m + \frac{1}{2}$ a $m_2 = -\frac{1}{2}$ ve vztahu (3.28) s horním znaménkem dostaneme

$$\begin{aligned} \left(l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, m\right) &= \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m-\frac{1}{2}}} \left(l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, m - 1\right) \\ &= \sqrt{l+m+\frac{1}{2}} \left(l, \frac{1}{2}, -l+1, -\frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, -l + \frac{1}{2}\right). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Analogicky, volbou $j = l - \frac{1}{2}$, $j_1 = l$, $j_2 = \frac{1}{2}$, $m_1 = m - \frac{1}{2}$ a $m_2 = \frac{1}{2}$ ve vztahu (3.28) s dolním znaménkem dostaneme

$$\begin{aligned} \left(l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, m\right) &= \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{l-m-\frac{1}{2}}} \left(l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, m + 1\right) \\ &= \sqrt{l-m+\frac{1}{2}} \left(l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}\right). \end{aligned} \quad (3.45)$$

CG na pravých stranách (3.44) a (3.45) nejsou rovny jedné. Jejich velikost určíme pomocí

vztahu (3.26) a již známých hodnot (3.42) a (3.43)

$$\begin{aligned}
1 &= \sum_j \sum_{m=-j}^j \left(l, \frac{1}{2}, -l+1, -\frac{1}{2} \middle| j, m \right)^2 \\
&= \left(l, \frac{1}{2}, -l+1, -\frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, -l + \frac{1}{2} \right)^2 + \left(l, \frac{1}{2}, -l+1, -\frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, -l + \frac{1}{2} \right)^2 \\
&= \left(l, \frac{1}{2}, -l+1, -\frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, -l + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2l}{2l+1},
\end{aligned}$$

respektive

$$\begin{aligned}
1 &= \sum_j \sum_{m=-j}^j \left(l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2} \middle| j, m \right)^2 \\
&= \left(l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right)^2 + \left(l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right)^2 \\
&= \left(l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{2l}{2l+1}.
\end{aligned}$$

Pro velikost hledaných CG tedy dostaneme

$$\left(l, \frac{1}{2}, -l+1, -\frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, -l + \frac{1}{2} \right)^2 = \left(l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right)^2 = \frac{1}{2l+1}.$$

Fáze je určena konvencí (3.29) a symetriemi (3.23), (3.24)

$$\begin{aligned}
\left(l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right) &= - \left(\frac{1}{2}, l, \frac{1}{2}, l-1 \middle| l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right) < 0, \\
\left(l, \frac{1}{2}, -l+1, -\frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, -l + \frac{1}{2} \right) &= - \left(l, \frac{1}{2}, l-1, \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right) > 0.
\end{aligned}$$

Dosazením do (3.44) a (3.45) dostaneme

$$\left(l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, m \right) = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}, \quad (3.46)$$

$$\left(l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, m \right) = -\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \quad (3.47)$$

Vlastní vektory celkového momentu hybnosti pak díky výsledkům (3.42), (3.43), (3.46) a (3.47) můžeme zapsat ve tvaru

$$|l, \frac{1}{2}, l \pm \frac{1}{2}, m\rangle = \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} |l, m + \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} |l, m - \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \quad (3.48)$$

Kromě toho, že se jedná o vlastní vektory $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$, $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_3$, jsou to i vlastní vektory operátoru $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$. Ze vztahu (3.12) plyne

$$\begin{aligned} (\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}) |l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, m\rangle &= \frac{1}{2} \hbar^2 |l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, m\rangle, \\ (\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}) |l, \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, m\rangle &= -\frac{1}{2} (l+1) \hbar^2 |l, \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, m\rangle \end{aligned}$$

Operátor $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$ hraje roli u tzv. *spin-orbitální vazby*, která ovlivňuje jemnou strukturu energetických hladin vodíku (viz. kapitola (5)).

Pro $l = 1$ může být $j = \frac{3}{2}$ nebo $j = \frac{1}{2}$. Explicitní tvar stavů s $j = \frac{3}{2}$ je následující

$$\begin{aligned} |1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle &= |1, 1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ |1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ |1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, -1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ |1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle &= |1, -1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Stavy s $j = \frac{1}{2}$ mají tvar

$$\begin{aligned} |1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ |1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |1, -1\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Cvičení 14. Uvažujte tři rozlišitelné částice se spinem $\frac{1}{2}$. Označme součet prvních dvou spinů jako

$$\hat{\vec{S}}^{(12)} = \hat{\vec{S}}^{(1)} + \hat{\vec{S}}^{(2)},$$

a celkový spin jako

$$\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}^{(1)} + \hat{\vec{S}}^{(2)} + \hat{\vec{S}}^{(3)} = \hat{\vec{S}}^{(12)} + \hat{\vec{S}}^{(3)}.$$

Najděte stavy, které jsou společné vlastní vektory $\hat{S}^{(12)2}$, $\hat{S}^2$ a $\hat{S}_3$. Uvažujte hamiltonián částic ve tvaru

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon}{\hbar^2} \left(\hat{\vec{S}}^{(1)} + \hat{\vec{S}}^{(2)} \right) \cdot \hat{\vec{S}}^{(3)}. \quad (3.51)$$

Jaké jsou hodnoty energie a jejich degenerace?

Návod: Pro zjednodušení zápisu označme společné vlastní vektory $\hat{S}^{(12)2}$, $\hat{S}^2$ a $\hat{S}_3$ jako $|j_{12}, j, m\rangle$, stavy jednotlivých spinů označíme jako $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle \equiv |\pm\rangle$. Nejprve složíme první

dva spiny, výsledek odpovídá cvičení 11. Tyto stavy pak složíme se zbývajícím spinem - to odpovídá cvičení 13 pro $j_{12} = l = 0, 1$ - tj. stavům (3.41), (3.49) a (3.50).

V případě $j = \frac{3}{2}$ musí být $j_{12} = 1$. Použijeme tedy vektory (3.49), ve kterých tripletní stavy $|1, m\rangle$ rozepíšeme podle výsledků cvičení 11. Dostaneme celkem 4 stavy

$$\begin{aligned}
|1, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle &= |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \equiv |+++\rangle, \\
|1, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \\
&\quad + \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right) \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\
&\equiv \frac{1}{\sqrt{3}} (|++-\rangle + |+-+\rangle + |-++\rangle), \\
|1, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right) \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{3}} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\
&\equiv \frac{1}{\sqrt{3}} (|+--\rangle + |-+-\rangle + |--+\rangle), \\
|1, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle &= |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \equiv |---\rangle.
\end{aligned} \tag{3.52}$$

Celkový spin $j = \frac{1}{2}$ můžeme získat složením $j_{12} = 0$ a spinu $-\frac{1}{2}$, tj. využijeme vztahy (3.41) kam za $|0, 0\rangle$ dosadíme singlet (3.39). Dostaneme dva stavy

$$\begin{aligned}
|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right) \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\
&\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-+\rangle - |-++\rangle), \\
|0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right) \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\
&\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|+--\rangle - |-+-\rangle).
\end{aligned} \tag{3.53}$$

Druhou možností jak získat $j = \frac{1}{2}$ je složením $j_{12} = 1$ a spinu $-\frac{1}{2}$. Využijeme výsledek (3.50) kam opět za tripletní stavy $|1, m\rangle$ dosadíme podle výsledků cvičení 11. Postupně nalezneme

zbývající 2 bazické stavy

$$\begin{aligned}
|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \otimes | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \otimes | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle - \\
&\quad - \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \otimes | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle + | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \otimes | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \right) \otimes | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \\
&\equiv \sqrt{\frac{2}{3}} | ++- \rangle - \frac{1}{\sqrt{6}} (| +-+ \rangle + | -++ \rangle), \\
|1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \otimes | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle + | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \otimes | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \right) \otimes | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle - \\
&\quad - \sqrt{\frac{2}{3}} | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \otimes | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \otimes | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \\
&\equiv \frac{1}{\sqrt{6}} (| +-- \rangle + | -+- \rangle) - \sqrt{\frac{2}{3}} | --+ \rangle.
\end{aligned} \tag{3.54}$$

Snadno ověříme, že kety $|j_{12}, j, m\rangle$ jsou vlastní vektory hamiltoniánu (3.51), protože ho můžeme přepsat způsobem

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon}{\hbar^2} \hat{S}^{(12)} \cdot \hat{S}^{(3)} = \frac{\varepsilon}{2\hbar^2} \left(\hat{S}^2 - \hat{S}^{(12)^2} - \hat{S}^{(3)^2} \right).$$

Odsud vidíme, že platí rovnost

$$\hat{H}|j_{12}, j, m\rangle = \frac{\varepsilon}{2} \left(j(j+1) - j_{12}(j_{12}+1) - \frac{3}{4} \right) |j_{12}, j, m\rangle \equiv E_{j_{12}, j} |j_{12}, j, m\rangle.$$

Hamiltonián má tedy 3 možné hodnoty energie

$$E_{1, \frac{3}{2}} = \frac{\varepsilon}{2}, \quad E_{0, \frac{1}{2}} = 0, \quad E_{1, \frac{1}{2}} = -\varepsilon.$$

První má degeneraci 4, ostatní 2.

Cvičení 15. Určete Wignerovu d -matici pro $j = \frac{3}{2}$.

Návod: Využijeme CG rozkladu (3.35) pro $j_1 = 1$, $j_2 = \frac{1}{2}$ a $j = \frac{3}{2}$

$$d_{m', m}^{(\frac{3}{2})}(\beta) = \sum_{m_1, m'_1} \sum_{m_2, m'_2} \left(1, \frac{1}{2}, m_1, m_2 \left| \frac{3}{2}, m \right. \right) \left(1, \frac{1}{2}, m'_1, m'_2 \left| \frac{3}{2}, m' \right. \right) d_{m'_1, m_1}^{(1)}(\beta) d_{m'_2, m_2}^{(\frac{1}{2})}(\beta).$$

a znalosti d -matic pro $j = \frac{1}{2}$ (2.22) a $j = 1$ (2.24)

$$d^{(\frac{1}{2})}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}, \quad d^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\beta}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \sin^2 \frac{\beta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \sin^2 \frac{\beta}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos^2 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix},$$

spočítaných v příkladu (10) (u $d^{(1)}$ jsme rohové koeficienty vyjádřili pomocí vztahů pro sinus a cosinus polovičního úhlu). CG koeficienty jsme určili v příkladě 13 - vztahy (3.42), (3.43), (3.46) a (3.47) pro $l = 1$, resp. koeficienty ketů ve vzorcích (3.49) a (3.50). Přímým výpočtem stačí určit 6 maticových elementů $d_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})}$, $d_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}$, $d_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}$, $d_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})}$, $d_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}$ a $d_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}$. Ostatní odvodíme pomocí vztahů (2.12). Postupně nalezneme

$$\begin{aligned} d_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= \left(1, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) \times d_{1,1}^{(1)} \times d_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} \\ &= 1 \times 1 \times \cos^2 \frac{\beta}{2} \times \cos \frac{\beta}{2} \\ &= \cos^3 \frac{\beta}{2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= \left(1, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times d_{1,0}^{(1)} \times d_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} + \\ &\quad + \left(1, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times d_{1,1}^{(1)} \times d_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} \\ &= 1 \times \sqrt{\frac{2}{3}} \times \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta\right) \times \cos \frac{\beta}{2} + 1 \times \frac{1}{\sqrt{3}} \times \cos^2 \frac{\beta}{2} \times \left(-\sin \frac{\beta}{2}\right) \\ &= -\sqrt{3} \sin \frac{\beta}{2} \cos^2 \frac{\beta}{2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= \left(1, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) \times d_{1,-1}^{(1)} \times d_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} + \\ &\quad + \left(1, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) \times d_{1,0}^{(1)} \times d_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} \\ &= 1 \times \frac{1}{\sqrt{3}} \times \sin^2 \frac{\beta}{2} \times \cos \frac{\beta}{2} + 1 \times \sqrt{\frac{2}{3}} \times \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta\right) \times \left(-\sin \frac{\beta}{2}\right) \\ &= \sqrt{3} \sin^2 \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= \left(1, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right) \times d_{1,-1}^{(1)} \times d_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} \\ &= 1 \times 1 \times \sin^2 \frac{\beta}{2} \times \left(-\sin \frac{\beta}{2}\right) \\ &= -\sin^3 \frac{\beta}{2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= \left(1, \frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times d_{1,1}^{(1)} \times d_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} + \\
&+ \left(1, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times d_{0,1}^{(1)} \times d_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} + \\
&+ \left(1, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times d_{0,0}^{(1)} \times d_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} + \\
&+ \left(1, \frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times d_{1,0}^{(1)} \times d_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} \\
&= \frac{1}{\sqrt{3}} \times \frac{1}{\sqrt{3}} \times \cos^2 \frac{\beta}{2} \times \cos \frac{\beta}{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \times \frac{1}{\sqrt{3}} \times \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \times \left(-\sin \frac{\beta}{2}\right) + \\
&+ \sqrt{\frac{2}{3}} \times \sqrt{\frac{2}{3}} \times \cos \beta \times \cos \frac{\beta}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}} \times \sqrt{\frac{2}{3}} \times \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta\right) \times \sin \frac{\beta}{2} + \\
&= \frac{1}{2} (3 \cos \beta - 1) \cos \frac{\beta}{2},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= \left(1, \frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) \times d_{1,-1}^{(1)} \times d_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} + \\
&+ \left(1, \frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) \times d_{1,0}^{(1)} \times d_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} + \\
&+ \left(1, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) \times d_{0,-1}^{(1)} \times d_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} + \\
&+ \left(1, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \times \left(1, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) \times d_{0,0}^{(1)} \times d_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2})} \\
&= \frac{1}{\sqrt{3}} \times \frac{1}{\sqrt{3}} \times \sin^2 \frac{\beta}{2} \times \sin \frac{\beta}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}} \times \sqrt{\frac{2}{3}} \times \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta\right) \times \cos \frac{\beta}{2} + \\
&+ \sqrt{\frac{2}{3}} \times \frac{1}{\sqrt{3}} \times \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta\right) \times \cos \frac{\beta}{2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \times \sqrt{\frac{2}{3}} \times \cos \beta \times \left(-\sin \frac{\beta}{2}\right) + \\
&= -\frac{1}{2} (3 \cos \beta + 1) \sin \frac{\beta}{2}.
\end{aligned}$$

Zbývající maticové elementy určíme pomocí (2.12). Díky relaci $d_{m',m}^{(j)} = (-1)^{m'-m} d_{-m',-m}^{(j)}$ nalezneme

$$\begin{aligned}
d_{-\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= d_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})}, & d_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= d_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}, & d_{-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= -d_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}, \\
d_{-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= d_{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}, & d_{-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= -d_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})}, & d_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= -d_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}.
\end{aligned}$$

Analogicky pomocí vztahu $d_{m',m}^{(j)} = (-1)^{m'-m} d_{m,m'}^{(j)}$ odvodíme

$$\begin{aligned} d_{\frac{1}{2},\frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= -d_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}, & d_{-\frac{1}{2},\frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= d_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}, \\ d_{\frac{1}{2},-\frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= d_{-\frac{3}{2},\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}, & d_{-\frac{1}{2},-\frac{3}{2}}^{(\frac{3}{2})} &= -d_{-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}^{(\frac{3}{2})}. \end{aligned}$$

Celkem můžeme d -matici pro $j = \frac{3}{2}$ zapsat ve tvaru

$$d^{(\frac{3}{2})}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos^3 \frac{\beta}{2} & -\sqrt{3} \sin \frac{\beta}{2} \cos^2 \frac{\beta}{2} & \sqrt{3} \sin^2 \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin^3 \frac{\beta}{2} \\ \sqrt{3} \sin \frac{\beta}{2} \cos^2 \frac{\beta}{2} & \frac{1}{2} (3 \cos \beta - 1) \cos \frac{\beta}{2} & -\frac{1}{2} (3 \cos \beta + 1) \sin \frac{\beta}{2} & \sqrt{3} \sin^2 \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} \\ \sqrt{3} \sin^2 \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} & \frac{1}{2} (3 \cos \beta + 1) \sin \frac{\beta}{2} & \frac{1}{2} (3 \cos \beta - 1) \cos \frac{\beta}{2} & -\sqrt{3} \sin \frac{\beta}{2} \cos^2 \frac{\beta}{2} \\ \sin^3 \frac{\beta}{2} & \sqrt{3} \sin^2 \frac{\beta}{2} \cos \frac{\beta}{2} & \sqrt{3} \sin \frac{\beta}{2} \cos^2 \frac{\beta}{2} & \cos^3 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}.$$

Cvičení 16. Ukažte, že pro integrál součinu tří kulových funkcí platí vztah

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \bar{Y}_{l,m}(\theta, \varphi) Y_{l_1,m_1}(\theta, \varphi) Y_{l_2,m_2}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} (l_1, l_2, 0, 0 | l, 0) \\ &\times (l_1, l_2, m_1, m_2 | l, m). \end{aligned} \quad (3.55)$$

Návod: Využijeme vztahu mezi kulovými funkcemi a D -funkcemi (2.13)

$$D_{m,0}^{(l)}(\varphi, \theta, \gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \bar{Y}_{l,m}(\theta, \varphi),$$

a vztahu (3.37) pro $j_1 = l_1$, $j_2 = l_2$, $j = l_3$, $m = m_3$, $m' = m'_3$ a $m_1 = m_2 = 0$ (suma přes m_3 zmizí díky výběrovému pravidlu $m_1 + m_2 = m_3 = 0$)

$$D_{m'_1,0}^{(l_1)}(\varphi, \theta, \gamma) D_{m'_2,0}^{(l_2)}(\varphi, \theta, \gamma) = \sum_{l_3} \sum_{m'_3} (l_1, l_2, 0, 0 | l_3, 0) (l_1, l_2, m'_1, m'_2 | l_3, m'_3) D_{m'_3,0}^{(l_3)}(\varphi, \theta, \gamma).$$

Nahrazením D -funkcí kulovými funkcemi, přeznačením $m'_i \rightarrow m_i$ a odstraněním komplexního združení dostaneme

$$\begin{aligned} Y_{l_1,m_1}(\theta, \varphi) Y_{l_2,m_2}(\theta, \varphi) &= \sum_{l_3,m_3} \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l_3+1)}} (l_1, l_2, 0, 0 | l_3, 0) (l_1, l_2, m_1, m_2 | l_3, m_3) \\ &\times Y_{l_3,m_3}(\theta, \varphi). \end{aligned}$$

Vynásobením obou stran $\bar{Y}_{l,m}(\theta, \varphi)$ a integrací přes prostorové úhly dostaneme s využitím ortogonality kulových funkcí hledaný vztah.

Kapitola 4

Ireducibilní tenzorové operátory, Wigner-Eckartův teorém

4.1 Ireducibilní tenzorové operátory

Ireducibilní tenzorový operátor $\hat{T}^{(k)}$ (ITO, často používaný název je také sférický tenzor) řádu k je sada $2k+1$ operátorů $\hat{T}(k, q)$, $q = k, k-1, \dots, -k$, které splňují komutační relace

$$\begin{aligned} [\hat{J}_3, \hat{T}(k, q)] &= \hbar q \hat{T}(k, q), \\ [\hat{J}_{\pm}, \hat{T}(k, q)] &= \alpha_{k,q}^{\pm} \hat{T}(k, q \pm 1). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Místo komutačních relací s posunovacími operátory můžeme ITO definovat podle komutace se složkami momentu hybnosti

$$[\hat{J}_i, \hat{T}(k, q)] = \sum_{q'=-k}^k \left(\mathbb{J}_i^{(k)} \right)_{q',q} \hat{T}(k, q'), \quad (4.2)$$

kde $\mathbb{J}_i^{(k)}$ jsou matice momentu hybnosti velikosti k , viz. (2.8). Důvod pro název *ireducibilní* tenzor je, že při rotacích se ITO transformují podle Wignerových D-matic, které tvoří ireducibilní reprezentace Lieovy grupy $SO(3)$. Platí tedy vztah

$$\hat{T}'(k, q) = \hat{R} \hat{T}(k, q) \hat{R}^\dagger = \sum_{q'=-k}^k D_{q',q}^{(k)} \hat{T}(k, q').$$

ITO se tedy při rotacích transformují stejně jako kety $|j, m\rangle$, viz (2.15).

Skalární operátory jsou současně ITO 0. řádu. Ze složek kartézského vektoru $\hat{V} = (\hat{V}_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3)^T$ lze vytvořit ITO 1. řádu $\hat{V}^{(1)}$ se složkami

$$\hat{V}(1, 1) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 + i\hat{V}_2), \quad \hat{V}(1, 0) = \hat{V}_3, \quad \hat{V}(1, -1) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 - i\hat{V}_2), \quad (4.3)$$

viz. Cvičení 17. Jako argument pro tento tvar lze použít i následující. ITO 1. řádu se při rotacích transformuje pomocí $D^{(1)}$ matic, které jsou generovány maticemi momentu hybnosti pro $j = 1$

$$\mathbb{J}_1^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbb{J}_2^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbb{J}_3^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Naproti tomu kartézský vektorový operátor se transformuje přímo pomocí $SO(3)$ matic (2.17), které jsou generovány maticemi M_i (2.1). Přejít od kartézského vektoru ke sférickému tak odpovídá změně báze, která převede matice M_i na matice $\mathbb{J}_i^{(1)}$. Matice přechodu je tvořena vlastními vektory M_3

$$\mu_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mu_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mu_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Označíme-li matici přechodu

$$P = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

pak lze snadno vidět, že platí

$$\mathbb{J}_k^{(1)} = \hbar P^\dagger M_k P.$$

Složky sférického tenzoru 1. řádu pak dostaneme pomocí matice přechodu

$$\mathbb{V}^{(1)} = (\hat{V}_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3)P = \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{V}_1 + i\hat{V}_2), \hat{V}_3, \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{V}_1 - i\hat{V}_2) \right).$$

Libovolný kartézský tenzor 2. řádu můžeme rozepsat jako součet tří členů

$$\begin{aligned} \hat{T}_{ij} &= \hat{D}_{ij} + \hat{A}_{ij} + \hat{S}_{ij}, \\ \hat{D}_{ij} &= \frac{1}{3} \text{Tr } \hat{T} \delta_{ij} = \frac{1}{3} (\hat{T}_{11} + \hat{T}_{22} + \hat{T}_{33}) \delta_{ij}, \\ \hat{A}_{ij} &= \frac{1}{2} (\hat{T}_{ij} - \hat{T}_{ji}), \\ \hat{S}_{ij} &= \frac{1}{2} (\hat{T}_{ij} + \hat{T}_{ji}) - \hat{D}_{ij}, \end{aligned} \tag{4.4}$$

kde $\hat{D}_{ij}$ je násobek jednotkového tenzoru, $\hat{A}_{ij}$ je antisymetrický tenzor a $\hat{S}_{ij}$ je symetrický tenzor s nulovou stopou. Z těchto tenzorů lze sestavit ITO 0., resp. 1., resp. 2. řádu. Připomeňme, že kartézský tenzor splňuje komutační relace s momentem hybnosti (2.20). $\hat{D}_{ij}$ je násobek jednotkového tenzoru a je to tedy skalár, tj. ITO 0. řádu

$$\hat{\mathbb{T}}^{(0)} = \hat{T}(0, 0) = \frac{1}{3} \text{Tr } \hat{T}. \tag{4.5}$$

$\hat{A}_{ij}$ je antisymetrický tenzor, má jen tři nezávislé složky

$$\begin{aligned}\hat{A}_{23} &= \frac{1}{2}(\hat{T}_{23} - \hat{T}_{32}) \equiv \hat{V}_1, \\ \hat{A}_{31} &= \frac{1}{2}(\hat{T}_{31} - \hat{T}_{13}) \equiv \hat{V}_2, \\ \hat{A}_{12} &= \frac{1}{2}(\hat{T}_{12} - \hat{T}_{21}) \equiv \hat{V}_3.\end{aligned}$$

Pomocí komutačních relací (2.20) lze odvodit, že $\hat{V}_i$ jsou složky vektorového operátoru, tj. platí

$$[\hat{J}_k, \hat{V}_i] = i\hbar\epsilon_{kil}\hat{V}_l.$$

Z nich už umíme sestavit ITO 1. řádu $\hat{T}^{(1)}$ podle převodních vztahů (4.3)

$$\begin{aligned}\hat{T}(1,1) &= -\frac{1}{2\sqrt{2}}(\hat{T}_{23} - \hat{T}_{32} + i\hat{T}_{31} - i\hat{T}_{13}), \\ \hat{T}(1,0) &= \frac{1}{2}(\hat{T}_{12} - \hat{T}_{21}), \\ \hat{T}(1,-1) &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(\hat{T}_{23} - \hat{T}_{32} - i\hat{T}_{31} + i\hat{T}_{13}).\end{aligned}\tag{4.6}$$

Podobně lze sestavit ITO 2. řádu $\hat{T}^{(2)}$ z pěti nezávislých složek symetrického tenzoru $\hat{S}_{ij}$ následujícím způsobem

$$\begin{aligned}\hat{T}(2,2) &= \frac{1}{\sqrt{6}}(\hat{S}_{11} - \hat{S}_{22} + 2i\hat{S}_{12}) = \frac{1}{\sqrt{6}}(\hat{T}_{11} - \hat{T}_{22} + i\hat{T}_{12} + i\hat{T}_{21}), \\ \hat{T}(2,1) &= -\sqrt{\frac{2}{3}}(\hat{S}_{31} + i\hat{S}_{32}) = -\frac{1}{\sqrt{6}}(\hat{T}_{31} + \hat{T}_{13} + i\hat{T}_{32} + i\hat{T}_{23}), \\ \hat{T}(2,0) &= \hat{S}_{33} = \hat{T}_{33} - \frac{1}{3}\text{Tr } \hat{T}, \\ \hat{T}(2,-1) &= \sqrt{\frac{2}{3}}(\hat{S}_{31} - i\hat{S}_{32}) = \frac{1}{\sqrt{6}}(\hat{T}_{31} + \hat{T}_{13} - i\hat{T}_{32} - i\hat{T}_{23}), \\ \hat{T}(2,-2) &= \frac{1}{\sqrt{6}}(\hat{S}_{11} - \hat{S}_{22} - 2i\hat{S}_{12}) = \frac{1}{\sqrt{6}}(\hat{T}_{11} - \hat{T}_{22} - i\hat{T}_{12} - i\hat{T}_{21}).\end{aligned}\tag{4.7}$$

4.2 Wigner-Eckartův teorém

Transformační vlastnosti ITO při rotacích zjednodušují výpočet maticových elementů

$$\langle a, j_1, m_1 | \hat{T}(k, q) | b, j_2, m_2 \rangle,\tag{4.8}$$

kde a , b představují sady kvantových čísel (může jich být i více, tj. $a = (a_1, \dots, a_n)$, $b = (b_1, \dots, b_n)$) pozorovatelných kompatibilních s momentem hybnosti. Z komutačních

relací (4.2) totiž plyne

$$\hat{J}_i \hat{T}(k, q) |b, j_2, m_2\rangle = \left(\left[\hat{J}_i, \hat{T}(k, q) \right] + \hat{T}(k, q) \hat{J}_i \right) |b, j_2, m_2\rangle \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{q'=-k}^k \left(\mathbb{J}_i^{(k)} \right)_{q', q} \hat{T}(k, q') |b, j_2, m_2\rangle + \\ &+ \sum_{m'_2=-j_2}^{j_2} \left(\mathbb{J}_i^{(j_2)} \right)_{m'_2, m_2} \hat{T}(k, q) |b, j_2, m'_2\rangle, \end{aligned} \quad (4.10)$$

což odpovídá působení operátorů $\hat{J}_i$ na stavy dvou nezávislých momentů hybnosti $|k, q\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$. Na základě této analogie můžeme definovat kety „složeného“ momentu hybnosti

$$|z(b, k, j_2); j, m\rangle = \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \sum_{q=-k}^k (k, j_2, q, m_2 | j, m) \hat{T}(k, q) |b, j_2, m_2\rangle,$$

kde $z(b, k, j_2)$ je index jednoznačně určený hodnotami b, k, j_2 . Inverzním vztahem (3.21) můžeme vyjádřit $\hat{T}(k, q) |b, j_2, m_2\rangle$ pomocí stavů $|z(b, k, j_2); j, m\rangle$

$$\hat{T}(k, q) |b, j_2, m_2\rangle = \sum_{j=|k-j_2|}^{k+j_2} \sum_{m=-j}^j (k, j_2, q, m_2 | j, m) |z(b, k, j_2); j, m\rangle.$$

Dosazením do (4.8) nalezneme

$$\begin{aligned} \langle a, j_1, m_1 | \hat{T}(k, q) |b, j_2, m_2\rangle &= \sum_{j=|k-j_2|}^{k+j_2} \sum_{m=-j}^j (k, j_2, q, m_2 | j, m) \langle a, j_1, m_1 | z(b, k, j_2); j, m\rangle \\ &= (k, j_2, q, m_2 | j_1, m_1) \langle a, j_1, m_1 | z(b, k, j_2); j_1, m_1\rangle \\ &= (k, j_2, q, m_2 | j_1, m_1) F(a, b, k, j_1, j_2), \end{aligned} \quad (4.11)$$

kde jsme využili vztah (2.21) (pro volbu $\hat{A} = \hat{I}$). Vztah (4.11) je matematickým vyjádřením Wigner-Eckartova teorému. Jeho obvyklejší formulace využívá Wignerovy $3j$ symboly

$$\begin{aligned} \langle a, j_1, m_1 | \hat{T}(k, q) |b, j_2, m_2\rangle &= (-1)^{j_1-m_1} \begin{pmatrix} j_1 & k & j_2 \\ -m_1 & q & m_2 \end{pmatrix} \left(a, j_1 \left\| \hat{\mathbb{T}}^{(k)} \right\| b, j_2 \right) \\ &= \frac{(-1)^{j_1+k-j_2}}{\sqrt{2j_1+1}} (k, j_2, q, m_2 | j_1, m_1) \left(a, j_1 \left\| \hat{\mathbb{T}}^{(k)} \right\| b, j_2 \right), \end{aligned} \quad (4.12)$$

kde $\left(a, j_1 \left\| \hat{\mathbb{T}}^{(k)} \right\| b, j_2 \right)$ představuje tzv. redukovaný maticový element. Ten je určený levou stranou pro jednu hodnotu q, m_1, m_2 , kdy je CG koeficient nenulový. Díky Wigner-Eckartovu teorému stačí spočítat jeden maticový element ITO, ostatních $(2j_1+1)(2k+1)(2j_2+1)-1$ už lze dopočítat s využitím CG koeficientů, resp. Wignerových $3j$ -symbolů.

Výběrová pravidla pro CG koeficienty (3.22) platí stejným způsobem i pro maticové elementy ITO, tj. $\langle a, j_1, m_1 | \hat{T}(k, q) | b, j_2, m_2 \rangle = 0$ pokud neplatí

$$m_1 = m_2 + q, \quad |k - j_2| \leq j_1 \leq k + j_2.$$

Speciálně tedy platí

$$\langle a, j_1, m | \hat{T}(k, q) | b, j_2, m \rangle = 0 \quad \text{pro } q \neq 0.$$

Odsud snadno vidíme, že střední hodnoty 1. a 2. složky vektorového operátoru jsou ve stavech $|a, j, m\rangle$ nulové

$$\langle a, j, m | \hat{V}_1 | a, j, m \rangle = \langle a, j, m | \hat{V}_2 | a, j, m \rangle = 0, \quad (4.13)$$

protože inverzí vztahů (4.3) dostaneme

$$\hat{V}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{T}(1, -1) - \hat{T}(1, 1) \right), \quad \hat{V}_2 = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\hat{T}(1, -1) + \hat{T}(1, 1) \right),$$

a $\langle a, j, m | \hat{T}(1, \pm 1) | a, j, m \rangle = 0$.

4.3 Maticové elementy skalárů a vektorů

Pro skalární operátor $\hat{S}$ Wigner-Eckartův teorém přejde na vztah (2.21)

$$\begin{aligned} \langle a, j_1, m_1 | \hat{S} | b, j_2, m_2 \rangle &= \frac{(-1)^{j_1-j_2}}{\sqrt{2j_1+1}} \underbrace{(0, j_2, 0, m_2 | j_1, m_1)}_{\delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}} \left(a, j_1 \parallel \hat{S} \parallel b, j_2 \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2j_1+1}} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \left(a, j_1 \parallel \hat{S} \parallel b, j_2 \right) \\ &= F(j_1, a, b) \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}. \end{aligned}$$

Redukovaný maticový element skalárního operátoru je tedy

$$\left(a, j_1 \parallel \hat{S} \parallel b, j_2 \right) = F(j_1, a, b) \sqrt{2j_1+1} \delta_{j_1, j_2}.$$

Pokud jsou navíc vektory $\{|a, j_1, m_1\rangle\}$ a $\{|b, j_2, m_2\rangle\}$ stejné ortonormální báze, pak platí

$$F(j_1, a, b) = g(j_1, a) \delta_{a, b}.$$

Pro vektorové operátory dokážeme projekční teorém (pro $j \neq 0$)

$$\langle a, j, m' | \hat{V} | b, j, m \rangle = \langle a, j, m' | \frac{\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{V}}}{\hat{j}^2} \hat{\vec{J}} | b, j, m \rangle = \frac{1}{\hbar^2 j(j+1)} \langle a, j, m' | \left(\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{V}} \right) \hat{\vec{J}} | b, j, m \rangle. \quad (4.14)$$

Vyjdeme z toho, že $\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{V}}$ je skalární operátor, jak se lze snadno přesvědčit z komutačních relací

$$\left[\hat{J}_i, \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{V}} \right] = \hat{J}_k \left[\hat{J}_i, \hat{V}_k \right] + \left[\hat{J}_i, \hat{J}_k \right] \hat{V}_k = i\hbar \varepsilon_{ikl} (\hat{J}_k \hat{V}_l + \hat{J}_l \hat{V}_k) = 0.$$

Odsud plyne, že $\frac{\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{V}}}{\hat{J}^2} \hat{\vec{J}}$ je vektorový operátor. Díky převodním vztahům mezi kartézskými a sférickými vektory (4.3) a Wigner-Eckartovu teorému stačí rovnost dokázat pro jednu složku $\hat{V}_i$ a nějaké hodnoty m, m' , pro které je $(1, j, q, m | j, m') \neq 0$. V dalším zvolíme $q = 0$ a $m = m' = j$ a vyjádříme pravou stranu

$$\begin{aligned} \langle a, j, j | \frac{\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{V}}}{\hat{J}^2} \hat{J}_3 | b, j, j \rangle &= \frac{1}{\hbar(j+1)} \langle a, j, j | \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{V}} | b, j, j \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar(j+1)} \langle a, j, j | \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-) \hat{V}_1 + \frac{i}{2}(\hat{J}_- - \hat{J}_+) \hat{V}_1 + \hat{J}_3 \hat{V}_3 | b, j, j \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar(j+1)} \left(\langle a, j, j | \frac{1}{2} \hat{J}_+ (\hat{V}_1 - i\hat{V}_2) | b, j, j \rangle + \hbar j \langle a, j, j | \hat{V}_3 | b, j, j \rangle \right). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Dále využijeme komutační relace (4.1) a upravíme operátor v prvním braketu

$$\frac{1}{2} \hat{J}_+ (\hat{V}_1 - i\hat{V}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left[\hat{J}_+, \hat{V}(1, -1) \right] + \hat{V}(1, -1) \hat{J}_+ \right) = \hbar \hat{V}(1, 0) + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{V}(1, -1) \hat{J}_+.$$

Po dosazení do (4.15) dá posunovací operátor $\hat{J}_+$ při působení na ket nulu, takže dostaneme

$$\begin{aligned} \langle a, j, j | \frac{\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{V}}}{\hat{J}^2} \hat{J}_3 | b, j, j \rangle &= \frac{1}{\hbar(j+1)} \left(\hbar \langle a, j, j | \hat{V}_3 | b, j, j \rangle + \hbar j \langle a, j, j | \hat{V}_3 | b, j, j \rangle \right) \\ &= \langle a, j, j | \hat{V}_3 | b, j, j \rangle. \end{aligned}$$

Tím je projekční teorém (4.14) dokázán.

4.4 Starkův jev na vodíku pro $N = 3$

Jako ilustraci využití symetrií a Wigner-Eckartova teorému si spočítáme Starkův jev na vodíku pro hladinu $N = 3$. Starkův jev popisuje rozštěpení hladin vodíku vlivem vnějšího elektrostatického pole. Díky sférické symetrii vodíku zvolíme elektrické pole ve směru osy z , tj. $\vec{E} = (0, 0, \mathcal{E})$. Energie vodíku v tomto poli (odpovídá energii dipólu) je

$$\hat{H}' = e\mathcal{E} \hat{X}_3, \quad (4.16)$$

kde $\hat{X}_3$ je třetí složka souřadnice relativního pohybu. Vliv elektrického pole započítáme poruchově, vzhledem k degeneraci hladin ($D_N = N^2$ bez započítání spinu elektronu) je

nutné použít poruchovou teorii pro degenerované spektrum. Opravy 1. řádu jsou vlastní čísla matice operátoru poruchy (4.16) v podprostoru $N = 3$

$$\mathbb{H}'^{(N=3)} = \left(\langle 3, l', m' | \hat{H}' | 3, l, m \rangle \right),$$

kde $|N, l, m\rangle$ jsou společné vlastní vektory neporušeného hamiltoniánu $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$. Je to hermitovská matice 9×9 , tj. má 45 netriviálních maticových elementů. Díky symetriím a Wigner-Eckartovu teorému ale stačí spočítat jen 2, ostatní už budou jednoznačně určené.

Porucha je násobek 0-té složky ITO 1. řádu $\hat{X}^{(1)}$

$$\hat{H}' = e\mathcal{E}\hat{X}(1, 0).$$

Jeho maticové elementy jsou určené v příkladu 22, ze vztahu (4.30) dostaneme

$$\langle 3, l', m' | \hat{X}(1, 0) | 3, l, m \rangle = \sqrt{\frac{2l+1}{2l'+1}} (1, l, 0, 0 | l', 0) (1, l, 0, m | l', m') \langle 3, l' | r | 3, l \rangle. \quad (4.17)$$

Z výběrových pravidel plyne, že nenulové elementy mohou být jen pro $m' = m$ a $l' = l \pm 1$ (viz. (4.32)). Prostor s $N = 3$ můžeme tedy rozdělit na 4 podprostory generované vektory s různou hodnotou m :

1. $m = 0$: $|3, 0, 0\rangle$, $|3, 1, 0\rangle$, $|3, 2, 0\rangle$
2. $m = 1$: $|3, 1, 1\rangle$, $|3, 2, 1\rangle$
3. $m = -1$: $|3, 1, -1\rangle$, $|3, 2, -1\rangle$
4. $m = \pm 2$: $|3, 2, 2\rangle$, $|3, 2, -2\rangle$.

Podprostory jsou invariantní vůči operátoru poruchy, tj. jeho matice bude blokově diagonální. V posledním podprostoru jsou maticové elementy nulové.

Zbývá určit dva maticové elementy radiální části - $\langle 3, 0 | r | 3, 1 \rangle$ a $\langle 3, 1 | r | 3, 2 \rangle$. Radiální část vlnové funkce $R_{Nl}(r)$ pro elektron v atomu vodíku je rovna

$$R_{Nl}(r) = \frac{2}{N^2} \left(\frac{(N-l-1)!}{a_0^3(N+l)!} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2r}{Na_0} \right)^l e^{-\frac{r}{Na_0}} L_{N-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{Na_0} \right), \quad (4.18)$$

kde $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ je Bohrov poloměr a $L_n^\beta(z)$ je zobecněný Laguerrův polynom. Explicitní tvar funkcí pro $N = 3$ a $l = 0, 1, 2$ je potom

$$\begin{aligned} R_{30}(r) &= \frac{2}{3\sqrt{3}a_0^3} e^{-\frac{r}{3a_0}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2} \right), \\ R_{31}(r) &= \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{3}a_0^3} e^{-\frac{r}{3a_0}} \left(\frac{2r}{a_0} - \frac{r^2}{3a_0^2} \right), \\ R_{32}(r) &= \frac{2\sqrt{2}}{81\sqrt{15}a_0^3} e^{-\frac{r}{3a_0}} \frac{r^2}{a_0^2}. \end{aligned}$$

Maticové elementy (4.31) lze rozložit na součet integrálů tvaru

$$f(n) = \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{3a_0}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^n dr = \left(\frac{3}{2}\right)^{n+1} a_0 \Gamma(n+1) = \left(\frac{3}{2}\right)^{n+1} n! a_0.$$

V našem případě nalezneme

$$\begin{aligned} \langle 3, 1 | r | 3, 2 \rangle &= \frac{16}{6561\sqrt{5}} f(6) - \frac{8}{19683\sqrt{5}} f(7) = -\frac{9\sqrt{5}}{2} a_0, \\ \langle 3, 0 | r | 3, 1 \rangle &= \frac{8\sqrt{2}}{243} f(4) - \frac{20\sqrt{2}}{729} f(5) + \frac{40\sqrt{2}}{6561} f(6) - \frac{8\sqrt{2}}{19683} f(7) = -9\sqrt{2} a_0. \end{aligned}$$

Relevantní CG koeficienty určíme podle tabulek z přílohy A

$$(1, 1, 0, 0 | 0, 0) = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad (1, 2, 0, m | 1, m) = -\sqrt{\frac{4-m^2}{10}}.$$

Dosazením do vztahu (4.17) dostaneme

$$\begin{aligned} \langle 3, 0, 0 | \hat{X}(1, 0) | 3, 1, 0 \rangle &= -3\sqrt{6} a_0, \\ \langle 3, 1, m | \hat{X}(1, 0) | 3, 2, m \rangle &= -\frac{3\sqrt{3}}{2} \sqrt{4-m^2} a_0 = \begin{cases} -\frac{9}{2} a_0, & m = \pm 1 \\ -3\sqrt{3} a_0, & m = 0 \end{cases}. \end{aligned}$$

Tím máme určené všechny maticové elementy operátoru poruchy. Jeho matice je pak rovna (pořadí bazických vektorů bereme viz. výše)

$$\mathbb{H}'^{(N=3)} = -3ea_0\mathcal{E} \begin{pmatrix} \begin{array}{ccc|c|c|c} 0 & \sqrt{6} & 0 & & & \\ \sqrt{6} & 0 & \sqrt{3} & & & \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & & & \\ \hline & & & 0 & 3/2 & \\ & & & 3/2 & 0 & \\ \hline & & & & & 0 & 3/2 & \\ & & & & & 3/2 & 0 & \\ \hline & & & & & & & 0 & 0 \\ & & & & & & & 0 & 0 \end{array} \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Opravy energie $E_3 = -\frac{R}{9} \approx -1.5\text{eV}$ v 1. řádu poruchového rozvoje jsou vlastní čísla této matice, příslušné vlastní vektory pak určují koeficienty rozvoje správných vlastních vektorů neporušeného hamiltoniánu $\hat{H}_0$ vzhledem k $\hat{H}'$ do báze $\{|3, l, m\rangle\}$. Vlastní čísla matice (4.19) jsou $\pm 9ea_0\mathcal{E}$ (násobnost 1), $\pm \frac{9}{2}ea_0\mathcal{E}$ (násobnost 2) a 0 (násobnost 3). Druhá excitovaná hladina vodíku se tedy vlivem homogenního elektrického pole rozdělí na multiplet pěti hladin vzdálených o $\frac{9}{2}ea_0\mathcal{E}$.

Výsledky jsou shrnuty v tabulce 4.1.

Oprava 1. řádu	Násobnost	Správné vlastní vektory $\hat{H}_0$
$9ea_0\mathcal{E}$	1	$\frac{1}{\sqrt{6}} (\sqrt{2} 3, 0, 0\rangle + \sqrt{3} 3, 1, 0\rangle + 3, 2, 0\rangle)$
$\frac{9}{2}ea_0\mathcal{E}$	2	$\frac{1}{\sqrt{2}} (3, 1, \pm 1\rangle + 3, 2, \pm 1\rangle)$
0	3	$ 3, 2, 2\rangle, 3, 2, -2\rangle, \frac{1}{\sqrt{3}} (3, 0, 0\rangle - \sqrt{2} 3, 1, 0\rangle)$
$-\frac{9}{2}ea_0\mathcal{E}$	2	$\frac{1}{\sqrt{2}} (3, 1, \pm 1\rangle - 3, 2, \pm 1\rangle)$
$-9ea_0\mathcal{E}$	1	$\frac{1}{\sqrt{6}} (\sqrt{2} 3, 0, 0\rangle - \sqrt{3} 3, 1, 0\rangle + 3, 2, 0\rangle)$

Tabulka 4.1: Shrnutí výsledků Starkova jevu na vodíku pro hladinu $N = 3$ v 1. řádu poruchové teorie. Opravy prvního řádu jsou vlastní čísla matice (4.19)

4.5 Tenzorový součin ITO

Z dvojice ITO $\hat{\mathbb{U}}^{(k_1)}$ a $\hat{\mathbb{V}}^{(k_2)}$ lze tenzorovým součinem zkonstruovat ITO řádu k

$$\hat{\mathbb{W}}^{(k)} = \left[\hat{\mathbb{U}}^{(k_1)} \otimes \hat{\mathbb{V}}^{(k_2)} \right]^{(k)},$$

kde $|k_1 - k_2| \leq k \leq k_1 + k_2$. Tenzorový součin je definován po složkách vztahem

$$\left[\hat{\mathbb{U}}^{(k_1)} \otimes \hat{\mathbb{V}}^{(k_2)} \right] (k, q) = \hat{W}(k, q) = \sum_{q_1, q_2} (k_1, k_2, q_1, q_2 | k, q) \hat{U}(k_1, q_1) \hat{V}(k_2, q_2). \quad (4.20)$$

Speciálně pro $k_1 = k_2$ a $k = 0$ dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{W}(0, 0) &= \sum_{q_1} \underbrace{(k_1, k_1, q_1, -q_1 | 0, 0)}_{\frac{(-1)^{k_1+q_1}}{\sqrt{2k_1+1}}} \hat{U}(k_1, q_1) \hat{V}(k_1, -q_1) \\ &= \frac{(-1)^{k_1}}{\sqrt{2k_1+1}} \sum_{q_1} (-1)^{q_1} \hat{U}(k_1, q_1) \hat{V}(k_1, -q_1). \end{aligned}$$

Na základě tohoto vztahu se definuje skalární součin ITO stejného řádu

$$\hat{\mathbb{U}}^{(k_1)} \cdot \hat{\mathbb{V}}^{(k_1)} \equiv (-1)^{k_1} \sqrt{2k_1+1} \hat{W}(0, 0) = \sum_{q_1} (-1)^{q_1} \hat{U}(k_1, q_1) \hat{V}(k_1, -q_1). \quad (4.21)$$

Pro maticové elementy skalárního součinu dvou ITO platí vztah

$$\begin{aligned}
\langle a, j_1, m_1 | \hat{\mathbf{U}}^{(k)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(k)} | b, j_2, m_2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2j_1+1}} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \left(a, j_1 \left\| \hat{\mathbf{U}}^{(k)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(k)} \right\| b, j_2 \right) \\
&= \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \frac{(-1)^{j_1}}{2j_1+1} \sum_{c,j} (-1)^j \left(a, j_1 \left\| \hat{\mathbf{U}}^{(k)} \right\| c, j \right) \times \\
&\quad \times \left(c, j \left\| \hat{\mathbf{V}}^{(k)} \right\| b, j_2 \right). \quad (4.22)
\end{aligned}$$

První rovnost plyne přímo z Wigner-Eckartova teorému, protože $\hat{\mathbf{U}}^{(k)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(k)}$ je ITO 0. řádu a pro příslušný CG koeficient platí

$$(0, j_2, 0, m_2 | j_1, m_1) = \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}.$$

Pro důkaz druhé rovnosti využijeme rozklad jednotky

$$\hat{I} = \sum_{c,j,m} |c, j, m\rangle \langle c, j, m|,$$

který vložíme mezi operátory $\hat{U}(k, q)$ a $\hat{V}(k, -q)$ ve skalárním součinu ITO, tj.

$$\begin{aligned}
\langle a, j_1, m_1 | \hat{\mathbf{U}}^{(k)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(k)} | b, j_2, m_2 \rangle &= \langle a, j_1, m_1 | \sum_q (-1)^q \hat{U}(k, q) \hat{V}(k, -q) | b, j_2, m_2 \rangle \\
&= \sum_{q,c,j,m} (-1)^q \langle a, j_1, m_1 | \hat{U}(k, q) | c, j, m \rangle \langle c, j, m | \hat{V}(k, -q) | b, j_2, m_2 \rangle \\
&= \sum_{q,c,j,m} (-1)^q (-1)^{j_1-m_1} \begin{pmatrix} j_1 & k & j \\ -m_1 & q & m \end{pmatrix} \left(a, j_1 \left\| \hat{\mathbf{U}}^{(k)} \right\| c, j \right) \times \\
&\quad \times (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & k & j_2 \\ -m & -q & m_2 \end{pmatrix} \left(c, j \left\| \hat{\mathbf{V}}^{(k)} \right\| b, j_2 \right). \quad (4.23)
\end{aligned}$$

Wignerovy $3j$ symboly upravíme s využitím symetrií (3.31) a (3.32) do tvaru

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} j_1 & k & j \\ -m_1 & q & m \end{pmatrix} &= (-1)^{j_1+k+j} \begin{pmatrix} j & k & j_1 \\ m & q & -m_1 \end{pmatrix}, \\
\begin{pmatrix} j & k & j_2 \\ -m & -q & m_2 \end{pmatrix} &= (-1)^{j+k+j_2} \begin{pmatrix} j & k & j_2 \\ m & q & -m_2 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Suma přes q, m je potom rovna (pro fázové faktory platí $(-1)^{2n} = 1$)

$$\begin{aligned}
& \sum_{q,m} (-1)^{q+j_1+j-m_1-m} (-1)^{j_1+k+j} \begin{pmatrix} j & k & j_1 \\ m & q & -m_1 \end{pmatrix} (-1)^{j+k+j_2} \begin{pmatrix} j & k & j_2 \\ m & q & -m_2 \end{pmatrix} = \\
& = \sum_{q,m} (-1)^{q+j_2+j-m_1-m} \frac{(-1)^{j-k+m_1}}{\sqrt{2j_1+1}} (j, k, m, q | j_1, m_1) \frac{(-1)^{j-k+m_2}}{\sqrt{2j_2+1}} (j, k, m, q | j_2, m_2) \\
& = \frac{(-1)^{j_2+j}}{\sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)}} \underbrace{\sum_{q,m} (j, k, m, q | j_1, m_1) (j, k, m, q | j_2, m_2)}_{\delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}} \\
& = \frac{(-1)^{j_1+j}}{2j_1+1} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \tag{4.24}
\end{aligned}$$

kde ve druhém řádku využijeme toho, že CG koeficienty jsou nenulové jen pro $m+q = m_1 = m_2$, a poslední rovnost plyne z relací ortogonality pro CG koeficienty (3.25). Dosazením (4.24) do (4.23) dostaneme hledaný vztah (4.22).

Speciálním případem vztahu (4.22) pro $k = 1$ a $\hat{U}^{(1)} = \hat{J}^{(1)}$ je

$$\langle a, j', m' | \hat{J}^{(1)} \cdot \hat{V}^{(1)} | b, j, m \rangle = \hbar \sqrt{\frac{j(j+1)}{2j+1}} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \left(a, j' \left\| \hat{V}^{(1)} \right\| b, j \right)$$

kde jsme využili redukovaný maticový element momentu hybnosti (4.26) spočítaný v příkladu 19.

4.6 Příklady

Cvičení 17. *Explicitním výpočtem ověřte, že vztahy (4.3) definují ITO 1. řádu.*

Návod: Musíme ověřit platnost vztahů (4.1). Využijeme komutačních relací vektorového operátoru s momentem hybnosti

$$\left[\hat{J}_i, \hat{V}_j \right] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{V}_k.$$

Pro $\hat{V}(1, 0) = \hat{V}_3$ ihned dostaneme

$$\begin{aligned}
\left[\hat{J}_3, \hat{V}(1, 0) \right] &= \left[\hat{J}_3, \hat{V}_3 \right] = 0, \\
\left[\hat{J}_{\pm}, \hat{V}(1, 0) \right] &= \left[\hat{J}_1, \hat{V}_3 \right] \pm i \left[\hat{J}_2, \hat{V}_3 \right] = \mp \hbar \left(\hat{V}_1 \pm i \hat{V}_2 \right) = \sqrt{2} \hbar \hat{V}(1, \pm 1) = \alpha_{1,0}^{\pm} \hat{V}(1, \pm 1).
\end{aligned}$$

Podobně pro $\hat{V}(1, 1) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 + i\hat{V}_2)$ nalezneme

$$\begin{aligned} [\hat{J}_3, \hat{V}(1, 1)] &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (i\hbar\varepsilon_{312}\hat{V}_2 + i(i\hbar\varepsilon_{321})\hat{V}_1) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}} (i\hat{V}_2 + \hat{V}_1) = \hbar\hat{V}(1, 1), \\ [\hat{J}_+, \hat{V}(1, 1)] &= -\frac{1}{\sqrt{2}} ([\hat{J}_1, i\hat{V}_2] + [i\hat{J}_2, \hat{V}_1]) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (-\hbar\varepsilon_{123}\hat{V}_3 - \hbar\varepsilon_{213}\hat{V}_3) = 0, \\ [\hat{J}_-, \hat{V}(1, 1)] &= -\frac{1}{\sqrt{2}} ([\hat{J}_1, i\hat{V}_2] - [i\hat{J}_2, \hat{V}_1]) = \sqrt{2}\hbar\hat{V}_3 = \alpha_{1,1}^- \hat{V}(1, 0). \end{aligned}$$

Stejným způsobem pro $\hat{V}(1, -1) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 - i\hat{V}_2)$ najdeme

$$\begin{aligned} [\hat{J}_3, \hat{V}(1, -1)] &= \frac{1}{\sqrt{2}} (i\hbar\varepsilon_{312}\hat{V}_2 - i(i\hbar\varepsilon_{321})\hat{V}_1) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} (i\hat{V}_2 - \hat{V}_1) = -\hbar\hat{V}(1, -1), \\ [\hat{J}_+, \hat{V}(1, -1)] &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-[\hat{J}_1, i\hat{V}_2] + [i\hat{J}_2, \hat{V}_1]) = \sqrt{2}\hbar\hat{V}_3 = \alpha_{1,-1}^+ \hat{V}(1, 0), \\ [\hat{J}_-, \hat{V}(1, -1)] &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-[\hat{J}_1, i\hat{V}_2] - [i\hat{J}_2, \hat{V}_1]) = 0. \end{aligned}$$

Cvičení 18. Složky operátoru kvadrupólového momentu $\hat{Q}_{ij} = q\hat{X}_i\hat{X}_j$ ($\hat{X}_i$ jsou složky operátoru polohy) tvoří dohromady kartézský tenzor 2. řádu. Určete jeho rozklad na ITO 0., 1. a 2. řádu.

Návod: Kvadrupólový moment nejprve rozdělíme podle vztahu (4.4). Tenzor $\hat{Q}_{ij}$ je symetrický, takže dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{D}_{ij} &= \frac{1}{3} \text{Tr } \hat{Q} \delta_{ij} = \frac{q}{3} \hat{X}^2 \delta_{ij} \\ \hat{A}_{ij} &= 0, \\ \hat{S}_{ij} &= \hat{Q}_{ij} - \hat{D}_{ij} = q\hat{X}_i\hat{X}_j - \frac{q}{3} \hat{X}^2 \delta_{ij}. \end{aligned}$$

ITO 0. řádu je tedy

$$\hat{Q}^{(0)} = \frac{q}{3} \hat{X}^2.$$

ITO 1. řádu je pro kvadrupólový moment nulový. Složky operátoru $\hat{Q}^{(2)}$ určíme z (4.7), můžeme je upravit do tvaru

$$\begin{aligned} \hat{Q}(2, 2) &= \frac{q}{\sqrt{6}} (\hat{X}_1 + i\hat{X}_2)^2, \\ \hat{Q}(2, 1) &= -q\sqrt{\frac{2}{3}} \hat{X}_3 (\hat{X}_1 + i\hat{X}_2), \\ \hat{Q}(2, 0) &= \frac{q}{3} (2\hat{X}_3^2 - \hat{X}_1^2 - \hat{X}_2^2), \\ \hat{Q}(2, -1) &= q\sqrt{\frac{2}{3}} \hat{X}_3 (\hat{X}_1 - i\hat{X}_2), \\ \hat{Q}(2, -2) &= \frac{q}{\sqrt{6}} (\hat{X}_1 - i\hat{X}_2)^2. \end{aligned}$$

Cvičení 19. Určete redukovaný maticový element $\left(a', j' \left\| \hat{\mathbf{J}}^{(1)} \right\| a, j\right)$, kde a, a' jsou sady kvantových čísel příslušející stejným pozorovatelným kompatibilním s momentem hybnosti.

Návod: Zvolíme složku $\hat{\mathbf{J}}(1, 0) = \hat{J}_3$, z Wigner-Eckartova teorému pak plyne

$$\langle a', j', m' | \hat{J}_3 | a, j, m \rangle = m \hbar \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \delta_{a,a'} = \frac{(-1)^{j'-j+1}}{\sqrt{2j'+1}} (1, j, 0, m | j', m') \left(a', j' \left\| \hat{\mathbf{J}}^{(1)} \right\| a, j\right).$$

Pro $m = m' = j$ pak s využitím CG koeficientu z přílohy A dostaneme rovnost

$$\begin{aligned} j \hbar \delta_{j,j'} \delta_{a,a'} &= -\frac{1}{\sqrt{2j+1}} \underbrace{(1, j, 0, j | j, j)}_{-\frac{j}{\sqrt{j(j+1)}}} \left(a', j' \left\| \hat{\mathbf{J}}^{(1)} \right\| a, j\right) \\ &= \frac{j}{\sqrt{j(j+1)(2j+1)}} \left(a', j' \left\| \hat{\mathbf{J}}^{(1)} \right\| a, j\right), \end{aligned} \quad (4.25)$$

takže platí

$$\left(a', j' \left\| \hat{\mathbf{J}}^{(1)} \right\| a, j\right) = \hbar \sqrt{j(j+1)(2j+1)} \delta_{j,j'} \delta_{a,a'}. \quad (4.26)$$

Cvičení 20. Uvažujme složený moment hybnosti $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}^{(1)} + \hat{\vec{J}}^{(2)}$ a jeho vlastní stavy $|j_1, j_2, j, m\rangle$. Čemu je rovna střední hodnota $\hat{J}_3^{(1)}$ v tomto stavu?

Návod: Pro $j \neq 0$ využijeme projekční teorém (4.14)

$$\langle \hat{J}_3^{(1)} \rangle_{j,m} \equiv \langle j_1, j_2, j, m | \hat{J}_3^{(1)} | j_1, j_2, j, m \rangle = \frac{m}{\hbar j(j+1)} \langle j_1, j_2, j, m | \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{J}}^{(1)} | j_1, j_2, j, m \rangle.$$

Skalární součin vyjádříme pomocí kvadrátů momentů hybnosti

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

kde jsme využili vztah (3.11). Pro střední hodnotu $\hat{J}_3^{(1)}$ tak dostaneme

$$\langle \hat{J}_3^{(1)} \rangle_{j,m} = \frac{m \hbar}{2j(j+1)} (j(j+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)).$$

Případ $j = 0 = m$ je možný jen když $j_1 = j_2$. Jediné nenulové CG koeficienty jsou (3.33), takže platí

$$|j_1, j_1, 0, 0\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \frac{(-1)^{j_1+m_1}}{\sqrt{2j_1+1}} |j_1, m_1\rangle \otimes |j_1, -m_1\rangle.$$

Střední hodnota $\hat{J}_3^{(1)}$ je v tomto stavu nulová

$$\langle \hat{J}_3^{(1)} \rangle_{0,0} = \frac{\hbar}{2j_1+1} \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} m_1 = 0.$$

Cvičení 21. Operátor celkového magnetického momentu elektronu v atomu je roven součtu orbitálního a vlastního magnetického momentu

$$\hat{\vec{\mu}} = \hat{\vec{\mu}}_L + \hat{\vec{\mu}}_S = -\frac{\mu_0}{\hbar} \left(g_L \hat{\vec{L}} + g_S \hat{\vec{S}} \right), \quad g_L \approx 1, \quad g_S \approx 2, \quad (4.27)$$

kde μ_0 je Bohrov magneton. Určete diagonální maticové elementy $\langle l, s, j, m | \hat{\vec{\mu}} | l, s, j, m \rangle$.

Návod: První dvě složky mají střední hodnoty nulové díky (4.13). Pro třetí složku využijeme projekční teorém (4.14)

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mu}_3 \rangle_{j,m} &\equiv \langle l, s, j, m | \hat{\mu}_3 | l, s, j, m \rangle = -\frac{m\mu_0}{\hbar^2 j(j+1)} \langle l, s, j, m | \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{\mu}} | l, s, j, m \rangle \\ &= -\frac{m\mu_0}{\hbar^2 j(j+1)} \langle l, s, j, m | g_L \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{L}} + g_S \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{S}} | l, s, j, m \rangle. \end{aligned}$$

Skalární součiny vyjádříme stejným způsobem jako ve cvičení 20

$$\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{L}} = \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 + \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \right), \quad \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2 \right).$$

Pro střední hodnoty $\hat{\mu}_3$ pak nalezneme

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mu}_3 \rangle_{j,m} &= -\frac{m\mu_0}{2\hbar^2 j(j+1)} \langle l, s, j, m | \hat{J}^2 (g_L + g_S) + \left(\hat{L}^2 - \hat{S}^2 \right) (g_L - g_S) | l, s, j, m \rangle \\ &= -\frac{m\mu_0}{2j(j+1)} \left((g_L + g_S) j(j+1) + (g_L - g_S) (l(l+1) - s(s+1)) \right). \end{aligned}$$

Výsledek můžeme přepsat ve tvaru

$$\langle \hat{\mu}_3 \rangle_{j,m} = -g_j m \mu_0, \quad (4.28)$$

kde g_j je tzv. Landého g -faktor

$$g_j = \frac{g_L + g_S}{2} + \frac{l(l+1) - s(s+1)}{2j(j+1)} (g_L - g_S).$$

Pro elektron je $s = \frac{1}{2}$ a v přiblížení $g_L = 1$ a $g_S = 2$ dostaneme

$$g_j = \frac{3}{2} + \frac{\frac{3}{4} - l(l+1)}{2j(j+1)} = \begin{cases} 1 \pm \frac{1}{2l+1}, & j = l \pm \frac{1}{2}, \quad l > 0 \\ 2, & l = 0 \end{cases}. \quad (4.29)$$

Střední hodnota s maximální projekcí $m = j$ se nazývá magnetický moment částice

$$\mu = \langle \mu_3 \rangle_{jj} = -g_j j \mu_0.$$

Cvičení 22. Definujme operátory $\hat{Y}(k, q)$ jako operátory násobení kulovou funkcí $Y_{kq}(\theta, \varphi)$. Ukažte, že $\hat{Y}(k, q)$ tvoří složky ireducibilního tenzoru řádu k $\hat{\mathbf{Y}}^{(k)}$. Nalezněte redukované maticové elementy $\left(l' \parallel \hat{\mathbf{Y}}^{(k)} \parallel l\right)$.

Nechť $|N, l, m\rangle$ značí společné vlastní vektory $\hat{L}_3$, $\hat{L}^2$ a $\hat{H}$ se sféricky symetrickým potenciálem. Určete maticové elementy $\langle N', l', m' | \hat{X}_i | N, l, m \rangle$.

Návod: Nejprve musíme ověřit platnost komutačních relací (4.1). Komutátory necháme působit na kulovou funkci Y_{lm}

$$\begin{aligned} [\hat{L}_3, \hat{Y}_{kq}] Y_{lm} &= \hat{L}_3(Y_{kq} Y_{lm}) - Y_{kq} \hat{L}_3 Y_{lm} = \hbar q Y_{kq} Y_{lm} + Y_{kq} \hbar m Y_{lm} - Y_{kq} \hbar m Y_{lm} \\ &= \hbar q \hat{Y}_{kq} Y_{lm}, \\ [\hat{L}_{\pm}, \hat{Y}_{kq}] Y_{lm} &= \hat{L}_{\pm}(Y_{kq} Y_{lm}) - Y_{kq} \hat{L}_{\pm} Y_{lm} \\ &= \alpha_{kq}^{\pm} Y_{kq\pm 1} Y_{lm} + Y_{kq} \alpha_{lm}^{\pm} Y_{lm\pm 1} - Y_{kq} \alpha_{lm}^{\pm} Y_{lm\pm 1} \\ &= \alpha_{kq}^{\pm} \hat{Y}_{kq\pm 1} Y_{lm}, \end{aligned}$$

a protože kulové funkce tvoří ON bázi tak vztahy (4.1) platí. Pro redukovaný maticový element z Wigner-Eckartova teorému dostaneme

$$\langle l', m' | \hat{Y}(k, q) | l, m \rangle = \frac{(-1)^{l'+k-l}}{\sqrt{2l'+1}} (k, l, q, m | l', m') \left(l' \parallel \hat{\mathbf{Y}}^{(k)} \parallel l\right).$$

Levou stranu může vyjádřit přímo pomocí (3.55)

$$\begin{aligned} \langle l', m' | \hat{Y}(k, q) | l, m \rangle &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \bar{Y}_{l'm'}(\theta, \varphi) Y_{kq}(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ &= \sqrt{\frac{(2k+1)(2l+1)}{4\pi(2l'+1)}} (k, l, 0, 0 | l', 0) (k, l, q, m | l', m'). \end{aligned}$$

Redukovaný maticový element $\hat{\mathbf{Y}}^{(k)}$ je tedy roven

$$\left(l' \parallel \hat{\mathbf{Y}}^{(k)} \parallel l\right) = (-1)^{l'+k-l} \sqrt{\frac{(2k+1)(2l+1)}{4\pi}} (k, l, 0, 0 | l', 0).$$

Pro výpočet maticových elementů operátoru polohy nejdříve napíšeme složky x_i ve sférických souřadnicích, využijeme převodních vztahů (4.3) a najdeme příslušný ITO 1. řádu $\hat{\mathbf{X}}^{(1)}$, který má složky

$$\begin{aligned} \hat{X}(1, 1) &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 + ix_2) = -\frac{1}{\sqrt{2}} r \sin \theta e^{i\varphi}, \\ \hat{X}(1, 0) &= x_3 = r \cos \theta, \\ \hat{X}(1, -1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 - ix_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} r \sin \theta e^{-i\varphi}. \end{aligned}$$

Výsledek je možné přepsat pomocí kulových funkcí s $l = 1$ v kompaktním tvaru

$$\hat{X}(1, q) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1q}(\theta, \varphi),$$

tj. platí $\hat{\mathbf{X}}^{(1)} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r \hat{\mathbf{Y}}^{(1)}$. Pro maticové elementy $\hat{X}(1, q)$ nalezneme

$$\begin{aligned} \langle N', l', m' | \hat{X}(1, q) | N, l, m \rangle &= \langle N', l', m' | \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r \hat{Y}(1, q) | N, l, m \rangle \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{2l'+1}} (1, l, 0, 0 | l', 0) (1, l, q, m | l', m') \langle N', l' | r | N, l \rangle, \end{aligned} \quad (4.30)$$

kde jsme označili

$$\langle N', l' | r | N, l \rangle = \int_0^\infty r^3 \bar{R}_{N'l'}(r) R_{Nl}(r) dr. \quad (4.31)$$

Zde $R_{Nl}(r)$ představuje radiální část vlnové funkce stavu $|N, l, m\rangle$, tj.

$$\psi_{N,l,m}(r, \theta, \varphi) = \langle r, \theta, \varphi | N, l, m \rangle = R_{Nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Díky výběrovým pravidlům pro CG koeficienty vidíme, že maticový element (4.30) je nenulový jen pokud

$$\begin{aligned} \Delta m &= m' - m = q = 1, 0, -1, \\ \Delta l &= l' - l = 1, 0, -1. \end{aligned}$$

Ze symetrie Wignerových $3j$ symbolů vůči záměně znamének m_i (3.32) navíc plyne, že $(1, l, 0, 0 | l, 0) = 0$, protože

$$\begin{aligned} (1, l, 0, 0 | l, 0) &= (-1)^{l-1} \sqrt{2l+1} \begin{pmatrix} 1 & l & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{l-1} \sqrt{2l+1} (-1)^{2l+1} \begin{pmatrix} 1 & l & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= -(1, l, 0, 0 | l, 0) = 0. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Maticové elementy jsou tedy nenulové jen pro $\Delta m = \pm 1, 0$ a $\Delta l = \pm 1$.

Cvičení 23. Uvažujte dva vektorové operátory $\hat{\vec{A}}, \hat{\vec{B}}$ a k nim přidružené ITO 1. řádu $\hat{\mathbf{A}}^{(1)}, \hat{\mathbf{B}}^{(1)}$. Ukažte, že platí

$$\hat{\mathbf{A}}^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{B}}^{(1)} = \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{B}}, \quad (4.33)$$

$$\left[\hat{\mathbf{A}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbf{B}}^{(1)} \right] (1, q) = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}} \right) (1, q). \quad (4.34)$$

Návod: Ve vztahu (4.33) využijeme definici skalárního součinu ITO (4.21) a převodních vztahů (4.3). Postupně nalezneme

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbb{A}}^{(1)} \cdot \hat{\mathbb{B}}^{(1)} &= \sum_{q=-1}^1 (-1)^q \hat{A}(1, q) \hat{B}(1, -q) = \hat{A}(1, 0) \hat{B}(1, 0) - \hat{A}(1, 1) \hat{B}(1, -1) - \hat{A}(1, -1) \hat{B}(1, 1) \\
&= \hat{A}_3 \hat{B}_3 + \frac{1}{2} (\hat{A}_1 + i \hat{A}_2) (\hat{B}_1 - i \hat{B}_2) + \frac{1}{2} (\hat{A}_1 - i \hat{A}_2) (\hat{B}_1 + i \hat{B}_2) \\
&= \hat{A}_i \hat{B}_i = \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{B}}.
\end{aligned}$$

Pro důkaz (4.34) vyjádříme nejprve pravou stranu, kde opět využijeme převodní vztahy (4.3)

$$\begin{aligned}
(\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}})(1, 1) &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{A}_i \hat{B}_j (\varepsilon_{ij1} + i \varepsilon_{ij2}), \\
(\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}})(1, 0) &= \hat{A}_i \hat{B}_j \varepsilon_{ij3}, \\
(\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}})(1, -1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{A}_i \hat{B}_j (\varepsilon_{ij1} - i \varepsilon_{ij2}).
\end{aligned}$$

Levou stranu vyjádříme z definice tenzorového součinu (4.20) a použijeme CG koeficienty z tabulky v příloze A. Pro složku $q = 1$ najdeme

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbb{A}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbb{B}}^{(1)}](1, 1) &= \underbrace{(1, 1, 1, 0 | 1, 1)}_{\frac{1}{\sqrt{2}}} \hat{A}(1, 1) \hat{B}(1, 0) + \underbrace{(1, 1, 0, 1 | 1, 1)}_{-\frac{1}{\sqrt{2}}} \hat{A}(1, 0) \hat{B}(1, 1) \\
&= -\frac{1}{2} (\hat{A}_1 + i \hat{A}_2) \hat{B}_3 + \frac{1}{2} \hat{A}_3 (\hat{B}_1 + i \hat{B}_2) \\
&= \frac{1}{2} (\hat{A}_3 \hat{B}_1 - \hat{A}_1 \hat{B}_3 + i \hat{A}_3 \hat{B}_2 - i \hat{A}_2 \hat{B}_3) \\
&= -\frac{i}{2} \hat{A}_i \hat{B}_j (\varepsilon_{ij1} + i \varepsilon_{ij2}) = \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}})(1, 1).
\end{aligned}$$

Podobně pro $q = 0$ dostaneme

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbb{A}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbb{B}}^{(1)}](1, 0) &= \underbrace{(1, 1, 1, -1 | 1, 0)}_{\frac{1}{\sqrt{2}}} \hat{A}(1, 1) \hat{B}(1, -1) + \underbrace{(1, 1, -1, 1 | 1, 0)}_{-\frac{1}{\sqrt{2}}} \hat{A}(1, -1) \hat{B}(1, 1) \\
&= -\frac{1}{2\sqrt{2}} (\hat{A}_1 + i \hat{A}_2) (\hat{B}_1 - i \hat{B}_2) + \frac{1}{2\sqrt{2}} (\hat{A}_1 - i \hat{A}_2) (\hat{B}_1 + i \hat{B}_2) \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{A}_1 \hat{B}_2 - \hat{A}_2 \hat{B}_1) = \frac{i}{\sqrt{2}} \hat{A}_i \hat{B}_j \varepsilon_{ij3} = \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}})(1, 0).
\end{aligned}$$

A konečně pro složku $q = -1$ nalezneme

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\mathbf{A}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbf{B}}^{(1)} \right] (1, -1) &= \underbrace{(1, 1, -1, 0 | 1, -1)}_{-\frac{1}{\sqrt{2}}} \hat{A}(1, -1) \hat{B}(1, 0) + \underbrace{(1, 1, 0, -1 | 1, -1)}_{\frac{1}{\sqrt{2}}} \hat{A}(1, 0) \hat{B}(1, -1) \\
&= -\frac{1}{2} \left(\hat{A}_1 - i\hat{A}_2 \right) \hat{B}_3 + \frac{1}{2} \hat{A}_3 \left(\hat{B}_1 - i\hat{B}_2 \right) \\
&= \frac{1}{2} \left(\hat{A}_3 \hat{B}_1 - \hat{A}_1 \hat{B}_3 - i\hat{A}_3 \hat{B}_2 + i\hat{A}_2 \hat{B}_3 \right) \\
&= \frac{i}{2} \hat{A}_i \hat{B}_j (\varepsilon_{ij1} - i\varepsilon_{ij2}) = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\vec{\hat{A}} \times \vec{\hat{B}} \right) (1, -1).
\end{aligned}$$

Kapitola 5

Jemná struktura vodíku, anomální Zeemanův jev

5.1 Hamiltonián jemné struktury

V této kapitole se zaměříme na tzv. jemnou strukturu vodíku, která představuje relativistickou korekci energetických hladin elektronu v atomu vodíku s Hamiltoniánem

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2m_e} + V(r), \quad V(r) = -\frac{Q}{r}, \quad Q = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0},$$

a hodnotami energie

$$E_N \equiv E_{n,l} = -\frac{R}{N^2} = -\frac{R}{(n+l+1)^2}, \quad R = \frac{m_e Q^2}{2\hbar^2} = \frac{1}{2}m_e c^2 \alpha^2. \quad (5.1)$$

Zde jsme zavedli konstantu jemné struktury

$$\alpha = \frac{Q}{\hbar c} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}.$$

Hamiltonián jemné struktury je dán součtem tří členů

$$\hat{H}_{FS} = \hat{H}_{SO} + \hat{H}_R + \hat{H}_D,$$

kde operátor $\hat{H}_{SO}$ popisuje tzv. spin-orbitální vazbu

$$\hat{H}_{SO} = \frac{\alpha \hbar}{2m_e^2 c} \frac{1}{r^3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}, \quad (5.2)$$

operátor $\hat{H}_R$ představuje relativistickou korekci ke kinetické energii elektronu

$$\hat{H}_R = -\frac{\hat{P}^4}{8m_e^3 c^2}, \quad (5.3)$$

a $\hat{H}_D$ je tzv. Darwinův člen, který má původ v nerelativistické aproximaci Diracovy rovnice pro elektron v coulombickém poli

$$\hat{H}_D = \frac{e^2 \hbar^2}{8 \epsilon_0 m_e^2 c^2} \delta(\vec{r}). \quad (5.4)$$

Jejich tvar zdůvodníme v následujícím textu. Příspěvky k opravě vlastních čísel E_N od $\hat{H}_{SO}$, $\hat{H}_R$ a $\hat{H}_D$ do prvního řádu je možné určit zvlášť a s použitím vztahů pro nede degenerované vlastní hodnoty, přestože jsou původní hodnoty E_N degenerované. V podprostoru stavů s hlavním kvantovým číslem N je totiž možné zvolit bázi (tvořenou vlastními vektory celkového momentu hybnosti), ve které jsou zúžení všech tří operátorů diagonální. Jak uvidíme dále, opravy pocházející od jednotlivých členů jsou srovnatelně velké. Pro určení jemné struktury je tak nutné zahrnout všechny příspěvky, i když jsou fyzikálně rozdílné.

5.1.1 Spin-orbitální vazba

Spin-orbitální vazba popisuje interakci spinu elektronu a magnetického pole protonu. Začneme s klasickým modelem, ve kterém se elektron pohybuje rychlostí $\vec{v}$ okolo protonu. V klidové soustavě elektronu se proton pohybuje rychlostí $-\vec{v}$ a generuje magnetické pole

$$\vec{B}' = -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E} = \frac{e}{m_e c^2} \vec{E} \times \vec{p},$$

kde $\vec{E}$ je coulombické pole protonu

$$\vec{E} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}}{r^3}.$$

Magnetické pole v klidové soustavě elektronu můžeme přepsat do tvaru

$$\vec{B}' = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \frac{1}{r^3} \vec{L}$$

Interakci mezi vlastním magnetickým momentem elektronu a magnetickým polem protonu by pak měla odpovídat energie

$$H_{SO} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}'. \quad (5.5)$$

Skutečná energie je poloviční. Důvodem je, že veličiny ve vztahu (5.5) jsou vyjádřeny v klidové soustavě elektronu, která není inerciální. Při transformaci do laboratorní soustavy (tj. klidové soustavy protonu, který považujeme za nekonečně těžký) pak dochází k dodatečné rotaci vlastního magnetického momentu elektronu (tzv. Thomasova precese).

Přejdeme ke kvantově-mechanickému popisu. Vlastnímu magnetickému momentu elektronu odpovídá operátor

$$\hat{\mu}_S = -\frac{2\mu_0}{\hbar} \hat{S}, \quad \mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e}.$$

Hamiltonián popisující spin-orbitální vazbu bude po úpravách roven

$$\hat{H}_{SO} = \frac{\alpha\hbar}{2m_e^2 c} \frac{1}{r^3} \hat{S} \cdot \hat{L}.$$

5.1.2 Relativistická korekce kinetické energie

Relativistická kinetická energie elektronu má tvar

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2 \simeq \frac{p^2}{2m_e} - \frac{p^4}{8m_e^3 c^2} + \dots$$

Druhý člen Taylorova rozvoje představuje relativistickou korekci. Operátor $\hat{H}_R$ je tedy roven

$$\hat{H}_R = -\frac{\hat{P}^4}{8m_e^3 c^2}.$$

Odvození Darwinova členu zde provádět nebudeme.

5.2 Jemná struktura v 1. řádu poruchového rozvoje

Vliv $\hat{H}_{FS}$ na vlastní hodnoty E_N hamiltoniánu $\hat{H}_0$ spočítáme poruchově v 1. řádu. Vhodné vektory pro poruchový výpočet jsou společné vlastní vektory $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$, $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_3$ (kde $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$), které splňují rovnice

$$\begin{aligned}\hat{H}_0|N, l, j, m\rangle &= E_N|N, l, j, m\rangle, \\ \hat{L}^2|N, l, j, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|N, l, j, m\rangle, \\ \hat{J}^2|N, l, j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|N, l, j, m\rangle, \\ \hat{J}_3|N, l, j, m\rangle &= m\hbar|N, l, j, m\rangle.\end{aligned}\tag{5.6}$$

Kvantové číslo j nabývá hodnot $j = l \pm \frac{1}{2}$ pro $l \geq 1$ (resp. $j = \frac{1}{2}$ pro $l = 0$) a kvantové číslo m probíhá hodnoty $j, j-1, \dots, -j$. Všechny tři operátory $\hat{H}_{SO}$, $\hat{H}_R$ i $\hat{H}_D$ jsou skalární, takže jejich zúžení na podprostor s energií E_N jsou v bázi $|N, l, j, m\rangle$ reprezentovány diagonálními maticemi. Z tohoto důvodu pro poruchový výpočet můžeme použít vztah pro nede degenerovanou vlastní hodnotu, tj.

$$E_{FS}^{(1)} = E_{SO}^{(1)} + E_R^{(1)} + E_D^{(1)} = \langle \hat{H}_{SO} \rangle + \langle \hat{H}_R \rangle + \langle \hat{H}_D \rangle.$$

Poznamenejme, že operátory $\hat{H}_R$ a $\hat{H}_D$ jsou diagonální i v bázi $|N, l, m_l, m_s\rangle$ tvořené společnými vlastními vektory $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_3$ a $\hat{S}_3$. Operátor $\hat{H}_{SO}$ ale v této bázi diagonální není, protože nekomutuje s $\hat{L}_3$ ani $\hat{S}_3$ (pouze s jejich součtem $\hat{J}_3$).

Všechny střední hodnoty v této kapitole jsou počítány ve vlastních stavech $|N, l, j, m\rangle$. Radiální část vlnové funkce tohoto stavu $R_{Nl}(r)$ je stejná jako pro $|N, l, m_l, m_s\rangle$, protože závisí pouze na kvantových číslech N a l . Její explicitní tvar je uveden ve vztahu (4.18). Označíme-li $\chi_{Nl}(r) = rR_{Nl}(r)$, pak χ_{Nl} je vlastní funkce efektivního hamiltoniánu

$$\hat{H}_{ef} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} - \frac{Q}{r},\tag{5.7}$$

s okrajovou podmínkou $\chi_{Nl}(0) = 0$, tj. platí

$$\hat{H}_{ef}\chi_{Nl} = E_N\chi_{Nl}. \quad (5.8)$$

Střední hodnotu libovolné funkce $f(r)$ ve vlastním stavu $|N, l, j, m\rangle$ lze vyjádřit integrálem (χ_{Nl} je reálná funkce)

$$\langle f \rangle = \int_0^\infty \chi_{Nl}^2(r) f(r) dr. \quad (5.9)$$

5.2.1 Relativistická korekce kinetické energie

Začneme s opravou kinetické energie. Porucha $\hat{H}_R$ je skalární operátor, takže v podprostoru s daným hlavním kvantovým číslem N je reprezentována diagonálním operátorem. Můžeme tedy použít poruchovou teorii pro nedegenerovanou vlastní hodnotu, tj.

$$E_R^{(1)} = -\frac{1}{8m_e^3c^2} \langle \hat{P}^4 \rangle.$$

Pro výpočet střední hodnoty $\hat{P}^4$ využijeme vztah

$$\hat{P}^2|N, l, j, m\rangle = 2m_e(\hat{H}_0 - \hat{V})|N, l, j, m\rangle = 2m_e(E_N - \hat{V})|N, l, j, m\rangle,$$

z kterého plyne

$$E_R^{(1)} = -\frac{1}{2m_e c^2} \langle (E_N - \hat{V})^2 \rangle = -\frac{1}{2m_e c^2} (E_N^2 + 2E_N \langle \hat{V} \rangle + \langle \hat{V}^2 \rangle). \quad (5.10)$$

Tím jsme problém převedli na určení středních hodnot mocnin r . K tomu využijeme Feynmanův-Hellmannův vztah

$$\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \langle n(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | n(\lambda) \rangle, \quad (5.11)$$

který platí pro Hamiltonián závislý na parametru λ s vlastními hodnotami $E_n(\lambda)$ a vlastními vektory $|n(\lambda)\rangle$, které jsou normovány k jedné. Důkaz vzorce (5.11) je přímočarý. Vyjdeme ze vztahu $E_n(\lambda) = \langle n(\lambda) | \hat{H}(\lambda) | n(\lambda) \rangle$ a zderivujeme ho podle λ

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial \langle n(\lambda) |}{\partial \lambda} \right) \hat{H}(\lambda) | n(\lambda) \rangle + \langle n(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | n(\lambda) \rangle + \langle n(\lambda) | \hat{H}(\lambda) \left(\frac{\partial | n(\lambda) \rangle}{\partial \lambda} \right) \\ &= E_n(\lambda) \left(\left(\frac{\partial \langle n(\lambda) |}{\partial \lambda} \right) | n(\lambda) \rangle + \langle n(\lambda) | \left(\frac{\partial | n(\lambda) \rangle}{\partial \lambda} \right) \right) + \langle n(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | n(\lambda) \rangle. \end{aligned}$$

První dva členy na pravé straně představují derivaci normy vektoru $|n(\lambda)\rangle$, která je ale konstantně rovná 1, takže

$$\frac{\partial \langle n(\lambda) | n(\lambda) \rangle}{\partial \lambda} = 0,$$

čímž je tvrzení dokázáno.

Pro výpočet $\langle r^{-1} \rangle$ uvažujme efektivní Hamiltonián pro radiální část vlnové funkce elektronu v atomu vodíku (5.7) v závislosti na parametru $\lambda = Q$. Z Feynman-Hellmannova vztahu (5.11) dostaneme

$$\frac{\partial E_N}{\partial Q} = -\frac{m_e Q}{\hbar^2 N^2} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}_{ef}}{\partial Q} \right\rangle = -\langle r^{-1} \rangle,$$

takže pro střední hodnotu r^{-1} platí

$$\langle r^{-1} \rangle = \frac{m_e Q}{\hbar^2 N^2} = \frac{1}{N^2 a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e Q} = \frac{\hbar}{m_e c \alpha}. \quad (5.12)$$

K určení $\langle r^{-2} \rangle$ budeme chápat $\lambda = l$ jako spojitý parametr a obdobným postupem z (5.11) nalezneme

$$\frac{\partial E_N}{\partial l} = \frac{\partial E_N}{\partial N} \frac{\partial N}{\partial l} = \frac{2R}{N^3} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}_{ef}}{\partial l} \right\rangle = \frac{\hbar^2 (2l+1)}{2m_e} \langle r^{-2} \rangle.$$

Střední hodnota r^{-2} je pak po úpravách rovna

$$\langle r^{-2} \rangle = \frac{2}{N^3 (2l+1) a_0^2}. \quad (5.13)$$

Poznamenejme, že v tomto případě není postup příliš korektní, protože pro neceločíselné l nejsou radiální funkce (4.18) kvadraticky integrabilní. Nicméně, výsledek (5.13) je správný.

Dosazením do (5.10) za střední hodnoty z (5.12) a (5.13) pro relativistickou korekci vlastních čísel $\hat{H}_0$ dostaneme vztah

$$E_R^{(1)} = E_N \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{2N}{2l+1} - \frac{3}{4} \right). \quad (5.14)$$

Jedná se tedy o korekci řádu $\alpha^2 \sim 10^{-5}$.

5.2.2 Spin-orbitální vazba

Pro příspěvek spin-orbitální vazby $\hat{H}_{SO}$ (5.2) využijeme toho, že kety $|N, l, j, m\rangle$ jsou vlastní vektory operátoru $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$

$$\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} |N, l, j, m\rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) |N, l, j, m\rangle.$$

Oprava prvního řádu v důsledku spin-orbitální vazby je tedy

$$E_{SO}^{(1)} = \frac{\alpha \hbar^3}{4m_e^2 c} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \langle r^{-3} \rangle.$$

Pro $l = 0$ je $j = \frac{1}{2}$, takže platí

$$\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} |N, 0, \frac{1}{2}, m\rangle = 0.$$

Energie s -stavů se tedy v prvním řádu poruchové teorie vlivem spin-orbitální vazby nemění. Pro $l \neq 0$ musíme určit střední hodnotu r^{-3} . V tomto případě už nám Feynman-Hellmanův vztah nepomůže, protože $\hat{H}_{ef}$ neobsahuje žádné členy s r^{-3} . Pro radiální funkce je ale možné odvodit tzv. Kramersův vztah

$$\frac{s+1}{N^2} \langle r^s \rangle - (2s+1) a_0 \langle r^{s-1} \rangle + \frac{s}{4} ((2l+1)^2 - s^2) a_0^2 \langle r^{s-2} \rangle = 0, \quad (5.15)$$

který udává rekuretní relaci pro střední hodnoty mezi třemi po sobě jdoucími mocninami r . Pro $s = -1$ tedy platí

$$a_0 \langle r^{-2} \rangle - \frac{1}{4} ((2l+1)^2 - 1) a_0^2 \langle r^{-3} \rangle = 0.$$

Dosazením (5.13) za $\langle r^{-2} \rangle$ po úpravách najdeme

$$\langle r^{-3} \rangle = \frac{2}{N^3 a_0^3 l(l+1)(2l+1)}. \quad (5.16)$$

Celkem je oprava vlastního čísla v důsledku spin-orbitální vazby pro $l > 0$ rovna

$$E_{SO}^{(1)} = -E_N \frac{\alpha^2}{N} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} = \begin{cases} -E_N \frac{\alpha^2}{N} \frac{1}{(l+1)(2l+1)}, & j = l + \frac{1}{2} \\ E_N \frac{\alpha^2}{N} \frac{1}{l(2l+1)}, & j = l - \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (5.17)$$

Opět se jedná o korekci řádu α^2 .

5.2.3 Darwinův člen

Díky δ -funkci v Darwinově hamiltoniánu (5.4) je střední hodnota $\hat{H}_D$ ve stavu $|N, l, j, m\rangle$ rovna

$$\langle \hat{H}_D \rangle = E_D^{(1)} = \frac{e^2 \hbar^2}{8 \varepsilon_0 m_e^2 c^2} |\psi_{N,l,j,m}(0)|^2.$$

Ze vztahu pro radiální část vlnové funkce (4.18) je vidět, že $\psi_{N,l,j,m}(0) = 0$ pro $l \geq 1$. Darwinův člen tedy ovlivňuje pouze s -stavy. Z definice zobecněného Laguerrova polynomu

$$L_n^\beta(z) = \frac{1}{n!} e^z z^{-\beta} \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^{n+\beta}),$$

plyne

$$L_{N-1}^1(0) = N,$$

takže hodnota vlnové funkce s -stavu v počátku je

$$\psi_{N,0,\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}}(0) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3 N^3}}.$$

Po algebraických úpravách pak nalezneme hodnotu opravy (pouze pro $l = 0$)

$$E_D^{(1)} = -E_N \frac{\alpha^2}{N}. \quad (5.18)$$

Opět to je korekce řádu α^2 .

5.2.4 Jemná struktura vodíku

Nyní již máme všechny příspěvky k určení jemné struktury hladin vodíku. Začneme s případem $l > 0$, kdy

$$E_{FS}^{(1)} = E_R^{(1)} + E_{SO}^{(1)}.$$

Pro $j = l + \frac{1}{2}$ s použitím výsledků (5.14) a (5.17) dostaneme

$$E_{FS}^{(1)} = E_N \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{2N}{2l+1} - \frac{3}{4} - \frac{N}{(l+1)(2l+1)} \right) = E_N \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{N}{l+1} - \frac{3}{4} \right).$$

Podobně pro $j = l - \frac{1}{2}$ nalezneme

$$E_{FS}^{(1)} = E_N \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{2N}{2l+1} - \frac{3}{4} + \frac{N}{l(2l+1)} \right) = E_N \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{N}{l} - \frac{3}{4} \right).$$

Oba výsledky se dají zapsat ve tvaru

$$E_{FS}^{(1)} = E_N \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{N}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \quad (5.19)$$

Pro $l = 0$ díky (5.14) a (5.18) dostaneme

$$E_{FS}^{(1)} = E_R^{(1)} + E_D^{(1)} = E_N \frac{\alpha^2}{N^2} \left(N - \frac{3}{4} \right),$$

což opět souhlasí s výsledkem (5.19) pro $j = \frac{1}{2}$.

Při započítání jemné struktury energetické hladiny elektronu v atomu vodíku závisí kromě hlavního kvantového čísla N i na kvantovém čísle j

$$E_{N,j} = E_N \left[1 + \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{N}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (5.20)$$

Pro hladiny jemné struktury, respektive stavy $|N, l, j, m\rangle$, které jsou „správnými“ vlastními vektory $\hat{H}_0$ vzhledem k poruše $\hat{H}_{FS}$, se používá spektroskopické značení tvaru NL_j , kde

$L = S, P, D, F, \dots$, pro $l = 0, 1, 2, 3, \dots$. Základní hladina $1s$ se při započítání jemné struktury změní na $1S_{1/2}$ s energií

$$E_{1,\frac{1}{2}} = E_1 \left(1 + \frac{\alpha^2}{4} \right) \approx -13,6 \cdot (1 + 1,3 \cdot 10^{-5}) \text{ eV}.$$

První excitovaná hladina se rozdělí na dvě - stavy $2S_{1/2}$ a $2P_{1/2}$ mají stejnou energii

$$E_{2,\frac{1}{2}} = E_2 \left(1 + \frac{5\alpha^2}{16} \right) \approx -3,4 \cdot (1 + 1,7 \cdot 10^{-5}) \text{ eV},$$

stav $2P_{3/2}$ má energii

$$E_{2,\frac{3}{2}} = E_2 \left(1 + \frac{\alpha^2}{16} \right) \approx -3,4 \cdot (1 + 3 \cdot 10^{-6}) \text{ eV}.$$

Pro $N = 3$ dostaneme tři hladiny

$$\begin{aligned} 3S_{1/2}, 3P_{1/2} &\leftrightarrow E_{3,\frac{1}{2}} = E_3 \left(1 + \frac{\alpha^2}{4} \right) \approx -1,5 \cdot (1 + 1,3 \cdot 10^{-5}) \text{ eV} \\ 3P_{3/2}, 3D_{3/2} &\leftrightarrow E_{3,\frac{3}{2}} = E_3 \left(1 + \frac{\alpha^2}{12} \right) \approx -1,5 \cdot (1 + 4,4 \cdot 10^{-6}) \text{ eV} \\ 3D_{5/2} &\leftrightarrow E_{3,\frac{5}{2}} = E_3 \left(1 + \frac{\alpha^2}{36} \right) \approx -1,5 \cdot (1 + 1,5 \cdot 10^{-6}) \text{ eV} \end{aligned}$$

Pro ilustraci je na obrázku 5.1 znázorněna jemná struktura hladin s hlavním kvantovým číslem $N = 1, 2, 3$.

Poznamenejme, že Diracovu rovnici (tj. kvantovou relativistickou rovnici pro elektron se spinem $\frac{1}{2}$) lze v případě Coulombického potenciálu exaktně vyřešit. Energetické hladiny nalezené tímto postupem mají tvar

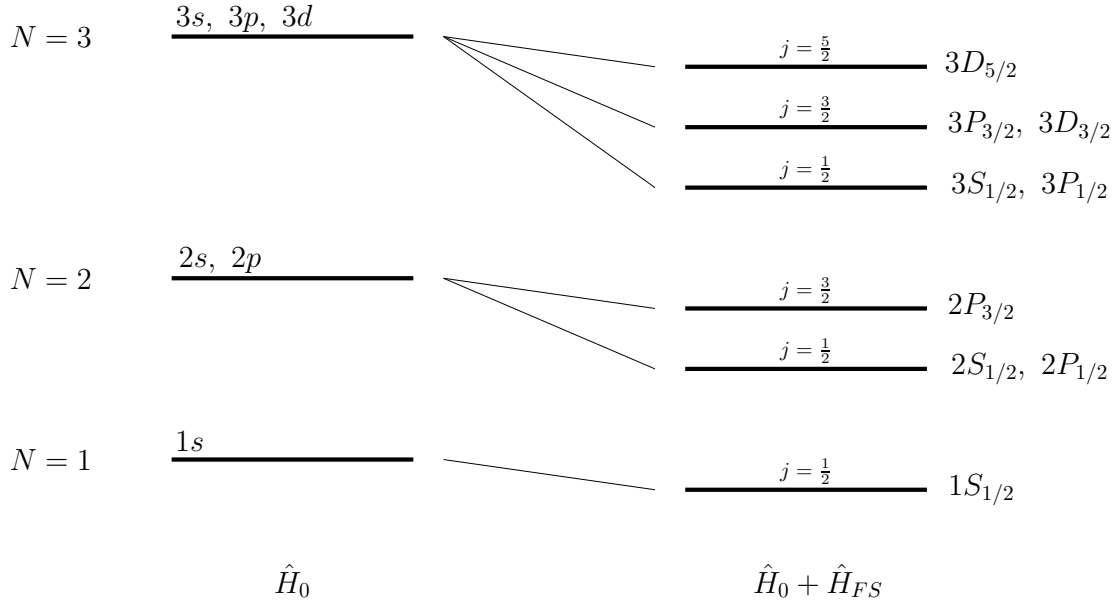
$$E_{N,j} = -m_e c^2 \left[1 - \left(1 + \left[\frac{\alpha}{N - j - \frac{1}{2} + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - \alpha^2}} \right]^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \right]. \quad (5.21)$$

Rozvojem do řádu α^4 dostaneme vztah (5.20). Energii elektronu ve vodíku ovlivňují další faktory, jako je hyperjemná struktura způsobená interakcí spinu elektronu a protonu, nebo Lambův posun vlivem kvantování elektromagnetického pole, které mají větší efekt než dodatečné členy v rozvoji přesné relativistické formule (5.21).

5.3 Anomální Zeemanův jev

Na závěr kapitoly se podíváme na tzv. anomální Zeemanův jev, tj. rozštěpení hladin vlivem slabého magnetického pole. Hamiltonián elektronu v magnetickém poli (Zeemanův člen) má tvar

$$\hat{H}_Z = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B},$$



Obrázek 5.1: Spektrální linie vodíku a jejich rozštěpení po započítání jemné struktury.

kde $\hat{\mu}$ je operátor celkového magnetického momentu elektronu (4.27). Díky sférické symetrii můžeme volit bez újmy na obecnosti $\vec{B} = (0, 0, B)$, takže Zeemanův člen je roven

$$\hat{H}_Z = -B\hat{\mu}_3 = \frac{\mu_0}{\hbar}B(\hat{L}_3 + 2\hat{S}_3). \quad (5.22)$$

Ve slabém magnetickém poli je příspěvek jemné struktury dominantní a $\hat{H}_Z$ je třeba brát jako dodatečnou poruchu, kterou opět započítáme v 1. řádu. Střední hodnota třetí složky celkového magnetického momentu je spočítána ve Cvičení (21). S využitím výsledku (4.28) můžeme zapsat příspěvek Zeemanova členu ve tvaru

$$E_Z^{(1)} = \mu_0 B m g_j,$$

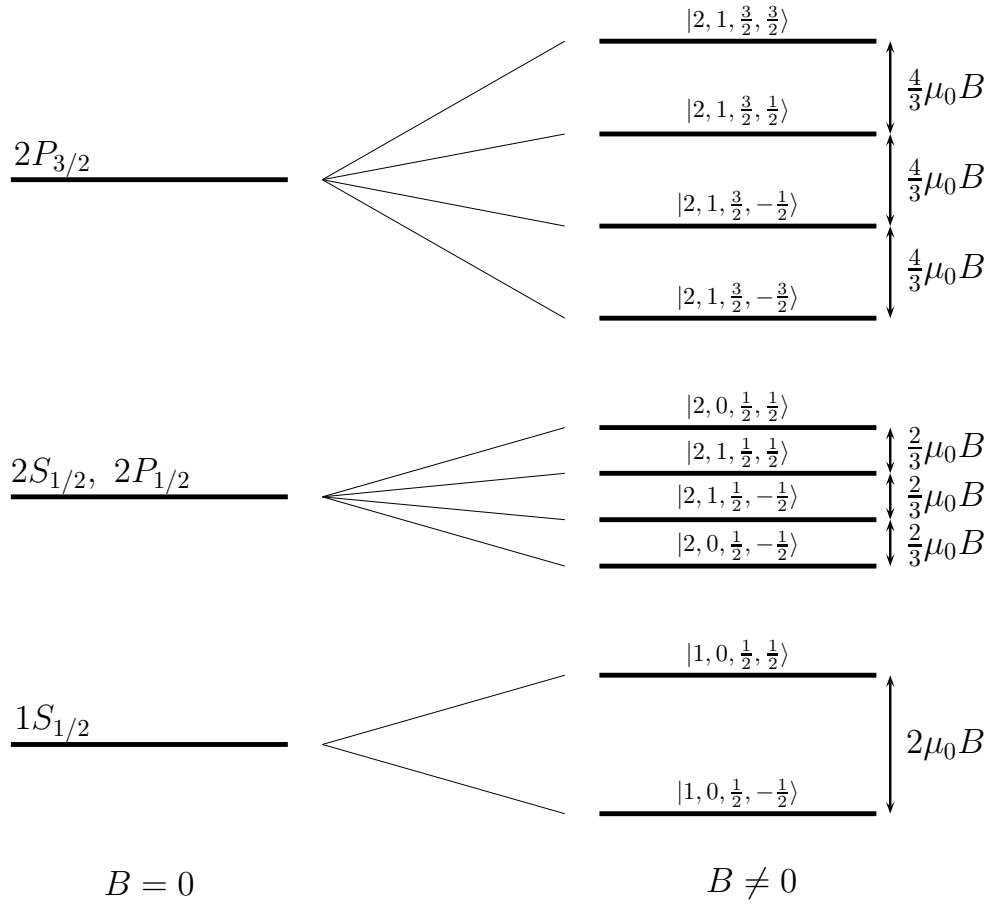
kde g_j je Landého faktor elektronu (4.29)

$$g_j = \frac{3}{2} + \frac{\frac{3}{4} - l(l+1)}{2j(j+1)} = \begin{cases} 1 \pm \frac{1}{2l+1}, & j = l \pm \frac{1}{2}, \quad l > 0 \\ 2, & l = 0 \end{cases}.$$

Celková energie elektronu v atomu vodíku ve slabém magnetickém poli je pak rovna

$$E_{N,j,m} = E_N + E_{FS}^{(1)} + E_Z^{(1)} = E_N \left[1 + \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{N}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] + \mu_0 B m g_j.$$

Ve slabém magnetickém poli se hladina jemné struktury $E_{N,j}$ rozštěpí na multiplet $2j + 1$ hladin, tj. sudý počet, protože j je polocelé. Vzdálenost hladin navíc závisí na kvantovém



Obrázek 5.2: Rozštěpení jemné struktury spektrálních linií vodíku vlivem slabého magnetického pole.

číslu j . Pro $j = l + \frac{1}{2}$ je rozdíl hladin $\Delta E_+ = \mu_0 B \frac{2l+2}{2l+1}$, ve druhém případě ($j = l - \frac{1}{2}$) je vzdálenost hladin rovna $\Delta E_- = \mu_0 B \frac{2l}{2l+1}$. Toto nerovnoměrné rozštěpení spektrálních linií ve slabém magnetickém poli se nazývá *anomální Zeemanův jev*. Rozštěpení hladin jemné struktury $1S_{1/2}$, $2S_{1/2}$, $2P_{1/2}$ a $2P_{3/2}$ je znázorněno na obrázku 5.2.

5.4 Příklady

Cvičení 24. Dokažte Kramersův vztah

$$\frac{s+1}{N^2} \langle r^s \rangle - (2s+1) a_0 \langle r^{s-1} \rangle + \frac{s}{4} ((2l+1)^2 - s^2) a_0^2 \langle r^{s-2} \rangle = 0. \quad (5.23)$$

Návod: Pro výpočet střední hodnoty použijeme vztah (5.9). Rovnici na vlastní funkce $\hat{H}_{ef}$

(5.8) lze upravit do tvaru ($\chi \equiv \chi_{NI}$)

$$\chi'' = \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{a_0 r} + \frac{1}{N^2 a_0^2} \right) \chi. \quad (5.24)$$

Vynásobením vztahu (5.24) $r^s \chi$ a integrací dostaneme

$$\int_0^\infty \chi r^s \chi'' dr = l(l+1) \langle r^{s-2} \rangle - \frac{2}{a_0} \langle r^{s-1} \rangle + \frac{1}{N^2 a_0^2} \langle r^s \rangle. \quad (5.25)$$

Levou stranu upravíme per partes, využijeme toho že $\chi(0) = 0$ a v nekonečnu klesá exponenciálně, takže okrajový člen vymizí

$$\int_0^\infty \chi r^s \chi'' dr = \left\{ \begin{array}{ll} f = \chi r^s & g' = \chi'' \\ f' = \chi' r^s + s \chi r^{s-1} & g = \chi' \end{array} \right\} = - \int_0^\infty \chi' r^s \chi' dr - s \int_0^\infty \chi r^{s-1} \chi' dr. \quad (5.26)$$

Druhý integrál na pravé straně upravíme opět per partes

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \chi r^{s-1} \chi' dr &= \left\{ \begin{array}{ll} f = \chi r^{s-1} & g' = \chi' \\ f' = \chi' r^{s-1} + (s-1) \chi r^{s-2} & g = \chi \end{array} \right\} \\ &= - \int_0^\infty \chi' r^{s-1} \chi dr - (s-1) \int_0^\infty \chi^2 r^{s-2} dr. \end{aligned}$$

Odsud plyne (záměnou $s-1 \rightarrow s$) vztah

$$\int_0^\infty \chi r^s \chi' dr = -\frac{s}{2} \langle r^{s-1} \rangle \quad (5.27)$$

První integrál na pravé straně (5.26) rovněž upravíme per partes

$$\int_0^\infty r^s \chi'^2 dr = \left\{ \begin{array}{ll} f = \chi'^2 & g' = r^s \\ f' = 2\chi' \chi'' & g = \frac{r^{s+1}}{s+1} \end{array} \right\} = -\frac{2}{s+1} \int_0^\infty \chi' r^{s+1} \chi'' dr.$$

Za χ'' dosadíme z rovnice (5.24) a použijeme vztah (5.27)

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \chi' r^s \chi' dr &= -\frac{2}{s+1} \int_0^\infty \chi' r^{s+1} \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{a_0 r} + \frac{1}{N^2 a_0^2} \right) \chi dr \\ &= \frac{2}{s+1} \left(\frac{l(l+1)(s-1)}{2} \langle r^{s-2} \rangle - \frac{s}{a_0} \langle r^{s-1} \rangle + \frac{s+1}{2a_0^2 N^2} \langle r^s \rangle \right). \end{aligned}$$

Dosazením tohoto výsledku a (5.27) do vztahu (5.26) dostaneme

$$\int_0^\infty \chi r^s \chi'' dr = (s-1) \left(\frac{s}{2} - \frac{l(l+1)}{s+1} \right) \langle r^{s-2} \rangle + \frac{2s}{a_0(s+1)} \langle r^{s-1} \rangle - \frac{1}{N^2 a_0^2} \langle r^s \rangle,$$

a porovnáním s pravou stranou (5.25) odvodíme Kramersův vztah.

Kapitola 6

Diskrétní symetrie, kalibrační invariance

6.1 Prostorová inverze

V klasické mechanice prostorová inverze mění znaménko vektorů, např.

$$\vec{x} \xrightarrow{\mathcal{P}} \vec{x}' = -\vec{x}, \quad \vec{p} \xrightarrow{\mathcal{P}} \vec{p}' = -\vec{p}. \quad (6.1)$$

Naopak pseudovektory (axiální vektory) se při prostorové inverzi nemění, např. moment hybnosti zůstává stejný

$$\vec{l} \xrightarrow{\mathcal{P}} \vec{l}' = \vec{l}. \quad (6.2)$$

Zde uvažujeme fyzikální konvenci, kdy orientace prostoru je totožná s orientací báze. Při prostorové inverzi v $\mathbb{R}^3$ se mění orientace báze a tím i prostoru. Skaláry se při inverzi nemění, pseudoskaláry (např. skalární součin vektoru a pseudovektoru) mění znaménko. Obecněji, tenzory sudého řádu se při inverzi nemění, tenzory lichého řádu změni znaménko. Pro pseudotenzory je to naopak.

V kvantové mechanice je prostorová inverze reprezentována operátorem parity $\hat{\mathcal{P}}$. Ten lze zvolit tak, že platí

$$\hat{\mathcal{P}}^2 = 1 \quad \implies \quad \hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}^{-1}.$$

Protože $\hat{\vec{X}}$ a $\hat{\vec{P}}$ jsou vektorové operátory, transformují se při inverzi os analogickým způsobem jako v klasické mechanice (6.1)

$$\begin{aligned} \hat{\vec{X}}' &= \hat{\mathcal{P}} \hat{\vec{X}} \hat{\mathcal{P}}^\dagger = -\hat{\vec{X}}, \\ \hat{\vec{P}}' &= \hat{\mathcal{P}} \hat{\vec{P}} \hat{\mathcal{P}}^\dagger = -\hat{\vec{P}}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Inverze zachovává kanonické komutační relace, tj.

$$[\hat{X}'_j, \hat{P}'_k] = [\hat{X}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\delta_{jk},$$

což může upravit do tvaru

$$[\hat{X}'_j, \hat{P}'_k] = \hat{\mathcal{P}} [\hat{X}_j, \hat{P}_k] \hat{\mathcal{P}}^\dagger = \hat{\mathcal{P}} (i\hbar\delta_{jk}) \hat{\mathcal{P}}^\dagger \stackrel{!}{=} i\hbar\delta_{jk}. \quad (6.4)$$

Odsud pak plyne, že $\hat{\mathcal{P}}$ je lineární unitární operátor. Antiunitární (tj. unitární antilineární) operátor totiž působí jako unitární doplněný o komplexní sdružení. Pokud by operátor $\hat{\mathcal{P}}$ byl antiunitární, muselo by se na pravé straně (6.4) změnit znaménko.

Operátor parity je tedy unitární a hermitovský

$$\hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}^\dagger = \hat{\mathcal{P}}^{-1}.$$

Jeho vlastní čísla jsou $\pi = \pm 1$, která se často také označují jako parita. Ze vztahu (6.3) plyne, že operátor polohy antikomutuje s $\hat{\mathcal{P}}$

$$\{\hat{\mathcal{P}}, \hat{X}\} = 0.$$

Odsud dostaneme

$$\hat{X}_j \hat{\mathcal{P}} |\vec{x}\rangle = -\hat{\mathcal{P}} \hat{X}_j |\vec{x}\rangle = -x_j \hat{\mathcal{P}} |\vec{x}\rangle,$$

takže platí

$$\hat{\mathcal{P}} |\vec{x}\rangle = |-\vec{x}\rangle.$$

Pro změnu vlnové funkce v x -reprezentaci při prostorové inverzi plyne

$$\psi'(\vec{x}) = (\hat{\mathcal{P}}\psi)(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \hat{\mathcal{P}} | \psi \rangle = \langle -\vec{x} | \psi \rangle = \psi(-\vec{x}).$$

Vlastní funkce operátoru parity jsou tedy sudé (s vlastním číslem $+1$) nebo liché (s vlastním číslem -1)

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}\psi_+(\vec{x}) &= \psi_+(-\vec{x}) = \psi_+(\vec{x}), \\ \hat{\mathcal{P}}\psi_-(\vec{x}) &= \psi_-(-\vec{x}) = -\psi_-(\vec{x}). \end{aligned}$$

Uvažujme hamiltonián, který se při prostorové inverzi nemění

$$\hat{H}' = \hat{\mathcal{P}} \hat{H} \hat{\mathcal{P}}^\dagger = \hat{H}.$$

Hamiltonián je pak kompatibilní s operátorem parity

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{H}] = 0.$$

Nechť E_n je nedegenerované vlastní číslo $\hat{H}$. Snadno se ukáže, že příslušný vlastní vektor $|n\rangle$ je současně vlastním vektorem $\hat{\mathcal{P}}$. Zavedeme si vektory

$$|n\pm\rangle = \frac{1}{2} (1 \pm \hat{\mathcal{P}}) |n\rangle. \quad (6.5)$$

Kety jsou jak vlastní vektory parity

$$\hat{\mathcal{P}} |n\pm\rangle = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathcal{P}} \pm \underbrace{\hat{\mathcal{P}}^2}_1 \right) |n\rangle = \pm |n\pm\rangle,$$

tak i hamiltoniánu s vlastním číslem E_n

$$\hat{H}|n\pm\rangle = \frac{1}{2}(1 \pm \hat{\mathcal{P}})\hat{H}|n\rangle = E_n|n\pm\rangle.$$

Protože energie E_n je podle předpokladů nedegenerovaná, musí být kety $|n\pm\rangle$ pouze násobky ketu $|n\rangle$, tj.

$$|n\pm\rangle = \alpha_{\pm}|n\rangle.$$

Z definice ketů (6.5) vidíme, že pro koeficienty $\alpha_{\pm}$ musí platit

$$\begin{aligned} |n+\rangle + |n-\rangle &= (\alpha_+ + \alpha_-)|n\rangle = |n\rangle \implies \alpha_+ + \alpha_- = 1, \\ |n+\rangle - |n-\rangle &= (\alpha_+ - \alpha_-)|n\rangle = \hat{\mathcal{P}}|n\rangle \implies \alpha_+ - \alpha_- = \pm 1. \end{aligned}$$

Poslední rovnost plyne z toho, že vlastní čísla operátoru parity jsou ± 1 . Pro horní znaménko dostaneme řešení $\alpha_+ = 1$, $\alpha_- = 0$ a vlastní vektor je sudý, tj. $\hat{\mathcal{P}}|n\rangle = |n\rangle$. V případě dolního znaménka je řešení $\alpha_+ = 0$, $\alpha_- = 1$ a vlastní vektor je lichý, tj. $\hat{\mathcal{P}}|n\rangle = -|n\rangle$. Pokud má hamiltonián kompatibilní s $\hat{\mathcal{P}}$ nedegenerované spektrum, pak všechny jeho vlastní funkce jsou i vlastní funkce $\hat{\mathcal{P}}$, jsou tedy sudé nebo liché. Příkladem může být hamiltonián lineárního harmonického oscilátoru. Protože potenciál je sudá funkce, při prostorové inverzi se $\hat{H}$ nemění. Vlastní funkce jsou sudé pro sudé kvantové číslo n a liché pro liché n . V případě degenerované vlastní hodnoty příslušné vlastní vektory nemusí mít definovanou paritu.

Operátor orbitálního momentu hybnosti se při prostorové inverzi nemění (stejně jako v klasické mechanice (6.2))

$$\hat{\vec{L}}' = \hat{\mathcal{P}}\hat{\vec{L}}\hat{\mathcal{P}}^\dagger = \hat{\vec{L}},$$

takže parita a moment hybnosti komutují

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{\vec{L}}] = 0.$$

Kulové funkce jsou současně i vlastní funkce $\hat{\mathcal{P}}$, přičemž platí

$$\hat{\mathcal{P}}Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm}.$$

Poznamenejme, že každý moment hybnosti (např. spin $\hat{\vec{S}}$, celkový moment hybnosti $\hat{\vec{J}}$) je kompatibilní s operátorem parity a při prostorové inverzi se nemění.

Řekneme, že operátor $\hat{A}$ je sudý, pokud se při prostorové inverzi nemění

$$\hat{A}' = \hat{\mathcal{P}}\hat{A}\hat{\mathcal{P}}^\dagger = \hat{A}.$$

Analogicky zavedeme lichý operátor $\hat{B}$, ten se při prostorové inverzi vynásobí -1

$$\hat{B}' = \hat{\mathcal{P}}\hat{B}\hat{\mathcal{P}}^\dagger = -\hat{B}.$$

Příkladem sudých operátorů jsou tenzorové operátory sudého řádu, nebo pseudotenzory lichého řádu. Příkladem lichých operátorů jsou tenzorové operátory lichého řádu, a pseudotenzory sudého řádu. Sudé operátory komutují s operátorem parity

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{A}] = 0,$$

liché operátory s paritou antikomutují

$$\{\hat{\mathcal{P}}, \hat{A}\} = 0.$$

Pro maticové elementy sudých a lichých operátorů mezi stavy s dobře definovanou paritou lze snadno odvodit výběrová pravidla. Nechtě kety $|i\rangle$, $|j\rangle$ mají paritu π_i a π_j , tj. platí

$$\hat{\mathcal{P}}|i\rangle = \pi_i|i\rangle, \quad \hat{\mathcal{P}}|j\rangle = \pi_j|j\rangle.$$

Pro maticové elementy sudého operátoru $\hat{A}$ pak platí

$$\langle i|\hat{A}|j\rangle = \langle i|\hat{A}\hat{\mathcal{P}}^2|j\rangle = \langle i|\hat{\mathcal{P}}\hat{A}\hat{\mathcal{P}}|j\rangle = \pi_i\pi_j\langle i|\hat{A}|j\rangle, \quad (6.6)$$

mohou tedy být nenulové jen pokud stavy $|i\rangle$ a $|j\rangle$ mají stejnou paritu $\pi_i = \pi_j$. V případě lichého operátoru $\hat{B}$ analogicky nalezneme

$$\langle i|\hat{B}|j\rangle = \langle i|\hat{B}\hat{\mathcal{P}}^2|j\rangle = -\langle i|\hat{\mathcal{P}}\hat{B}\hat{\mathcal{P}}|j\rangle = -\pi_i\pi_j\langle i|\hat{B}|j\rangle, \quad (6.7)$$

takže nenulové maticové elementy mohou být pouze mezi stavy s opačnou paritou.

Tato výběrová pravidla lze využít např. při výpočtu dipólových přechodů mezi stavy s danou paritou $|\psi\rangle$ a $|\phi\rangle$. Amplitudy přechodu jsou úměrné maticovým elementům $\langle\phi|\hat{X}|\psi\rangle$. Protože operátor polohy je lichý, jsou amplitudy nenulové pouze pokud $|\psi\rangle$ a $|\phi\rangle$ mají opačnou paritu. Speciálně, dipólové přechody v atomu vodíku mezi stavy $|N, l, m\rangle$ a $|N, l', m'\rangle$ jsou možné jen pokud l a l' mají jinou paritu, tj. $\Delta l = l' - l$ musí být liché číslo. To jsme ostatně ukázali v příkladu 22 (kde nám navíc vyšlo $\Delta = \pm 1$ z výběrových pravidel pro CG koeficienty), ale argument, že maticový element je nulový pro $l = l'$ byl podstatně složitější (příslušný CG koeficient je nulový, ale ne kvůli výběrovým pravidlům).

6.2 Časová inverze

V klasické mechanice časové inverzi odpovídá změna

$$\vec{x} \xrightarrow{\mathcal{T}} \vec{x}' = \vec{x}, \quad \vec{p} \xrightarrow{\mathcal{T}} \vec{p}' = -\vec{p}. \quad (6.8)$$

Tím jsou určeny transformační vlastnosti všech pozorovatelných, např. moment hybnosti mění znaménko

$$\vec{l} \xrightarrow{\mathcal{T}} \vec{l}' = -\vec{l}, \quad (6.9)$$

kinetická energie se nemění atd.

V kvantové mechanice je časová inverze reprezentována operátorem $\hat{\mathcal{T}}$. Časově invertovaný stav ke stavu $|\psi\rangle$ označíme

$$|\psi'\rangle = \hat{\mathcal{T}}|\psi\rangle.$$

Analogií vztahů (6.8) a (6.9) v kvantové mechanice jsou transformace operátorů

$$\hat{X}' = \hat{\mathcal{T}}\hat{X}\hat{\mathcal{T}}^\dagger = \hat{X}, \quad (6.10)$$

$$\hat{P}' = \hat{\mathcal{T}}\hat{P}\hat{\mathcal{T}}^\dagger = -\hat{P}, \quad (6.11)$$

$$\hat{L}' = \hat{\mathcal{T}}\hat{L}\hat{\mathcal{T}}^\dagger = -\hat{L}. \quad (6.12)$$

Z posledního vztahu plyne, že operátor $\hat{\mathcal{T}}$ musí být unitární antilineární. Vyjdeme z komutačních relací pro složky momentu hybnosti

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k,$$

a na obě strany aplikujeme $\hat{\mathcal{T}}$ zleva a $\hat{\mathcal{T}}^\dagger$ zprava. Levá strana se nezmění

$$\hat{\mathcal{T}}[\hat{L}_i, \hat{L}_j]\hat{\mathcal{T}}^\dagger = \hat{\mathcal{T}}(\hat{L}_i\hat{\mathcal{T}}^\dagger\hat{\mathcal{T}}\hat{L}_j - \hat{L}_j\hat{\mathcal{T}}^\dagger\hat{\mathcal{T}}\hat{L}_i)\hat{\mathcal{T}}^\dagger = (-\hat{L}_i)(-\hat{L}_j) - (-\hat{L}_j)(-\hat{L}_i) = [\hat{L}_i, \hat{L}_j],$$

takže musí platit

$$i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k = \hat{\mathcal{T}}i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{\mathcal{T}}^\dagger = \hat{\mathcal{T}}i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{\mathcal{T}}^\dagger\hat{\mathcal{T}}\hat{L}_k\hat{\mathcal{T}}^\dagger = -\hat{\mathcal{T}}i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{\mathcal{T}}^\dagger\hat{L}_k,$$

což lze splnit pouze s antilineárním operátorem $\hat{\mathcal{T}}$. Díky tomu, že $\hat{\mathcal{T}}$ je antiunitární, pro maticové elementy pozorovatelných při časové inverzi platí

$$\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle = \langle\phi'|\hat{A}'|\psi'\rangle.$$

Uvažujme nyní částici bez spinu. Ze vztahů (6.10) a (6.11) plyne, že operátor časové inverze působí na zobecněné vlastní vektory polohy a hybnosti způsobem

$$\hat{\mathcal{T}}|\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle, \quad \hat{\mathcal{T}}|\vec{p}\rangle = |-\vec{p}\rangle. \quad (6.13)$$

Pro bezspinovou částici pak platí

$$\hat{\mathcal{T}}^2 = 1 \quad \implies \quad \hat{\mathcal{T}} = \hat{\mathcal{T}}^\dagger = \hat{\mathcal{T}}^{-1}.$$

Ze vztahů (6.13) pak pro vlnovou funkci bezspinové částice v x -reprezentaci nalezneme

$$\psi'(\vec{x}) = \langle\vec{x}|\hat{\mathcal{T}}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\mathcal{T}}^\dagger|\vec{x}\rangle = \langle\psi|\hat{\mathcal{T}}|\vec{x}\rangle = \langle\psi|\vec{x}\rangle = \overline{\psi}(\vec{x}).$$

V p -reprezentaci analogickým postupem najdeme

$$\tilde{\psi}'(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\hat{\mathcal{T}}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\mathcal{T}}^\dagger|\vec{p}\rangle = \langle\psi|\hat{\mathcal{T}}|\vec{p}\rangle = \langle\psi|-\vec{p}\rangle = \overline{\tilde{\psi}}(-\vec{p})$$

Pro částici se spinem velikosti s je situace složitější, protože ho musíme zahrnout do popisu stavu. Operátor $\hat{\mathcal{T}}$ působí na kety $|\vec{x}, s, m\rangle$ (m určuje projekci spinu do osy z) podle vztahu

$$\hat{\mathcal{T}}|\vec{x}, s, m\rangle = \sum_{m'} \mathbb{T}_{m',m}^{(s)} |\vec{x}, s, m'\rangle, \quad (6.14)$$

kde $\mathbb{T}_{m',m}^{(s)}$ jsou prvky nějaké unitární matice. Její podobu je možné odvodit z transformace operátoru spinu při časové inverzi. Vztah (6.12) platí nejenom pro orbitální moment hybnosti, ale pro jakýkoli moment hybnosti. Odsud pak plyne, že operátor časové inverze antikomutuje s momentem hybnosti

$$\{\hat{\mathcal{T}}, \hat{J}_k\} = 0.$$

To znamená, že platí identita

$$\hat{\mathcal{T}} \hat{J}_k |\vec{x}, s, m\rangle = -\hat{J}_k \hat{\mathcal{T}} |\vec{x}, s, m\rangle,$$

kterou můžeme přepsat pomocí matic $\mathbb{T}^{(s)}$ a $\mathbb{J}_k^{(s)}$ (2.8) do podoby (komplexní sdružení je způsobeno antilinearitou $\hat{\mathcal{T}}$)

$$\mathbb{T}^{(s)} \bar{\mathbb{J}}_k^{(s)} = -\mathbb{J}_k^{(s)} \mathbb{T}^{(s)}.$$

Z explicitního tvaru matic operátorů momentu hybnosti velikosti s pak lze odvodit tvar matice $\mathbb{T}^{(s)}$

$$\mathbb{T}_{m',m}^{(s)} = \delta_{m',-m} e^{im\pi}. \quad (6.15)$$

Například pro částice se spinem $1/2$, resp. 1 , platí

$$\mathbb{T}^{(1/2)} = \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbb{T}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Pokud popíšeme stav částice se spinem s pomocí $2s+1$ komponentní vlnové funkce, pak v x -reprezentaci pro časovou inverzi platí

$$\Psi'(\vec{x}) = \mathbb{T}^{(s)} \bar{\Psi}(\vec{x}).$$

V p -reprezentaci dostaneme

$$\tilde{\Psi}'(\vec{p}) = \mathbb{T}^{(s)} \bar{\tilde{\Psi}}(-\vec{p}).$$

Ukážeme, že pro operátor časové inverze platí

$$\hat{\mathcal{T}}^2 = (-1)^{2s} \hat{I}.$$

Abstraktní ket rozepíšeme pomocí $2s+1$ komponentní vlnové funkce v x -reprezentaci takto

$$|\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \sum_m \Psi_m(\vec{x}) |\vec{x}, s, m\rangle.$$

Operátor časové inverze na něj působí následujícím způsobem

$$\hat{\mathcal{T}}|\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \sum_{m,m'} \bar{\Psi}_m(\vec{x}) \mathbb{T}_{m',m}^{(s)} |\vec{x}, s, m'\rangle.$$

Na stav $\hat{\mathcal{T}}|\Psi\rangle$ zapůsobíme ještě jednou operátorem $\hat{\mathcal{T}}$ a nalezneme

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{T}}^2|\Psi\rangle &= \hat{\mathcal{T}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \sum_{m,m'} \bar{\Psi}_m(\vec{x}) \mathbb{T}_{m',m}^{(s)} |\vec{x}, s, m'\rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \sum_{m,m',m''} \Psi_m(\vec{x}) \overline{\mathbb{T}_{m',m}^{(s)}} \mathbb{T}_{m'',m'}^{(s)} |\vec{x}, s, m''\rangle. \end{aligned}$$

S použitím maticových elementů (6.15) dostaneme

$$\sum_{m',m''} \overline{\mathbb{T}_{m',m}^{(s)}} \mathbb{T}_{m'',m'}^{(s)} = \sum_{m',m''} \delta_{m',-m} e^{-im\pi} \delta_{m'',-m'} e^{im'\pi} = e^{-2im\pi} = (-1)^{2m} = (-1)^{2s},$$

kde v poslední rovnosti jsme využili faktu, že $2m$ a $2s$ mají stejnou paritu. Odsud už skutečně plyne

$$\hat{\mathcal{T}}^2|\Psi\rangle = (-1)^{2s}|\Psi\rangle,$$

tedy kvadrát operátoru časové inverze je roven identitě pouze pro částice s celočíselným spinem, pro částice s poločíselným spinem je výsledek mínus identita. Důsledkem tohoto faktu je tzv. Kramersova degenerace — pokud je hamiltonián N částic, mezi kterými je lichý počet fermionů, invariantní vůči časové inverzi, tj. platí

$$[\hat{\mathcal{T}}, \hat{H}] = 0,$$

pak jsou všechny energetické hladiny degenerované. Tvrzení se dokáže sporem. Nechť E je nedegenerovaná hladina a $|\psi\rangle$ příslušný vlastní vektor $\hat{H}$. Vzhledem k T -invarianci je i $|\psi'\rangle$ vlastní vektor se stejnou energií

$$\hat{H}|\psi'\rangle = \hat{H}\hat{\mathcal{T}}|\psi\rangle = \hat{\mathcal{T}}\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi'\rangle.$$

Protože podle předpokladu je hladina E nedegenerovaná, musí platit

$$\hat{\mathcal{T}}|\psi\rangle = |\psi'\rangle = \alpha|\psi\rangle.$$

Aplikací operátoru časové inverze na tuto rovnici dostaneme

$$\hat{\mathcal{T}}^2|\psi\rangle = \hat{\mathcal{T}}\alpha|\psi\rangle = \bar{\alpha}\hat{\mathcal{T}}|\psi\rangle = |\alpha|^2|\psi\rangle. \quad (6.16)$$

Operátor časové inverze systému více částic je roven tenzorovému součinu

$$\hat{\mathcal{T}} = \hat{\mathcal{T}}_{(1)} \otimes \dots \otimes \hat{\mathcal{T}}_{(N)},$$

kde $\hat{\mathcal{T}}_{(k)}$ je operátor časové inverze k -té částice. Pro kvadrát pak dostaneme

$$\hat{\mathcal{T}}^2 = \hat{\mathcal{T}}_{(1)}^2 \otimes \dots \otimes \hat{\mathcal{T}}_{(N)}^2 = (-1)^f \hat{I},$$

kde f je počet fermionů v systému. Pro liché f je $\hat{\mathcal{T}}^2 = -\hat{I}$ a rovnice (6.16) nelze splnit. Hladina E pak musí nutně být degenerovaná.

6.3 Kalibrační invariance

Na závěr této kapitoly se podíváme na kalibrační invarianci, která hraje v kvantové teorii důležitou roli, zejména v kvantové teorii pole. Omezíme se na bezspinovou částici v elektromagnetickém poli s elektrickou intenzitou $\vec{E}$ a magnetickou indukcí $\vec{B}$. Ty můžeme popsat pomocí potenciálů $\vec{A}$ a φ vztahy

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla}\varphi, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}.$$

$\vec{E}$ a $\vec{B}$, a tedy i Maxwellovy rovnice jsou invariantní vůči kalibrační transformaci

$$\begin{aligned} \vec{A} &\longrightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda, \\ \varphi &\longrightarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \end{aligned} \quad (6.17)$$

kde Λ je dostatečně hladká funkce $\vec{x}$ a t .

Uvažujme Schrödingerovu rovnici pro nabitou částici v elektromagnetickém poli

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (6.18)$$

Hamiltonián kvantové částice s nábojem q v poli popsaném potenciály $\vec{A}$, φ má tvar

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{P}^2 - \frac{q}{M}\vec{A} \cdot \hat{\vec{P}} + i\frac{\hbar q}{2M}\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{q^2}{2M}A^2 + q\varphi. \quad (6.19)$$

Označme $\hat{H}'$ hamiltonián, který vznikne záměnou $\vec{A} \rightarrow \vec{A}'$, $\varphi \rightarrow \varphi'$. S využitím kalibračních transformací (6.17) ho vyjádříme pomocí původních potenciálů a nalezneme

$$\begin{aligned} \hat{H}' = \hat{H} - \frac{q}{M}(\vec{\nabla}\Lambda) \cdot \hat{\vec{P}} + i\frac{\hbar q}{2M}\Delta\Lambda + \frac{q^2}{M}\vec{A} \cdot (\vec{\nabla}\Lambda) + \frac{q^2}{2M}(\vec{\nabla}\Lambda) \cdot (\vec{\nabla}\Lambda) - q\frac{\partial \Lambda}{\partial t}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Protože hamiltonián není invariantní vůči kalibrační transformaci, není vůči ní invariantní ani Schrödingerova rovnice. Ukážeme si, že když uděláme jistou lokální kalibrační transformaci stavu $\psi \rightarrow \psi'$, pak v nové kalibraci bude opět platit Schrödingerova rovnice ve tvaru

$$\hat{H}'\psi' = i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t}. \quad (6.21)$$

Správná lokální kalibrační transformace stavu je dána unitárním operátorem $\hat{\mathcal{U}}$

$$\psi'(\vec{x}, t) = \hat{\mathcal{U}}\psi(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}q\Lambda(\vec{x}, t)}\psi(\vec{x}, t). \quad (6.22)$$

Ověříme, že pro takové ψ' bude platit Schrödingerova rovnice (6.21) s hamiltoniánem (6.20). Vyjdme ze Schrödingerovy rovnice (6.18), kam za ψ dosadíme $\hat{\mathcal{U}}^\dagger\psi'$

$$\hat{H}\hat{\mathcal{U}}^\dagger\psi' = i\hbar \left(\hat{\mathcal{U}}^\dagger \frac{\partial \psi'}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\mathcal{U}}^\dagger}{\partial t} \psi' \right) = \hat{\mathcal{U}}^\dagger \left(i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} + q\frac{\partial \Lambda}{\partial t} \psi' \right).$$

Druhý člen na pravé straně převedeme nalevo a rovnici vynásobíme zleva operátorem $\hat{\mathcal{U}}$

$$\hat{\mathcal{U}} \left(\hat{H} - q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) \hat{\mathcal{U}}^\dagger \psi' = i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t}.$$

Upravíme operátor na levé straně

$$\hat{\mathcal{U}} \left(\hat{H} - q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) \hat{\mathcal{U}}^\dagger = \hat{H} + [\hat{\mathcal{U}}, \hat{H}] \hat{\mathcal{U}}^\dagger - q \frac{\partial \Lambda}{\partial t}. \quad (6.23)$$

Zbývá určit komutátor. $\hat{\mathcal{U}}$ je operátor násobení funkcí $\vec{x}$ a t , takže nekomutuje s operátorem hybnosti. Komutátor s hamiltoniánem (6.19) se zredukuje na součet dvou členů

$$[\hat{\mathcal{U}}, \hat{H}] = \frac{1}{2M} [\hat{\mathcal{U}}, \hat{P}^2] - \frac{q}{M} [\hat{\mathcal{U}}, \vec{A} \cdot \hat{\vec{P}}], \quad (6.24)$$

které určíme s využitím zobecnění vztahu (1.13) pro částici v $\mathbb{R}^3$

$$[f(\hat{X}_i), \hat{P}_j] = i\hbar \frac{\partial f(\hat{X}_i)}{\partial x_j}.$$

Pro druhý komutátor v (6.24) najdeme

$$[\hat{\mathcal{U}}, \vec{A} \cdot \hat{\vec{P}}] = A_j [\hat{\mathcal{U}}, \hat{P}_j] = i\hbar A_j \frac{\partial \hat{\mathcal{U}}}{\partial x_j} = -q A_j \frac{\partial \Lambda}{\partial x_j} \hat{\mathcal{U}} = -q \vec{A} \cdot (\vec{\nabla} \Lambda) \hat{\mathcal{U}}. \quad (6.25)$$

První člen upravíme analogicky

$$\begin{aligned} [\hat{\mathcal{U}}, \hat{P}^2] &= \hat{P}_j [\hat{\mathcal{U}}, \hat{P}_j] + [\hat{\mathcal{U}}, \hat{P}_j] \hat{P}_j = -q \hat{P}_j \frac{\partial \Lambda}{\partial x_j} \hat{\mathcal{U}} - q \frac{\partial \Lambda}{\partial x_j} \hat{\mathcal{U}} \hat{P}_j \\ &= -q \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial x_j} \hat{P}_j + \left[\hat{P}_j, \frac{\partial \Lambda}{\partial x_j} \right] \right) \hat{\mathcal{U}} - q \frac{\partial \Lambda}{\partial x_j} \left(\hat{P}_j \hat{\mathcal{U}} + [\hat{\mathcal{U}}, \hat{P}_j] \right) \\ &= \left\{ -2q (\vec{\nabla} \Lambda) \cdot \hat{\vec{P}} + i\hbar q \Delta \Lambda + q^2 (\vec{\nabla} \Lambda) \cdot (\vec{\nabla} \Lambda) \right\} \hat{\mathcal{U}}. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Dosazením (6.25) a (6.26) do (6.24) dostaneme

$$[\hat{\mathcal{U}}, \hat{H}] \hat{\mathcal{U}}^\dagger = -\frac{q}{M} (\vec{\nabla} \Lambda) \cdot \hat{\vec{P}} + i \frac{\hbar q}{2M} \Delta \Lambda + \frac{q^2}{M} \vec{A} \cdot (\vec{\nabla} \Lambda) + \frac{q^2}{2M} (\vec{\nabla} \Lambda) \cdot (\vec{\nabla} \Lambda).$$

Porovnáním (6.23) s (6.20) pak nalezneme

$$\hat{\mathcal{U}} \left(\hat{H} - q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) \hat{\mathcal{U}}^\dagger = \hat{H}',$$

takže Schrödingerova rovnice (6.21) skutečně platí. Máme tedy zaručeno, že všechny fyzikální předpovědi i dynamika systému je stejná v popisu pomocí $\{\vec{A}, \varphi, \psi\}$ i $\{\vec{A}', \varphi', \psi'\}$, tj. nezávisí na volbě kalibrace.

Ze znalosti hamiltoniánu částice v elektromagnetickém poli a kalibračních transformací (6.17) lze odvodit lokální kalibrační transformaci stavu (6.22), která zaručuje kalibrační invarianci nerelativistické kvantové mechaniky. V kalibračních teoriích pole se postupuje opačně - z požadavku lokální kalibrační invariance plyne specifický tvar hamiltoniánu nebo lagrangiánu, tj. specifický tvar interakce polí.

Kapitola 7

Souřadnicová, hybnostní a sférická reprezentace

7.1 Souřadnicová reprezentace

Pod pojmem souřadnicová (resp. x) reprezentace se myslí vyjádření stavů a pozorovatelných v bázi zobecněných vlastních vektorů operátoru polohy $|\vec{x}\rangle$. Ty splňují vztahy

$$\begin{aligned}\langle \vec{x} | \hat{X}_j | \phi \rangle &= x_j \langle \vec{x} | \phi \rangle \quad \left(\text{resp.} \quad \hat{X}_j | \vec{x} \rangle = x_j | \vec{x} \rangle \right), \\ \langle \vec{x}' | \vec{x} \rangle &= \delta(\vec{x}' - \vec{x}), \\ \int_{\mathbb{R}^3} d^3x | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | &= \hat{I},\end{aligned}\tag{7.1}$$

které jsou analogiemi rovnice na vlastní vektory, relací ortogonalit a relací úplnosti pro pozorovatelné s čistě bodovým spektrem. S použitím (7.1) stav $|\psi\rangle$ do x reprezentace rozepíšeme způsobem

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \underbrace{\langle \vec{x} | \psi \rangle}_{\psi(\vec{x})} |\vec{x}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x}) |\vec{x}\rangle,$$

tj. identifikujeme vlnovou funkci $\psi(\vec{x})$ s „Fourierovým koeficientem“ $\langle \vec{x} | \psi \rangle$. To je v souladu s Bornovou interpretací vlnové funkce, protože $\langle \vec{x} | \psi \rangle$ má význam amplitudy pravděpodobnosti nalezení částice ve stavu $|\psi\rangle$ v bodě $\vec{x}$.

Pozorovatelné (případně i jiné operátory) rozepíšeme v x reprezentaci analogickým postupem

$$\hat{A} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' | \vec{x}' \rangle \underbrace{\langle \vec{x}' | \hat{A} | \vec{x} \rangle}_{A(\vec{x}', \vec{x})} \langle \vec{x} | = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' A(\vec{x}', \vec{x}) | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x} |.\tag{7.2}$$

Výhodou x reprezentace je, že pozorovatelné běžně používané v nerelativistické kvantové mechanice jsou lokální. Takové operátory jsou v x reprezentaci diagonální, tj. jejich maticové elementy jsou úměrné $\delta(\vec{x}' - \vec{x})$. Pro operátor polohy zjevně platí

$$\langle \vec{x}' | \hat{X}_j | \vec{x} \rangle = x_j \delta(\vec{x}' - \vec{x}).$$

Podobný výsledek dostaneme i pro každou funkci polohy, tj. i pro (lokální) potenciál $\hat{V} = V(\hat{\vec{X}})$

$$\langle \vec{x}' | \hat{V} | \vec{x} \rangle = V(\vec{x}) \delta(\vec{x}' - \vec{x}).$$

Díky δ -funkci pro brakety $\hat{V}$ platí

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{V} | \phi \rangle &= \langle \psi | \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3x' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'| \right) \hat{V} \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| \right) | \phi \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \langle \psi | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \hat{V} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \phi \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \bar{\psi}(\vec{x}') V(\vec{x}) \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \phi(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \bar{\psi}(\vec{x}) V(\vec{x}) \phi(\vec{x}). \end{aligned}$$

U operátoru hybnosti víme, jak působí na vlnové funkce

$$\hat{P}_j \psi(\vec{x}) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j}.$$

To odpovídá maticovým elementům

$$\langle \vec{x}' | \hat{P}_j | \vec{x} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3y \delta(\vec{x}' - \vec{y}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \delta(\vec{y} - \vec{x}) = \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right).$$

Složky operátoru hybnosti jsou v x reprezentaci diagonální, a stejně to platí i pro kinetickou energii

$$\langle \vec{x}' | \frac{\hat{P}^2}{2M} | \vec{x} \rangle = \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \right).$$

Hamiltonián $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(\hat{\vec{X}})$ je také diagonální

$$\langle \vec{x}' | \hat{H} | \vec{x} \rangle = \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\vec{x}) \right).$$

Rovnice na vlastní čísla hamiltoniánu

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle,$$

přejde v x reprezentaci na parciální diferenciální rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \psi(\vec{x}) + V(\vec{x}) \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}).$$

7.2 Hybnostní reprezentace

V hybnostní (resp. p , nebo impulsová) reprezentaci pracujeme v bázi zobecněných vlastních vektorů hybnosti $|\vec{p}\rangle$, opět normovaných k δ -funkci, tj. kety splňují

$$\begin{aligned}\langle \vec{p} | \hat{P}_j | \phi \rangle &= p_j \langle \vec{p} | \phi \rangle \quad \left(\text{resp.} \quad \hat{P}_j | \vec{p} \rangle = p_j | \vec{p} \rangle \right), \\ \langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle &= \delta(\vec{p}' - \vec{p}), \\ \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \, |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| &= \hat{I}.\end{aligned}\tag{7.3}$$

Vlnové funkce zobecněných vlastních vektorů hybnosti v x reprezentaci jsou rovinné vlny

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}.\tag{7.4}$$

Stav $|\psi\rangle$ rozepíšeme pomocí (7.3) ve tvaru

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \, \underbrace{\langle \vec{p} | \psi \rangle}_{\tilde{\psi}(\vec{p})} |\vec{p}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \, \tilde{\psi}(\vec{p}) |\vec{p}\rangle,$$

kde $\tilde{\psi}(\vec{p})$ je vlnová funkce v p reprezentaci. Má význam amplitudy pravděpodobnosti naměření hybnosti rovné $\vec{p}$. Přejít mezi vlnovou funkcí v x a p reprezentaci je dán Fourierovu transformací

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}) \equiv (\mathcal{F}\psi)(\vec{p}).$$

V opačném směru se jedná o inverzní Fourierovu transformaci

$$\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \, \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \, e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \tilde{\psi}(\vec{p}) \equiv (\mathcal{F}^{-1}\tilde{\psi})(\vec{x}).$$

Operátory můžeme v p reprezentaci rozepsat podobným způsobem jako (7.2)

$$\hat{A} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \, |\vec{p}'\rangle \underbrace{\langle \vec{p}' | \hat{A} | \vec{p} \rangle}_{\tilde{A}(\vec{p}', \vec{p})} \langle \vec{p}| = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \, \tilde{A}(\vec{p}', \vec{p}) |\vec{p}'\rangle \langle \vec{p}|.$$

Vztah mezi maticovými elementy operátoru v x a p reprezentaci je

$$\begin{aligned}\tilde{A}(\vec{p}', \vec{p}) &= \langle \vec{p}' | \hat{A} | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}' | \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \, |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'| \right) \hat{A} \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| \right) | \vec{p} \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \, \langle \vec{p}' | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \hat{A} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \, e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}'} \hat{A}(\vec{x}', \vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}.\end{aligned}$$

Operátor hybnosti má v p reprezentaci jednoduchý tvar, protože jeho maticové elementy jsou diagonální

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}' | \hat{P}_j | \vec{p} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{x}'} \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \\ &= p_j \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{x}\cdot(\vec{p}' - \vec{p})} = p_j \delta(\vec{p}' - \vec{p}),\end{aligned}$$

což můžeme zapsat alternativně působením na vlnovou funkci v p reprezentaci

$$\hat{\tilde{P}}_j \tilde{\psi}(\vec{p}) = p_j \tilde{\psi}(\vec{p}).$$

Toho jsme využili např. při řešení Schrödingerovy rovnice pro volnou částici, která v p reprezentaci přejde v obyčejnou diferenciální rovnici 1. řádu

$$\hat{\tilde{H}} \tilde{\psi}(\vec{p}) = \frac{p^2}{2M} \tilde{\psi}(\vec{p}) = i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t}.$$

Z operátoru polohy se v p reprezentaci stane derivace podle složek $\vec{p}$, protože pro maticové elementy nalezneme

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}' | \hat{X}_j | \vec{p} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{x}'} \delta(\vec{x}' - \vec{x}) x_j e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x x_j e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{x}\cdot(\vec{p}' - \vec{p})} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'_j} \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{x}\cdot(\vec{p}' - \vec{p})} \right) \\ &= \delta(\vec{p}' - \vec{p}) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \right).\end{aligned}$$

Působení na vlnovou funkci v p reprezentaci je potom

$$\hat{\tilde{X}}_j \tilde{\psi}(\vec{p}) = i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial p_j}.$$

Operátor potenciální energie v p reprezentaci diagonální obecně není, jeho maticové elementy jsou

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}' | \hat{V} | \vec{p} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{x}'} \delta(\vec{x}' - \vec{x}) V(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{x}\cdot(\vec{p}' - \vec{p})} V(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \tilde{V}(\vec{p}' - \vec{p}).\end{aligned}$$

7.3 Sférická souřadnicová reprezentace

Často je výhodné pracovat ve sférických souřadnicích místo v kartézských (zejména když řešíme bezčasovou Schrödingerovu rovnici pro částici ve sféricky symetrickém potenciálu). Vyjádříme polohový vektor ve sférických souřadnicích

$$\begin{aligned}x_1 &= r \sin \theta \cos \varphi, \\x_2 &= r \sin \theta \sin \varphi, \\x_3 &= r \cos \theta,\end{aligned}$$

a přeznačíme zobecněné vlastní vektory polohy $|\vec{x}\rangle = |r\theta\varphi\rangle$ (r , θ a φ budou vždy značit sférické souřadnice vektoru $\vec{x}$). Pro tyto kety pak platí relace

$$\begin{aligned}\langle r'\theta'\varphi'|r\theta\varphi\rangle &= \frac{1}{r^2}\delta(r'-r)\delta(\cos\theta'-\cos\theta)\delta(\varphi'-\varphi), \\ \hat{I} &= \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |r, \theta, \varphi\rangle \langle r, \theta, \varphi|.\end{aligned}$$

Rozkladem stavu $|\psi\rangle$ do $|r\theta\varphi\rangle$ je vlnová funkce ve sférických souřadnicích

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \langle r\theta\varphi|\psi\rangle.$$

Hilbertův prostor $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ lze rozložit na tenzorový součin

$$\mathcal{H} \simeq \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_\Omega,$$

kde $\mathcal{H}_r$ je prostor kvadraticky integrabilních funkcí na polopřímce

$$\mathcal{H}_r = L^2(\langle 0, \infty), r^2 dr),$$

a $\mathcal{H}_\Omega$ je prostor kvadraticky integrabilních funkcí na jednotkové kouli

$$\mathcal{H}_\Omega = L^2(\langle 0, \pi) \times \langle 0, 2\pi), \sin\theta d\theta d\varphi).$$

V prostoru $\mathcal{H}_\Omega$ známe ortonormální bázi tvořenou společnými vlastními vektory $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$

$$\begin{aligned}\hat{L}^2|lm\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|lm\rangle, \\ \hat{L}_3|lm\rangle &= m\hbar|lm\rangle,\end{aligned}$$

kterým ve sférických souřadnicích odpovídají kulové funkce

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta\varphi|lm\rangle.$$

Z rozkladu jednotky v $\mathcal{H}_\Omega$

$$\sum_{l,m} |lm\rangle \langle lm| = \hat{I}_\Omega,$$

plyne identita

$$\sum_{l,m} \bar{Y}_{lm}(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta(\cos \theta' - \cos \theta) \delta(\varphi' - \varphi).$$

Rozšířením o $|r\rangle$ dostaneme bázi $\mathcal{H}$ tvořenou zobecněnými společnými vlastními vektory $\hat{r}$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_3$, pro které platí

$$\langle r'l'm'|rlm\rangle = \frac{1}{r^2} \delta(r' - r) \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (7.5)$$

$$\hat{I} = \int_0^\infty r^2 dr \sum_{l,m} |rlm\rangle \langle rlm|. \quad (7.6)$$

Pro skalární součin ketů $|rlm\rangle$ a $|\vec{x}'\rangle$ dostaneme

$$\langle \vec{x}'|rlm\rangle = \langle r'\theta'\varphi'|rlm\rangle = \frac{1}{r^2} \delta(r' - r) Y_{lm}(\theta', \varphi').$$

Odtud plynou převodní vztahy mezi $|\vec{x}\rangle = |r\theta\varphi\rangle$ a $|rlm\rangle$

$$\begin{aligned} |rlm\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \langle \vec{x}'|rlm\rangle |\vec{x}'\rangle = \int_0^\infty r'^2 dr' \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' \langle r'\theta'\varphi'|rlm\rangle |r'\theta'\varphi'\rangle \\ &= \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' Y_{lm}(\theta', \varphi') |r\theta'\varphi'\rangle. \end{aligned}$$

Inverzní vztah má díky (7.6) tvar

$$|\vec{x}\rangle = \int_0^\infty r'^2 dr' \sum_{l,m} \langle r'lm|r\theta\varphi\rangle |r'lm\rangle = \sum_{l,m} \bar{Y}_{lm}(\theta, \varphi) |rlm\rangle.$$

7.3.1 Částice ve sféricky symetrickém potenciálu

Uvažujme nyní bezčasovou Schrödingerovu rovnici se sféricky symetrickým potenciálem $V(r)$. Hamiltonián je tedy skalár, má společné vlastní vektory s $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$. Označme je jako kety $|Elm\rangle$, ve sférických souřadnicích jim odpovídají funkce

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \varphi) = R_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle r\theta\varphi|Elm\rangle.$$

Rovnici na vlastní čísla vynásobíme zleva $\langle r'l'm'|$

$$\langle r'l'm'|\hat{H}|Elm\rangle = E \langle r'l'm'|Elm\rangle = E R_{El}(r') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (7.7)$$

a levou stranu upravíme s použitím (7.6) do tvaru

$$\begin{aligned}
\langle r'l'm'|\hat{H}|Elm\rangle &= \langle r'l'm'|\hat{H}\left(\int_0^\infty r^2 dr \sum_{L,M} |rLM\rangle\langle rLM|\right)|Elm\rangle \\
&= \int_0^\infty r^2 dr \sum_{L,M} \underbrace{\langle r'l'm'|\hat{H}|rLM\rangle}_{H_{l'l'}(r',r)\delta_{l'l'}\delta_{m'm}} \underbrace{\langle rLM|Elm\rangle}_{R_{El}(r)\delta_{Ll}\delta_{Mm}} \\
&= \int_0^\infty r^2 dr H_l(r',r)R_{El}(r)\delta_{ll'}\delta_{mm'}.
\end{aligned}$$

Dosazením do rovnice (7.7) dostaneme

$$\int_0^\infty r^2 dr H_l(r',r)R_{El}(r) = ER_{El}(r'). \quad (7.8)$$

Určíme maticové elementy hamiltoniánu, který má ve sférických souřadnicích tvar

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{P}^2 + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2Mr^2}\hat{L}^2 + V(r).$$

S použitím (7.5) nalezneme

$$\langle r'lm|\hat{H}|rlm\rangle = H_l(r',r) = \frac{1}{r^2}\delta(r'-r)\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V(r)\right].$$

Dosazením do (7.8) pak dostaneme diferenciální rovnici pro radiální funkci $R_{El}(r)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V(r)\right]R_{El}(r) = ER_{El}(r), \quad (7.9)$$

kteou jsme minulý semestr řešili např. pro izotropní oscilátor nebo částici v coulombickém poli. Připomeňme, že radiální funkce $R_{El}(r)$ musí být omezená (pro vázané i rozptylové stavy). V okolí nuly se musí chovat jako

$$R_{El}(r) \sim r^l, \quad r \ll 1.$$

Asymptotické chování pro $r \rightarrow \infty$ závisí na tvaru potenciálu.

7.3.2 Zobecněné vlastní funkce volné částice s momentem hybnosti

Podívejme se na bezčasovou Schrödingerovu rovnici pro volnou částici. Víme, že spektrum hamiltoniánu je čistě spojitě a odpovídá intervalu $(0, \infty)$. V kartézských souřadnicích se za

zobecněné vlastní funkce hamiltoniánu volí společné vlastní funkce s hybností, tj. rovinné vlny (7.4), pro které platí

$$\hat{P}_j \psi_{\vec{p}} = p_j \psi_{\vec{p}}, \quad \hat{H} \psi_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2M} \psi_{\vec{p}}.$$

Můžeme ale také hledat společné zobecněné vlastní funkce s momentem hybnosti. K tomu využijeme rovnici pro radiální funkci (7.9). Zavedeme vlnový vektor $\vec{k} = \frac{1}{\hbar} \vec{p}$ a přeznačíme $R_{El}(r)$ na $R_{kl}(r)$, pak z (7.9) dostaneme

$$\left[\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_{kl}(r) = 0.$$

Rovnici vydělíme k^2 a uděláme substituci $kr = z$, $R_{kl}(r) \equiv \mathcal{R}_l(z)$, výsledná rovnice bude mít tvar (čárka značí derivaci podle z)

$$\mathcal{R}_l''(z) + \frac{2}{z} \mathcal{R}_l'(z) + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \mathcal{R}_l(z) = 0. \quad (7.10)$$

Toto je tzv. sférická Besselova rovnice. Její obecné řešení má tvar lineární kombinace sférické Besselovy funkce $j_l(z)$ a sférické Neumannovy funkce $n_l(z)$

$$\mathcal{R}_l(z) = a_l j_l(z) + b_l n_l(z),$$

které jsou definovány vztahy

$$\begin{aligned} j_l(z) &= (-z)^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z}, \\ n_l(z) &= -(-z)^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\cos z}{z}. \end{aligned}$$

Rozvojem $\frac{\sin z}{z}$ a $\frac{\cos z}{z}$ do mocninné řady lze ukázat chování funkcí v okolí nuly

$$j_l(z) \sim \frac{z^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(z) \sim -\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}}, \quad z \ll 1.$$

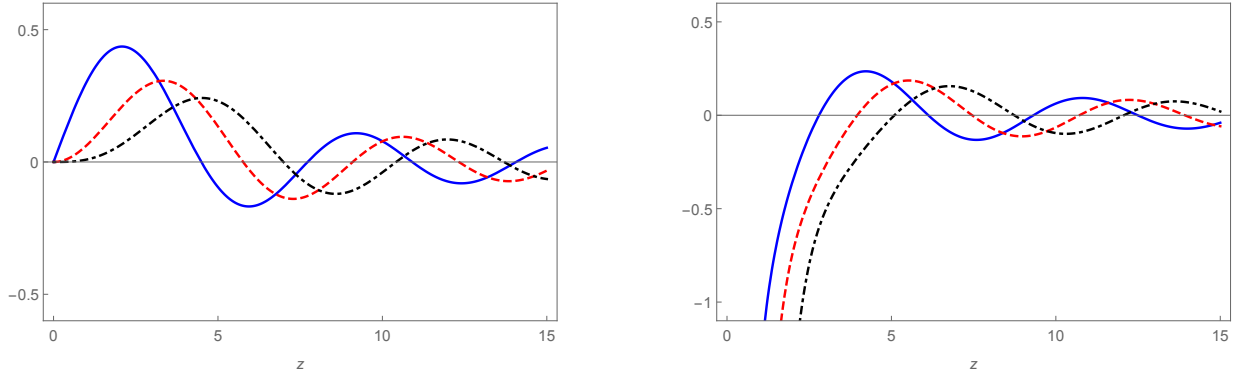
Pro velká z pak platí asymptotické chování

$$j_l(z) \sim \frac{1}{z} \sin \left(z - \frac{l\pi}{2} \right), \quad n_l(z) \sim -\frac{1}{z} \cos \left(z - \frac{l\pi}{2} \right), \quad z \gg 1.$$

Pro ilustraci jsou na obrázku 7.1 zobrazeny sférické Besselovy funkce (vlevo) a sférické Neumannovy funkce (vpravo) pro $l = 1, 2, 3$.

Sférické Neumannovy funkce divergují v nule. Protože radiální funkce $R_{kl}(r)$ je omezená, musí být úměrná sférické Besselově funkci $j_l(kr)$. Pro sférické Besselovy funkce platí relace ortogonality

$$\int_0^\infty j_l(kr) j_l(k'r) r^2 dr = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k').$$



Obrázek 7.1: sférické Besselovy funkce (vlevo) a sférické Neumannovy funkce (vpravo) pro $l = 1$ (plná modrá čára), $l = 2$ (čárkovaná červená čára) a $l = 3$ (čerchovaná černá čára).

Zobecněné vlastní stavy hamiltoniánu volné částice, které mají současně ostré hodnoty momentu hybnosti, a jsou normalizované k δ -funkci, pak mají tvar

$$\psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Platí pro ně vztahy

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_{klm} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \psi_{klm}, \\ \hat{L}^2 \psi_{klm} &= \hbar^2 l(l+1) \psi_{klm}, \quad \hat{L}_3 \psi_{klm} = m\hbar \psi_{klm}, \\ (\psi_{k'l'm'}, \psi_{klm}) &= \delta(k' - k) \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \end{aligned}$$

Pro zobecněné vlastní funkce ψ_{klm} lze navíc ukázat, že tvoří bázi Hilbertova prostoru. Můžeme do této báze rozložit i rovinnou vlnu (7.4). Lze ukázat, že platí vztah

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l\left(\frac{\vec{k}\cdot\vec{x}}{kr}\right), \quad (7.11)$$

kde $P_l(t) \equiv P_l^0(t)$ jsou Legendreovy polynomy. Ze vztahu pro přidružené Legendreovy polynomy pro $m = 0$ nalezneme

$$P_l(t) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dt^l} (t^2 - 1)^l.$$

Legendreův polynom lze rozložit do kulových funkcí

$$P_l(\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \bar{Y}_{lm}(\vec{n}_1) Y_{lm}(\vec{n}_2), \quad (7.12)$$

kde $\vec{n}_i$ jsou jednotkové vektory s prostorovými úhly θ_i, φ_i a $Y_{lm}(\vec{n}_i) \equiv Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i)$. Vzorec (7.11) pak můžeme přepsat do tvaru

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) &= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) \bar{Y}_{lm}\left(\vec{k}/k\right) Y_{lm}(\vec{x}/r) \\ &= \frac{1}{\hbar^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{i^l}{k} \bar{Y}_{lm}\left(\vec{k}/k\right) \psi_{klm}(r, \theta, \varphi),\end{aligned}\tag{7.13}$$

kterému se říká rozklad do parciálních vln. Ten využijeme v teorii rozptylu. Ve speciálním případě, kdy $\vec{k} = (0, 0, k)$ a tedy $\vec{k} \cdot \vec{x} = kr \cos \theta$, platí

$$Y_{lm}\left(\vec{k}/k\right) = Y_{lm}(0, 0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0}.$$

Rozklad rovinné vlny pak má tvar

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) = \frac{1}{\pi\sqrt{2\hbar^3}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{2l+1} j_l(kr) Y_{l0}(\theta, \varphi). \tag{7.14}$$

Kapitola 8

Matice hustoty

8.1 Zavedení matice hustoty

Matice hustoty představuje obecnější popis stavu kvantové částice. Definuje se jako operátor $\hat{\rho}$, který je hermitovský, pozitivní a má jednotkovou stopu, tj.

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger, \quad \hat{\rho} \geq 0, \quad \text{Tr } \hat{\rho} = 1. \quad (8.1)$$

Stopa operátoru $\hat{A}$ je rovna součtu diagonálních maticových elementů v libovolné bázi, tj. je rovna sumě jeho vlastních čísel a_i

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_i \langle i | \hat{A} | i \rangle = \sum_i a_i. \quad (8.2)$$

Stopa je lineární

$$\text{Tr } (\hat{A} + \alpha \hat{B}) = \text{Tr } \hat{A} + \alpha \text{Tr } \hat{B},$$

a nemění se při cyklické záměně operátorů

$$\text{Tr } (\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr } (\hat{B}\hat{A}),$$

přičemž tato rovnost platí i pokud operátory zobrazují mezi jinými vektorovými prostory. Odtud plyne rovnost

$$\text{Tr } |\psi\rangle\langle\phi| = \langle\phi|\psi\rangle.$$

Matice hustoty má tedy nezáporná vlastní čísla $p_i \geq 0$, jejichž součet je jedna

$$\text{Tr } \hat{\rho} = \sum_i p_i = 1. \quad (8.3)$$

Můžeme je interpretovat jako pravděpodobnostní rozdělení. Označme příslušné vlastní vektory $\hat{\rho}$ jako $|\psi_i\rangle$. Vlastní číslo p_i má význam pravděpodobnosti nalezení částice ve stavu $|\psi_i\rangle$. Lze ukázat, že matici hustoty lze vždy diagonalizovat, má maximálně spočetně mnoho

vlastních čísel a jediné vlastní číslo, které může mít nekonečnou násobnost, je 0. Vlastní vektory $|\psi_i\rangle$ tvoří ortonormální bázi. Každou matici hustoty lze zapsat ve tvaru

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (8.4)$$

Poznamenejme, že tento rozklad není jednoznačný, pokud nepožadujeme ortogonalitu stavů $|\psi_i\rangle$.

Ketu $|\psi\rangle$, který jsme dosud používali k popisu stavu kvantové částice, odpovídá matice hustoty $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|$, tj. ortogonální projektor na jednorozměrný podprostor v $\mathcal{H}$ určený vektorem $|\psi\rangle$. Takové stavy se označují jako čisté. Ostatní matice hustoty popisují smíšené stavy. Snadno se ověří následující tvrzení:

$$\text{Tr } \hat{\rho}^2 \leq \text{Tr } \hat{\rho}, \quad (8.5)$$

kde rovnost nastává právě tehdy když $\hat{\rho}$ je čistý stav.

8.1.1 Předpovědi výsledků měření

Uvažujme částici ve stavu popsaném maticí hustoty $\hat{\rho}$ (8.4). Pravděpodobnost, že ji nalezneme v čistém stavu $|\varphi\rangle$, je pak rovna

$$W_{\hat{\rho} \rightarrow |\varphi\rangle} = \sum_i p_i W_{|\psi_i\rangle \rightarrow |\varphi\rangle} = \sum_i p_i |\langle \varphi | \psi_i \rangle|^2 = \langle \varphi | \hat{\rho} | \varphi \rangle. \quad (8.6)$$

Pravděpodobnost naměření vlastní hodnoty a pozorovatelné $\hat{A}$ je dána vztahem

$$W_{\hat{\rho}, a} = \sum_i p_i W_{|\psi_i\rangle, a} = \text{Tr } \left(\hat{P}_a \hat{\rho} \right), \quad (8.7)$$

kde $\hat{P}_a$ je ortogonální projektor na podprostor s vlastní hodnotou a , tj.

$$\hat{P}_a = \sum_k |a, k\rangle \langle a, k|. \quad (8.8)$$

Zde kety $|a, k\rangle$ tvoří ortonormální bázi v daném podprostoru. Pokud a je nedegenerovaná vlastní hodnota, pak $\hat{P}_a = |a\rangle \langle a|$ a vztah (8.7) se zredukuje na

$$W_{\hat{\rho}, a} = \text{Tr } \left(\hat{P}_a \hat{\rho} \right) = \langle a | \hat{\rho} | a \rangle \equiv W_{\hat{\rho} \rightarrow |a\rangle}. \quad (8.9)$$

Pro střední hodnotu $\hat{A}$ ve stavu $\hat{\rho}$ platí

$$\langle \hat{A} \rangle_{\hat{\rho}} = \sum_{a \in \sigma(\hat{A})} a W_{\hat{\rho}, a} = \sum_{a \in \sigma(\hat{A})} a \text{Tr } \left(\hat{P}_a \hat{\rho} \right) = \text{Tr } \left(\hat{A} \hat{\rho} \right), \quad (8.10)$$

kde jsme využili spektrální rozklad operátoru $\hat{A}$

$$\hat{A} = \sum_{a \in \sigma(\hat{A})} a \hat{P}_a.$$

Po měření s výsledkem a se stav změní na

$$\hat{\rho}_{\hat{A}=a} = \frac{\hat{P}_a \hat{\rho} \hat{P}_a}{\text{Tr} \left(\hat{P}_a \hat{\rho} \hat{P}_a \right)} = \frac{\hat{P}_a \hat{\rho} \hat{P}_a}{\text{Tr} \left(\hat{P}_a \hat{\rho} \right)} = \frac{\hat{P}_a \hat{\rho} \hat{P}_a}{W_{\hat{\rho},a}} \quad (8.11)$$

8.1.2 Měření bez rozlišení výsledků

Pokud pozorovatelnou $\hat{A}$ změříme, ale neznáme výsledek měření, pak je stav částice popsán maticí hustoty

$$\hat{\rho}_{\hat{A}} = \sum_{a \in \sigma(\hat{A})} \hat{\rho}_{\hat{A}=a} W_{\hat{\rho},a} = \sum_{a \in \sigma(\hat{A})} \hat{P}_a \hat{\rho} \hat{P}_a. \quad (8.12)$$

Takovýmto měřením se obecně z čistého stavu stane smíšený, jak si ukážeme na následujícím příkladu. Uvažujme pro jednoduchost pozorovatelnou $\hat{A}$ s čistě bodovým spektrem

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

Před měřením bude částice v nějakém čistém stavu

$$|\psi\rangle = \sum_j \alpha_j |j\rangle, \quad \alpha_j = \langle j|\psi\rangle.$$

Předpokládáme, že alespoň dvě α_i jsou různé od nuly, tj. $|\psi\rangle$ není vlastní vektor $\hat{A}$. Matice hustoty, která tomuto čistému stavu odpovídá, je rovna

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{j,k} \alpha_j \bar{\alpha}_k |j\rangle\langle k|. \quad (8.13)$$

Operátor ρ má tedy v bázi vlastních vektorů $\hat{A}$ maticové elementy

$$\langle j|\hat{\rho}|k\rangle = \alpha_j \bar{\alpha}_k, \quad (8.14)$$

takže matice $\hat{\rho}$ je v této bázi nediagonální. Uděláme nyní měření $\hat{A}$ bez rozlišování výsledků. Stav po takovémto měření je podle vztahu (8.12) roven

$$\hat{\rho}_{\hat{A}} = \sum_j |j\rangle\langle j|\hat{\rho}|j\rangle\langle j| = \sum_j |\alpha_j|^2 |j\rangle\langle j|. \quad (8.15)$$

Tento stav má nenulové jen diagonální maticové elementy, protože

$$\langle j|\hat{\rho}_{\hat{A}}|k\rangle = |\alpha_j|^2 \delta_{jk}. \quad (8.16)$$

Protože předpokládáme že $|\psi\rangle$ nebyl vlastní vektor $\hat{A}$, platí pro všechny i nerovnost $0 \leq |\alpha_i|^2 < 1$ a tedy

$$\text{Tr } \hat{\rho}_A^2 = \sum_j |\alpha_j|^4 < 1.$$

Měřením bez rozlišení výsledku se tedy z čistého stavu $|\psi\rangle$ stal smíšený stav $\hat{\rho}_A$. Poznamenejme, že pravděpodobnosti naměření hodnoty a_i jsou stejné ve stavu $|\psi\rangle$ i $\hat{\rho}_A$

$$W_{|\psi\rangle, a_i} = |\langle i|\psi\rangle|^2 = |\alpha_i|^2 = \langle i|\hat{\rho}_A|i\rangle = W_{\hat{\rho}_A, a_i}. \quad (8.17)$$

Více informací už ale ve smíšeném stavu $\hat{\rho}_A$ není, je závislý pouze na $|\alpha_i|^2$. Smíšený stav $\hat{\rho}_A$ je tzv. nekoherentní superpozice bazických ketů $|i\rangle$, tj. jejich klasická statistická směs, kdy nevíme nic jiného, než že s pravděpodobnostmi $|\alpha_i|^2$ najdeme částici ve stavu $|i\rangle$. Čistý stav $|\psi\rangle$ obsahuje v určitém smyslu více informací než smíšený stav $\hat{\rho}_A$, protože $|\psi\rangle$ je určen komplexními čísly α_i . Čistý stav $|\psi\rangle$ je tzv. koherentní superpozice bazických ketů $|j\rangle$ (resp. kvantová superpozice), kde známe i relativní fáze mezi bazickými kety $|j\rangle$.

8.1.3 Entropie kvantového stavu

Množství informací ve stavu můžeme kvantifikovat pomocí von Neumannovy entropie

$$S(\hat{\rho}) = -\text{Tr } (\hat{\rho} \ln \hat{\rho}). \quad (8.18)$$

Z rozkladu (8.4) dostaneme

$$S(\hat{\rho}) = -\sum_i p_i \ln p_i \equiv S(\{p_i\}), \quad (8.19)$$

tj. von Neumannova entropie stavu $\hat{\rho}$ je shodná s Shannonovou entropií pravděpodobnostního rozdělení $\{p_i\}$. Čím větší je entropie tím menší je množství informací obsažené ve stavu $\hat{\rho}$. Pro čisté stavy je jen jedno z $p_i = 1$, ostatní jsou rovné nule, a tedy

$$S(|\psi\rangle\langle\psi|) = 0. \quad (8.20)$$

Čisté stavy obsahují maximální možné množství informací. Poznamenejme, že každý čistý stav lze chápat jako vlastní vektor nějaké úplné množiny pozorovatelných. Smíšené stavy mají kladnou entropii. Pokud má Hilbertův prostor konečnou dimenzi N , pak existuje stav s maximální entropií - tzv. maximálně smíšený stav

$$\hat{\rho} = \frac{1}{N} \hat{I} \quad (8.21)$$

Pro tento stav je $p_i = \frac{1}{N}$, takže jeho entropie je rovna

$$S(\hat{\rho}) = \ln N, \quad (8.22)$$

což je maximální možná hodnota pro pravděpodobnostní rozdělení N prvků. V tomto stavu mají všechny výsledky měření stejnou pravděpodobnost (rovnou $\frac{1}{N}$) pro všechny pozorovatelné s prostým spektrem. V tomto smyslu maximálně smíšený stav nenese žádnou informaci o výsledcích měření.

8.1.4 Dekohherence

Nenulové mimodiagonální prvky matice hustoty se často označují jako kvantové koherence. Proces zmenšování těchto nediagonálních prvků se nazývá dekoherence. Důsledkem dekoherence je ztráta kvantových efektů jako např. vymizení interference. Uvažujme dvouštěrbinový experiment. Stav částice po průchodu štěrbinou j označíme jako $|\psi_j\rangle$ (předpokládáme, že $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$). Když není možné rozlišit, kterou štěrbinou částice prošla, je její stav popsán koherentní superpozicí

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle),$$

což je ekvivalentní matici hustoty

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2} \left(|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_1\rangle\langle\psi_2| + |\psi_2\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2| \right)$$

Pravděpodobnostní rozdělení dopadů částice na stínítko je rovno (jde samozřejmě snadno určit i ze vztahu $w(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2$)

$$\begin{aligned} w(x) &= \langle x|\hat{\rho}|x\rangle = \frac{1}{2} \left(\langle x|\psi_1\rangle\langle\psi_1|x\rangle + \langle x|\psi_1\rangle\langle\psi_2|x\rangle + \langle x|\psi_2\rangle\langle\psi_1|x\rangle + \langle x|\psi_2\rangle\langle\psi_2|x\rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(|\psi_1(x)|^2 + \psi_1(x)\bar{\psi}_2(x) + \bar{\psi}_1(x)\psi_2(x) + |\psi_2(x)|^2 \right). \end{aligned}$$

Prostřední dva členy způsobují interferenční maxima a minima. V případě, že dojde k úplné dekoherenci, např. interakcí s okolním prostředím nebo vlivem měření trajektorie částice, bude stav částice popsán klasickou statistickou směsí stavů $|\psi_1\rangle$ a $|\psi_2\rangle$

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{2} (|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2|),$$

tedy jejich nekoherentní superpozicí. Pravděpodobnostní rozdělení dopadů částice na stínítko bude průměr pravděpodobností dopadu, kdy je otevřena vždy jen jedna štěrbin

$$w(x) = \langle x|\hat{\rho}'|x\rangle = \frac{1}{2} \left(\langle x|\psi_1\rangle\langle\psi_1|x\rangle + \langle x|\psi_2\rangle\langle\psi_2|x\rangle \right) = \frac{1}{2} (|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2).$$

V důsledku úplné dekoherence dojde ke ztrátě interferenčního obrazce. Při částečné dekoherenci, kdy se velikost mimodiagonálních maticových elementy zmenší ale nebudou rovné nule, bude interference hůře viditelná — sníží se rozdíl mezi interferenční maximy a minimy.

8.1.5 Časový vývoj matice hustoty pro uzavřený systém

Pro uzavřený systém se čisté stavy vyvíjí s časem podle Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (8.23)$$

Hermitovským sdružením dostaneme vývoj bra

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | \hat{H}. \quad (8.24)$$

Pro matici hustoty, která má v čase $t = 0$ tvar (8.4) platí

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|. \quad (8.25)$$

Určíme časovou derivaci, využijeme Schrödingerovy rovnice (8.23), (8.24) a nalezneme

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} &= \sum_i p_i \left(i\hbar \left(\frac{\partial |\psi_i(t)\rangle}{\partial t} \right) \langle \psi_i(t) | + |\psi_i(t)\rangle \left(i\hbar \frac{\partial \langle \psi_i(t) |}{\partial t} \right) \right) \\ &= \sum_i p_i \left(\hat{H} |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t) | - |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t) | \hat{H} \right) \\ &= [\hat{H}, \hat{\rho}]. \end{aligned} \quad (8.26)$$

To je tzv. von Neumannova rovnice. Je kvantovou analogií Liovilovy rovnice z klasické statistické mechaniky, která popisuje časový vývoj pravděpodobnostního rozdělení na fázovém prostoru

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial x_i} \frac{\partial w}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial w}{\partial x_i} \right) = \{H, w\}. \quad (8.27)$$

8.2 Matice hustoty pro spin $\frac{1}{2}$

Jako příklad si ukážeme matici hustoty pro částici se spinem $\frac{1}{2}$, kdy $\mathcal{H} = \text{Span}(|z, +\rangle, |z, -\rangle) \simeq \mathbb{C}^2$. Stejný popis lze použít pro jakýkoli kvantový systém s $\dim \mathcal{H} = 2$, ale pro spin $\frac{1}{2}$ je interpretace nejnázornější. Budeme pracovat v bázi vlastních vektorů $\hat{S}_z$, tj.

$$|z, +\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z, -\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (8.28)$$

Operátor $\hat{\rho}$ je pak reprezentován 2×2 maticí ρ . V prostoru 2×2 matic lze zvolit bázi tvořenou jednotkovou maticí I a Pauliho maticemi σ_j . Matici hustoty ρ tak určitě můžeme zapsat ve tvaru

$$\rho = aI + b_j \sigma_j. \quad (8.29)$$

Připomeňme, že pro Pauliho matice platí vztahy

$$\sigma_j = \sigma_j^\dagger, \quad \text{Tr } \sigma_j = 0, \quad (8.30)$$

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} I + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (8.31)$$

Z (8.30) plyne

$$b_j \in \mathbb{R}, \quad a = \frac{1}{2}. \quad (8.32)$$

Střední hodnoty Pauliho matic ve stavu ρ jsou díky (8.31) rovny

$$\langle \sigma \rangle_\rho = \text{Tr} (\sigma \rho) = \text{Tr} (a\sigma_i + b_j\sigma_i\sigma_j) = b_i \text{Tr} I = 2b_i. \quad (8.33)$$

Zavedeme-li vektor polarizace $\vec{p}$ se složkami

$$p_i = \langle \sigma_i \rangle_\rho, \quad (8.34)$$

pak platí $b_i = \frac{1}{2}p_i$. Obecná matice hustoty pro spin $\frac{1}{2}$ má tedy tvar

$$\rho(\vec{p}) = \frac{1}{2} (I + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + p_3 & p_1 - ip_2 \\ p_1 + ip_2 & 1 - p_3 \end{pmatrix}. \quad (8.35)$$

Vlastní čísla matice (8.35) jsou

$$\lambda_{\pm} = \frac{1 \pm p}{2}, \quad p = \sqrt{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}. \quad (8.36)$$

Aby ρ byla legitimní matice hustoty, musí být pozitivní, tj. její vlastní čísla musí být nezáporná. To je splněno pokud

$$p^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 \leq 1. \quad (8.37)$$

Tato nerovnost definuje tzv. Blochovu sféru. Povrch sféry odpovídá čistým stavům, protože

$$\rho^2 = \frac{1}{4} \left(I + 2p_i\sigma_i + \underbrace{p_i p_j \sigma_i \sigma_j}_{p^2 I} \right) = \frac{1}{4} ((1 + p^2)I + 2\vec{p} \cdot \vec{\sigma}) \quad (8.38)$$

a tedy

$$\text{Tr} \rho^2 = \frac{1}{2}(1 + p^2) \stackrel{!}{=} 1 \iff p^2 = 1. \quad (8.39)$$

Vnitřek Blochovy sféry tvoří smíšené stavy.

Řekněme, že budeme měřit projekci spinu do směru určeného jednotkovým vektorem $\vec{n}$. Jsou dva možné výsledky, projekce může být buď kladná nebo záporná. Výsledkům odpovídají stavy $|\vec{n}, \pm\rangle$, pro které platí

$$\hat{S}_{\vec{n}}|\vec{n}, \pm\rangle = \frac{\hbar}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma}|\vec{n}, \pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2}|\vec{n}, \pm\rangle. \quad (8.40)$$

Vektory polarizací těchto čistých stavů jsou $\pm\vec{n}$. Z definice (8.34) totiž plyne

$$\vec{n} \cdot \vec{p} = n_i p_i = n_i \langle \sigma_i \rangle_{|\vec{n}, \pm\rangle} = \langle \vec{n}, \pm | \vec{n} \cdot \vec{\sigma} | \vec{n}, \pm \rangle = \pm 1. \quad (8.41)$$

Protože oba vektory $\vec{n}$ a $\vec{p}$ mají velikost 1, musí být $\vec{p} = \pm\vec{n}$. Projektor na stav $|\vec{n}, \pm\rangle$ tedy odpovídá matici hustoty (8.35) s $\vec{p} = \pm\vec{n}$

$$\hat{P}_{\vec{n}, \pm} = |\vec{n}, \pm\rangle \langle \vec{n}, \pm| \equiv \rho(\vec{n}) = \frac{1}{2} (I \pm \vec{n} \cdot \vec{\sigma}). \quad (8.42)$$

Pravděpodobnosti naměření kladné nebo záporné projekce ve stavu $\rho(\vec{p})$ (8.7) jsou díky (8.30) a (8.31) rovny

$$\begin{aligned} W_{\rho(\vec{p}), \vec{n}\pm} &= \text{Tr} \left(\hat{P}_{\vec{n}, \pm} \hat{\rho}(\vec{p}) \right) = \frac{1}{4} \text{Tr} \left((I \pm \vec{n} \cdot \vec{\sigma}) (I + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}) \right) \\ &= \frac{1}{4} \text{Tr} \left(I \pm \vec{n} \cdot \vec{\sigma} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \pm \vec{n} \cdot \vec{p} I \pm i\varepsilon_{ijk} n_i p_j \sigma_k \right) \\ &= \frac{1}{2} (1 \pm \vec{n} \cdot \vec{p}). \end{aligned} \quad (8.43)$$

Pro středí hodnotu projekce spinu do směru $\vec{n}$ pak nalezneme

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_{\vec{n}} \rangle_{\rho(\vec{p})} &= \text{Tr} \left(\hat{S}_{\vec{n}} \rho(\vec{p}) \right) = \frac{\hbar}{4} \text{Tr} \left(\vec{n} \cdot \vec{\sigma} (I + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}) \right) = \frac{\hbar}{4} \text{Tr} \left(\vec{n} \cdot \vec{\sigma} + \vec{n} \cdot \vec{p} I + i\varepsilon_{ijk} n_i p_j \sigma_k \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \vec{n} \cdot \vec{p} \quad \left(= \frac{\hbar}{2} (W_{\rho(\vec{p}), \vec{n}+} - W_{\rho(\vec{p}), \vec{n}-}) \right). \end{aligned} \quad (8.44)$$

Ze vztahů (8.43) je vidět rozdíl mezi čistými a smíšenými stavy pro spin $\frac{1}{2}$. Pro čistý stav ($p = 1$) existuje směr $\vec{n}$, do kterého s pravděpodobností 1 naměříme kladnou projekci — je samozřejmě identický s vektorem polarizace stavu $\vec{p}$. Pro smíšené stavy ($p < 1$) takový směr $\vec{n}$ neexistuje, protože $\vec{n} \cdot \vec{p} < 1$. Ve smíšeném stavu tak můžeme s nenulovou pravděpodobností naměřit kladnou i zápornou projekci spinu do libovolného směru. Speciálně, pro $\vec{p} = 0$ je pravděpodobnost naměření kladné i záporné hodnoty do libovolného směru $\vec{n}$ stejná

$$W_{\rho(0), \vec{n}\pm} = \frac{1}{2}. \quad (8.45)$$

Matice hustoty pro $\vec{p} = 0$ je násobkem jednotkové matice

$$\rho(0) = \frac{1}{2} I, \quad (8.46)$$

a je to tedy maximálně smíšený stav, který nenese žádnou informaci o hodnotě projekce spinu.

Na matici hustoty lze vidět analogii mezi stavy částice se spinem $\frac{1}{2}$ a polarizačními stavy světla. Čisté stavy odpovídají úplně polarizovanému světlu, smíšené částečně polarizovanému světlu a maximálně smíšený stav odpovídá zcela nepolarizovanému světlu. Není to náhoda, polarizace světla je na kvantové úrovni určena projekcí spinu fotonu na jeho směr šíření (tzv. helicitou). Foton má sice spin 1, ale protože se jedná o částici s nulovou klidovou hmotností, helicity může nabývat jen hodnot ± 1 . Kladná helicity odpovídá pravotočivé polarizaci, záporná levotočivé.

Uvažujme nyní spin $\frac{1}{2}$ ve stavu $\rho(\vec{p})$ (8.35), na kterém provedeme měření spinu do osy z . Pravděpodobnosti výsledků měření jsou podle (8.43) rovny

$$W_{\rho(\vec{p}), z\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm p_3). \quad (8.47)$$

Řekněme, že naměříme kladnou projekci, stav po měření bude podle (8.11) odpovídat čistému stavu $|z, +\rangle$

$$\hat{\rho}_{z,+} = \frac{\hat{P}_{z,+} \hat{\rho} \hat{P}_{z,+}}{\text{Tr}(\hat{P}_{z,+} \hat{\rho} \hat{P}_{z,+})} = \frac{|z, +\rangle \langle z, +| \hat{\rho} |z, +\rangle \langle z, +|}{\langle z, +| \hat{\rho} |z, +\rangle} = |z, +\rangle \langle z, +| \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.48)$$

Pokud provedeme měření ale nemůžeme rozlišit výsledek, pak stav je podle (8.12) roven

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_z &= \hat{P}_{z,+} \hat{\rho} \hat{P}_{z,+} + \hat{P}_{z,-} \hat{\rho} \hat{P}_{z,-} = |z, +\rangle \langle z, +| \hat{\rho} |z, +\rangle \langle z, +| + |z, -\rangle \langle z, -| \hat{\rho} |z, -\rangle \langle z, -| \\ &= W_{\rho(\vec{p}), z+} |z, +\rangle \langle z, +| + W_{\rho(\vec{p}), z-} |z, -\rangle \langle z, -| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+p_3 & 0 \\ 0 & 1-p_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.49)$$

Na závěr tohoto příkladu uvažujme časový vývoj matice hustoty (8.35) s hamiltoniánem daným maticí

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} = \frac{E_1 + E_2}{2} I + \frac{E_1 - E_2}{2} \sigma_3. \quad (8.50)$$

(Pro spin $\frac{1}{2}$ v homogenním magnetickém poli ve směru osy z by platilo $H = \mu_0 B \sigma_3$, tj. $E_1 = \mu_0 B$ a $E_2 = -\mu_0 B$.) Z von Neumannovy rovnice (8.26) dostaneme

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= [H, \rho] = \frac{E_1 - E_2}{4} [\sigma_3, p_i \sigma_i] \\ &= \frac{E_1 - E_2}{2} i(p_1 \sigma_2 - p_2 \sigma_1), \end{aligned} \quad (8.51)$$

což můžeme maticově zapsat ve tvaru

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{p}_3 & \dot{p}_1 - i\dot{p}_2 \\ \dot{p}_1 + i\dot{p}_2 & -\dot{p}_3 \end{pmatrix} = (E_1 - E_2) \begin{pmatrix} 0 & p_1 - ip_2 \\ -(p_1 + ip_2) & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.52)$$

Ihned vidíme, že třetí složka vektoru polarizace je konstantní

$$\dot{p}_3 = 0 \implies p_3(t) = p_3. \quad (8.53)$$

Označíme si $z = p_1 - ip_2$, rovnice (8.52) jsou pak ekvivalentní

$$i\hbar \dot{z} = (E_1 - E_2) z \longrightarrow z(t) = z(0) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t}. \quad (8.54)$$

Matice hustoty v čase t je pak rovna

$$\rho(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+p_3 & (p_1 - ip_2) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t} \\ (p_1 + ip_2) e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t} & 1-p_3 \end{pmatrix} = \rho(\vec{p}(t)), \quad (8.55)$$

kde vektor polarizace v čase t má tvar (zavedli jsme $\alpha = \frac{E_1 - E_2}{\hbar}$)

$$\begin{aligned} p_1(t) &= p_1 \cos \alpha t - p_2 \sin \alpha t, \\ p_2(t) &= p_1 \sin \alpha t + p_2 \cos \alpha t, \\ p_3(t) &= p_3. \end{aligned} \quad (8.56)$$

Časový vývoj odpovídá rotaci vektoru polarizace o úhel αt okolo osy z

$$\vec{p}(t) = R_z(\alpha t)\vec{p} = \begin{pmatrix} \cos \alpha t & -\sin \alpha t & 0 \\ \sin \alpha t & \cos \alpha t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 \cos \alpha t - p_2 \sin \alpha t \\ p_1 \sin \alpha t + p_2 \cos \alpha t \\ p_3 \end{pmatrix}. \quad (8.57)$$

8.3 Matice hustoty složeného kvantového systému, redukované stavy

Uvažujme kvantový systém složený ze dvou částic A , B , s Hilbertovými prostory $\mathcal{H}_A$ a $\mathcal{H}_B$, tj. celkový Hilbertův prostor je $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Označíme ON bázi v $\mathcal{H}_A$ pomocí ketů $|m\rangle$ a ON bázi v $\mathcal{H}_B$ pomocí $|\mu\rangle$. Báze v $\mathcal{H}$ je potom tvořena vektory $|m\rangle \otimes |\mu\rangle \equiv |m, \mu\rangle$. Obecný smíšený stav je matice hustoty $\hat{\rho}$ na $\mathcal{H}$, tj. pozitivní hermitovský operátor s jednotkovou stopou. V bázi $\{|m, \mu\rangle\}$ má tvar

$$\hat{\rho} = \sum_{m, \mu, n, \nu} \rho_{m\mu, n\nu} |m, \mu\rangle \langle n, \nu|, \quad \rho_{m\mu, n\nu} = \langle m, \mu | \hat{\rho} | n, \nu \rangle. \quad (8.58)$$

Uvažujme nyní otázku, jak popsat stav částice A , resp. B , pokud známe stav složeného systému $\hat{\rho}$. Označme tyto tzv. redukované stavy jako $\hat{\rho}_A$, resp. $\hat{\rho}_B$. Redukované stavy jsou určeny požadavkem, aby výsledky měření všech lokálních pozorovatelných na částici A (B) byly v redukovaném stavu $\hat{\rho}_A$ ($\hat{\rho}_B$) stejné, jako ve stavu $\hat{\rho}$, tj.

$$\forall \quad \hat{C}^{(A)} = \hat{C} \otimes \hat{I}_B, \quad \langle \hat{C}^{(A)} \rangle_{\hat{\rho}} = \langle \hat{C} \rangle_{\hat{\rho}_A}, \quad (8.59)$$

analogicky pro $\hat{\rho}_B$. Pro maticové elementy lokální pozorovatelné na částici A platí

$$C_{k\alpha, l\beta}^{(A)} = \langle k, \alpha | \hat{C} \otimes \hat{I}_B | l, \beta \rangle = \langle k | \hat{C} | l \rangle \delta_{\alpha\beta} = C_{k,l} \delta_{\alpha\beta}.$$

Ze vztahu pro střední hodnotu pozorovatelné (8.10) dostaneme

$$\begin{aligned} \langle \hat{C}^{(A)} \rangle_{\hat{\rho}} &= \text{Tr} \left(\hat{C}^{(A)} \hat{\rho} \right) = \text{Tr} \left(\sum_{m, \mu} C_{k\alpha, m\mu}^{(A)} \rho_{m\mu, n\nu} \right) = \text{Tr} \left(\sum_{m, \mu} C_{k,m} \rho_{m\mu, n\nu} \right) \\ &= \sum_{m, \mu, n} C_{n,m} \rho_{m\mu, n\mu}. \end{aligned} \quad (8.60)$$

Podobným způsobem upravíme střední hodnotu $\hat{C}$ ve stavu $\hat{\rho}_A$

$$\langle \hat{C} \rangle_{\hat{\rho}_A} = \text{Tr} \left(\hat{C} \hat{\rho}_A \right) = \text{Tr} \left(\sum_m C_{k,m} \rho_{Am,n} \right) = \sum_{m,n} C_{n,m} \rho_{Am,n}. \quad (8.61)$$

Porovnáním (8.60) a (8.61) nalezneme maticové elementy redukovaného stavu $\hat{\rho}_A$

$$\langle m | \hat{\rho}_A | n \rangle = \rho_{Am,n} = \sum_{\mu} \rho_{m\mu, n\mu}. \quad (8.62)$$

Tímto vztahem se definuje částečná stopa přes systém B

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho} = \sum_{m,n} \left(\sum_{\mu} \rho_{m\mu,n\mu} \right) |m\rangle\langle n|. \quad (8.63)$$

Analogicky redukovaný stav částice B dostaneme částečnou stopou přes systém A

$$\hat{\rho}_B = \text{Tr}_A \hat{\rho} = \sum_{\mu,\nu} \left(\sum_m \rho_{m\mu,m\nu} \right) |\mu\rangle\langle\nu|. \quad (8.64)$$

8.3.1 Dva spiny $\frac{1}{2}$ v singletním stavu

Uvažujme dva spiny $\frac{1}{2}$ v singletním stavu

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|z, +\rangle \otimes |z, -\rangle - |z, -\rangle \otimes |z, +\rangle).$$

Určíme nejprve matici hustoty tohoto stavu a redukované stavy ρ_A a ρ_B . Budeme pracovat v bázi $\{|z, \pm\rangle \otimes |z, \pm\rangle \equiv |z, \pm; z, \pm\rangle\}$ analogicky jako v (8.28), tj.

$$\begin{aligned} |z, +\rangle \otimes |z, +\rangle &\equiv |z, +; z, +\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & |z, +\rangle \otimes |z, -\rangle &\equiv |z, +; z, -\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |z, -\rangle \otimes |z, +\rangle &\equiv |z, -; z, +\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & |z, -\rangle \otimes |z, -\rangle &\equiv |z, -; z, -\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Matice hustoty singletního stavu je projektor

$$\begin{aligned} |\psi^-\rangle\langle\psi^-| &= \frac{1}{2} \left(|z, +; z, -\rangle\langle z, +; z, -| - |z, +; z, -\rangle\langle z, -; z, +| - \right. \\ &\quad \left. - |z, -; z, +\rangle\langle z, +; z, -| + |z, -; z, +\rangle\langle z, -; z, +| \right) \\ &\equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Redukované stavy obou částic jsou stejné

$$\hat{\rho}_A = \hat{\rho}_B = \frac{1}{2} \left(|z, +\rangle\langle z, +| + |z, -\rangle\langle z, -| \right) = \frac{1}{2} \hat{I} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

jsou rovny maximálně smíšenému stavu. Projekce spinů jednotlivých částic tedy nejsou vůbec určené — do všech směrů jsou pravděpodobnosti kladné i záporné projekce rovné $\frac{1}{2}$. Složený systém je ale v čistém (provázaném) stavu, takže obsahuje maximální možné množství informací. Ty jsou ve vzájemných korelacích mezi výsledky měření projekcí spinů jednotlivých částic. Pokud naměříme kladnou projekci spinu první částice do osy z , pak stav obou částic bude

$$\hat{\rho}_{\hat{S}_z^{(1)}=+\hbar/2} = |z, +; z, -\rangle\langle z, +; z, -|,$$

což je čistý stav kdy druhá částice má zápornou hodnotu projekce spinu do osy z . Pokud výsledek měření na první částici bude záporná projekce, pak stav bude

$$\hat{\rho}_{\hat{S}_z^{(1)}=-\hbar/2} = |z, -; z, +\rangle\langle z, -; z, +|.$$

To je opět čistý stav, kde druhá částice má kladnou projekci spinu do osy z . Výsledky měření projekcí spinu 1. a 2. částice do osy z jsou tedy perfektně antikorelovány. Stejně perfektní antikorelace platí pro měření projekce spinu do jakéhokoli směru $\vec{n}$ stejného pro obě částice. Singletní stav je totiž rotačně invariantní, tj.

$$\hat{R}_A \otimes \hat{R}_B |\psi^-\rangle = |\psi^-\rangle,$$

kde $\hat{R}_{(A,B)}$ jsou stejné rotace spinu částice A, B . Singlet je vlastní vektor celkového momentu hybnosti s vlastními čísly $j = m = 0$, takže pro všechny složky celkového momentu hybnosti platí $\hat{J}_k |\psi^-\rangle = 0$. Odsud skutečně plyne rotační invariance ($\vec{u}$ je libovolný jednotkový vektor)

$$\hat{R}_A \otimes \hat{R}_B |\psi^-\rangle = \hat{R} |\psi^-\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{u} \cdot \hat{J}} |\psi^-\rangle = e^0 |\psi^-\rangle = |\psi^-\rangle.$$

Označme $\hat{R}(\vec{n})$ rotaci, která změní $|z, \pm\rangle$ na $|\vec{n}, \pm\rangle$

$$\hat{R}(\vec{n}) |z, \pm\rangle = |\vec{n}, \pm\rangle.$$

Díky rotační invarianci pak singletní stav můžeme zapsat ve tvaru

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\vec{n}, +\rangle \otimes |\vec{n}, -\rangle - |\vec{n}, -\rangle \otimes |\vec{n}, +\rangle),$$

pro libovolný směr $\vec{n}$. Projekce spinů 1. a 2. druhé částice do stejného směru jsou tedy vždy perfektně antikorelovány.

Korelace jsou samozřejmě přítomné i v klasické fyzice, resp. v klasické teorii informace, ale kvantové korelace mohou být mnohem silnější. Situace jako u singletního stavu, kdy jsou veškeré informace obsaženy v korelacích, nemůže v klasické fyzice nastat. Uvažujme dvě klasické náhodné veličiny A a B s hodnotami a_m a b_μ , které nalezneme s pravděpodobnostmi $p_{m,\mu}$. Pak můžeme zavést marginální rozdělení veličin A , resp. B , jako

$$p_m^A = \sum_{\mu} p_{m,\mu}, \quad p_\mu^B = \sum_m p_{m,\mu}.$$

Pokud jsou veličiny A a B nezávislé, pak $p_{m,\mu} = p_m^A p_\mu^B$, v opačném případě mohou být nějakým způsobem korelované. Lze ukázat, že v klasickém případě platí pro Shannonovy entropie pravděpodobnostních rozdělení následující nerovnosti

$$\max \{S(\{p_m^A\}), S(\{p_\mu^B\})\} \leq S(\{p_{m,\mu}\}) \leq S(\{p_m^A\}) + S(\{p_\mu^B\}).$$

Společné rozdělení $\{p_{m,\mu}\}$ musí tedy mít alespoň takovou entropii, jakou mají marginální rozdělení $\{p_m^A\}$, $\{p_\mu^B\}$. V kvantové mechanice to ale neplatí, jak je vidět na příkladu singletního stavu, kdy

$$\begin{aligned} S(|\psi^-\rangle\langle\psi^-|) &= 0, \\ S(\hat{\rho}_A) = S(\hat{\rho}_B) &= \ln 2. \end{aligned}$$

Pro von Neumannovy entropie matice hustoty složeného systému $\hat{\rho}$ a redukovaných stavů $\hat{\rho}_{A,B}$ lze odvodit tzv. Araki-Liebovy nerovnosti

$$|S(\hat{\rho}_A) - S(\hat{\rho}_B)| \leq S(\hat{\rho}) \leq S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_B).$$

8.4 Časový vývoj otevřeného systému

Pod pojmem otevřený kvantový systém se myslí systém interagující s nějakým okolním prostředím, rezervoárem. Celkový Hilbertův prostor je $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$. Hamiltonán se dá zapsat ve tvaru

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes \hat{I}_R + \hat{I}_S \otimes \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}, \quad (8.65)$$

kde jednotlivé členy postupně popisují hamiltonián systému, rezervoáru a jejich interakci. Řekněme, že v čase $t = 0$ je systém připraven ve stavu $|\psi_S\rangle$ a rezervoár je ve stavu $|\psi_R\rangle$. Složený systém je pak v separabilním čistém stavu

$$|\Psi(0)\rangle = |\psi_S\rangle \otimes |\psi_R\rangle.$$

Evoluce složeného systému je unitární, tj. z čistého stavu $|\Psi(0)\rangle$ se za čas t stane jiný čistý stav $|\Psi(t)\rangle$ daný vztahem

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle,$$

kde $\hat{U}(t)$ je operátor časového vývoje pro celkový hamiltonián $\hat{H}$. V případě, kdy $\hat{H}$ nezávisí na čase, je $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$. Časový vývoj systému nebo rezervoáru ale unitární není, protože $\hat{U}(t) \neq \hat{U}_S(t) \otimes \hat{U}_R(t)$ (pokud je interakční hamiltonián $\hat{H}_{SR}$ netriviální). Vlivem interakce totiž dojde k provázání systému a rezervoáru a stav složeného systému $|\Psi(t)\rangle$ nemusí být separabilní. Redukovaná matice hustoty systému $\hat{\rho}_S(t)$ v čase t je obecně smíšený stav. Vlivem interakce s okolím dochází k dekoherenci stavu systému.

Schrödingerovu rovnici pro složený systéme s hamiltoniánem (8.65) většinou neumíme vyřešit. Nicméně, pro redukovaný stav systému $\hat{\rho}_S$ lze za jistých předpokladů (slabá interakce systému a rezervoáru, Markovovská aproximace) odvodit tzv. řídicí rovnici (v Lindbladovském tvaru)

$$\frac{\partial \hat{\rho}_S}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}'_S, \hat{\rho}_S] + \sum_i \gamma_i \left(\hat{L}_i \hat{\rho}_S \hat{L}_i^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_i^\dagger \hat{L}_i, \hat{\rho}_S \} \right). \quad (8.66)$$

První část odpovídá unitárními vývoji s hamiltoniánem $\hat{H}'_S$ (je obecně různý od $\hat{H}_S$), druhá představuje neunitární část, kterou můžeme popsat např. dekoherenci nebo disipaci energie. $\hat{L}_i$ jsou tzv. Lindbladovy skokové operátory.

8.5 Příklady

Cvičení 25. *Kvantový LHO je v tepelné rovnováze s okolím o teplotě T . Nalezněte matici hustoty termálního stavu a určete střední hodnotu energie a pravděpodobnost naměření hodnoty energie $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$.*

Návod: Termální stav je kvantovou analogií pravděpodobnostního rozdělení na fázovém prostoru pro kanonický soubor

$$w(x, p) = \frac{1}{z} e^{-\beta H(x, p)}, \quad z = \int_{\Gamma} e^{-\beta H(x, p)} dx dp, \quad \beta = \frac{1}{kT}.$$

Matice hustoty termálního stavu má tedy tvar

$$\hat{\rho}_T = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{Tr } e^{-\beta \hat{H}}}.$$

Budeme pracovat v energetické reprezentaci, tj. bázi vlastních vektorů hamiltoniánu LHO

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle.$$

Pro hamiltonián, resp. libovolnou funkci $\hat{H}$, máme spektrální rozklad

$$\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n |n\rangle \langle n| \quad \implies \quad f(\hat{H}) = \sum_{n=0}^{\infty} f(E_n) |n\rangle \langle n|.$$

Odsud dostaneme

$$\begin{aligned} e^{-\beta \hat{H}} &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n|, \\ \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}} &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} = e^{-\frac{\beta \hbar \omega}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega n} = \frac{e^{-\frac{\beta \hbar \omega}{2}}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} = z. \end{aligned}$$

Matice hustoty termálního stavu LHO je tedy rovna

$$\hat{\rho}_T = (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega n} |n\rangle \langle n|.$$

Pro střední hodnotu energie LHO v termálním stavu dostaneme

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle_{\hat{\rho}_T} &= \text{Tr} \left(\hat{H} \hat{\rho}_T \right) = (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \text{Tr} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega n} (m + \frac{1}{2}) \hbar \omega |n\rangle \underbrace{\langle n|m\rangle}_{\delta_{nm}} \langle m| \right) \\
&= (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega n} (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega = (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \hbar \omega \left(\frac{1}{2} \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} + \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\beta \hbar \omega n} \right) \\
&= \frac{\hbar \omega}{2} - (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} = \frac{\hbar \omega}{2} + \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}.
\end{aligned}$$

Energii E_n naměříme s pravděpodobností

$$W_{\hat{\rho}_T, E_n} = \langle n | \hat{\rho}_T | n \rangle = (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) e^{-\beta \hbar \omega n} = \frac{1}{z} e^{-\beta E_n}.$$

Cvičení 26. Uvažujte LHO s $\omega = \frac{\hbar}{M}$ v čistém stavu popsaném superpozicí vlastních vektorů hamiltoniánu

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle.$$

Jaká je střední hodnota energie a polohy LHO v tomto stavu? Provedeme měření energie bez rozlišení výsledků. Jaké budou střední hodnoty energie a polohy po tomto měření?

Návod: Pro střední hodnotu energie v čistém stavu $|\psi\rangle$ platí

$$\langle \hat{H} \rangle_{\psi} = \frac{1}{3}E_0 + \frac{2}{3}E_1 = \frac{7}{6}\hbar\omega.$$

Operátor polohy rozepíšeme pomocí posunovacích operátorů

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-), \quad \hat{a}_{\pm}|n\rangle = \alpha_n^{\pm}|n \pm 1\rangle.$$

Pro střední hodnotu polohy pak najdeme

$$\begin{aligned}
\langle \hat{X} \rangle_{\psi} &= \frac{1}{3} \underbrace{\langle 0 | \hat{X} | 0 \rangle}_0 + \frac{\sqrt{2}}{3} \left(\langle 1 | \hat{X} | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{X} | 1 \rangle \right) + \frac{2}{3} \underbrace{\langle 1 | \hat{X} | 1 \rangle}_0 \\
&= \frac{1}{3} (\langle 1 | \hat{a}_+ | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{a}_- | 1 \rangle) = \frac{1}{3} (\alpha_0^+ + \alpha_1^-) = \frac{2}{3}.
\end{aligned}$$

Matice hustoty čistého stavu před měřením energie je

$$\begin{aligned}
\hat{\rho} &= |\psi\rangle\langle\psi| = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}|0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle \right) \left(\frac{1}{\sqrt{3}}\langle 0| + \sqrt{\frac{2}{3}}\langle 1| \right) \\
&= \frac{1}{3}|0\rangle\langle 0| + \frac{\sqrt{2}}{3}(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|) + \frac{2}{3}|1\rangle\langle 1|.
\end{aligned}$$

Po měření energie bez rozlišení výsledků je LHO ve smíšeném stavu popsaném maticí hustoty

$$\hat{\rho}_{\hat{H}} = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| \hat{\rho} |n\rangle \langle n| = \frac{1}{3} |0\rangle \langle 0| + \frac{2}{3} |1\rangle \langle 1|.$$

Střední hodnota energie se nezmění

$$\langle \hat{H} \rangle_{\hat{\rho}_{\hat{H}}} = \text{Tr} \left(\hat{H} \hat{\rho} \right) = \frac{1}{3} E_0 + \frac{2}{3} E_1 = \frac{7}{6} \hbar \omega,$$

protože závisí jen na diagonálních maticových elementech, které jsou pro $\hat{\rho}$ a $\hat{\rho}_{\hat{H}}$ stejné. Střední hodnota polohy naopak závisí na nediagonálních maticových elementech, protože operátor polohy je v energetické reprezentaci nediagonální. Střední hodnota polohy ve stavu $\hat{\rho}_{\hat{H}}$ je tedy nulová (využijeme invarianci stopy vůči cyklické záměně)

$$\begin{aligned} \langle \hat{X} \rangle_{\hat{\rho}_{\hat{H}}} &= \text{Tr} \left(\hat{X} \hat{\rho}_{\hat{H}} \right) = \text{Tr} \left(\hat{X} \left(\frac{1}{3} |0\rangle \langle 0| + \frac{2}{3} |1\rangle \langle 1| \right) \right) = \text{Tr} \left(\frac{1}{3} \langle 0| \hat{X} |0\rangle + \frac{2}{3} \langle 1| \hat{X} |1\rangle \right) \\ &= \frac{1}{3} \langle 0| \hat{X} |0\rangle + \frac{2}{3} \langle 1| \hat{X} |1\rangle = 0. \end{aligned}$$

Cvičení 27. Uvažujte dvouhladinový atom s bazickými stavy $|g\rangle$ a $|e\rangle$, které popisují základní a excitovaný stav s energiemi E_g a E_e . Atom interaguje s okolím a může dojít ke spontánní deexcitaci. Tato interakce je popsána řídicí rovnicí s jediným Lindbladovým operátorem $\hat{L}$ ($\gamma > 0$)

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \gamma \left(\hat{L} \hat{\rho} \hat{L}^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{L}^\dagger \hat{L}, \hat{\rho} \} \right), \quad (8.67)$$

kde

$$\hat{H} = E_g |g\rangle \langle g| + E_e |e\rangle \langle e|, \quad \hat{L} = |g\rangle \langle e|, \quad \hat{L}^\dagger = |e\rangle \langle g|. \quad (8.68)$$

Najděte stav atomu v čase t , nejprve pro obecný počáteční stav a pak pro čistý stav $|e\rangle$. Jaký je limitní stav pro $t \rightarrow \infty$?

Návod: V bázi $\{|g\rangle, |e\rangle\}$ jsou operátory (8.68) reprezentovány maticemi

$$H = \begin{pmatrix} E_g & 0 \\ 0 & E_e \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Obecnou matici hustoty napíšeme jako

$$\rho = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad a, d \in \mathbb{R}, \quad b, c \in \mathbb{C}, \quad a + d = \text{Tr} \rho = 1.$$

Řídicí rovnici (8.67) lze po roznásobení upravit do tvaru

$$\begin{pmatrix} \dot{a} & \dot{b} \\ \dot{c} & \dot{d} \end{pmatrix} = \frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & \Delta b \\ -\Delta c & 0 \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} d & -\frac{b}{2} \\ -\frac{c}{2} & -d \end{pmatrix},$$

kde jsme označili $\Delta = E_e - E_g$. Pro jednotlivé členy matice hustoty dostaneme diferenciální rovnice

$$\begin{aligned}\dot{a} &= \gamma d, \\ \dot{b} &= \frac{i}{\hbar} \Delta b - \frac{\gamma}{2} b, \\ \dot{c} &= -\frac{i}{\hbar} \Delta c - \frac{\gamma}{2} c, \\ \dot{d} &= -\gamma d.\end{aligned}$$

Řešení pro b, c, d lze napsat okamžitě

$$\begin{aligned}b(t) &= e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t} e^{-\frac{\gamma}{2} t} b(0), \\ c(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t} e^{-\frac{\gamma}{2} t} c(0), \\ d(t) &= e^{-\gamma t} d(0).\end{aligned}$$

Vidíme, že maticové elementy b, c, d exponenciálně klesají k nule. Pro a pak najdeme řešení

$$a(t) = a(0) + (1 - e^{-\gamma t}) d(0).$$

Obecná matice hustoty v čase t je pak rovna

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} a(0) + (1 - e^{-\gamma t}) d(0) & e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t} e^{-\frac{\gamma}{2} t} b(0) \\ e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t} e^{-\frac{\gamma}{2} t} c(0) & e^{-\gamma t} d(0) \end{pmatrix}.$$

V limitě $t \rightarrow \infty$ bude matice hustoty

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \rho(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv |g\rangle\langle g|,$$

nezávisle na počátečním stavu. Atom tedy vždy skončí v základním stavu $|g\rangle$. Pro počáteční stav $|e\rangle$ je $a(0) = b(0) = c(0) = 0$ a $d(0) = 1$. Stav atomu v čase t je potom

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} 1 - e^{-\gamma t} & 0 \\ 0 & e^{-\gamma t} \end{pmatrix}.$$

Pravděpodobnost nalezení atomu v excitovaném stavu s časem klesá exponenciálně ($p_e = e^{-\gamma t}$), pravděpodobnost jeho nalezení v základním stavu naopak roste k jedné ($p_g = 1 - e^{-\gamma t}$).

Cvičení 28. Uvažujte otevřenou dynamiku spinu $\frac{1}{2}$ s řídící rovnicí tvaru (8.66)

1. s jedním Lindbladovým operátorem ($\gamma > 0$)

$$\hat{L} = |z, +\rangle\langle z, +|,$$

2. se dvěma Lindbladovými operátory ($\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma > 0$)

$$\begin{aligned}\hat{L}_1 &= |z, +\rangle\langle z, -| + |z, -\rangle\langle z, +|, \\ \hat{L}_2 &= |z, +\rangle\langle z, -| - |z, -\rangle\langle z, +|.\end{aligned}$$

V obou případech je hamiltonián spinu roven $\hat{H} = E|z, +\rangle\langle z, +| - E|z, -\rangle\langle z, -|$. Nalezněte řešení řídicí rovnice s počáteční podmínkou $\hat{\rho}(\vec{p})(0)$ tvaru (8.35). Jak se s časem mění vektor polarizace spinu $\vec{p}(t)$? Jaká je jeho limitní hodnota pro $t \rightarrow \infty$?

Návod: Budeme pracovat v bázi vlastních vektorů $\hat{S}_z$ (8.28). Hamiltonián je pak reprezentován maticí

$$H = E \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Matici hustoty v čase t zapíšeme ve tvaru (8.35)

$$\rho(\vec{p}(t)) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + p_3(t) & p_1(t) - ip_2(t) \\ p_1(t) + ip_2(t) & 1 - p_3(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + p_3(t) & z(t) \\ \bar{z}(t) & 1 - p_3(t) \end{pmatrix}.$$

Pro unitární část řídicí rovnice dostaneme

$$-\frac{i}{\hbar} [H, \rho] = -i \frac{E}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & z \\ -\bar{z} & 0 \end{pmatrix}.$$

1. Matice Lindbladova operátoru je

$$L = L^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Řídicí rovnici lze upravit do tvaru

$$\dot{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \dot{p}_3 & \dot{z} \\ \dot{\bar{z}} & -\dot{p}_3 \end{pmatrix} = -i \frac{E}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & z \\ -\bar{z} & 0 \end{pmatrix} - \frac{\gamma}{4} \begin{pmatrix} 0 & z \\ \bar{z} & 0 \end{pmatrix}.$$

Vidíme, že $\dot{p}_3 = 0$, tj. třetí složka vektoru polarizace se s časem nemění

$$p_3(t) = p_3(0).$$

Pro z máme diferenciální rovnici

$$\dot{z} = - \left(i \frac{2E}{\hbar} + \frac{\gamma}{2} \right) z,$$

jejím řešením je

$$z(t) = e^{-i \frac{2E}{\hbar} t} e^{-\frac{\gamma}{2} t} z(0).$$

Protože $z = p_1 - ip_2$, dostaneme pro složky vektoru polarizace řešení

$$\begin{aligned} p_1(t) &= \frac{z(t) + \bar{z}(t)}{2} = \cos\left(\frac{2E}{\hbar}t\right) e^{-\frac{\gamma}{2}t} p_1(0), \\ p_2(t) &= \frac{\bar{z}(t) - z(t)}{2i} = \sin\left(\frac{2E}{\hbar}t\right) e^{-\frac{\gamma}{2}t} p_2(0). \end{aligned}$$

První dvě složky polarizace s časem exponenciálně klesají k nule. Limitní stav má vektor polarizace $\vec{p}(\infty) = (0, 0, p_3(0))$, což odpovídá matici hustoty

$$\rho(\infty) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + p_3(0) & 0 \\ 0 & 1 - p_3(0) \end{pmatrix}.$$

Dekoherence tohoto typu je tzv. rozfázování (dephasing) složek polarizace kolmých na osu z .

2. Matice Lindbladových operátorů jsou

$$L_1 = L_1^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_2 = -L_2^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Řídící rovnici lze upravit do tvaru

$$\dot{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \dot{p}_3 & \dot{z} \\ \dot{\bar{z}} & -\dot{p}_3 \end{pmatrix} = -i \frac{E}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & z \\ -\bar{z} & 0 \end{pmatrix} - \gamma \begin{pmatrix} 2p_3 & z \\ \bar{z} & -2p_3 \end{pmatrix}.$$

Diferenciální rovnice pro třetí složku

$$\dot{p}_3 = -4\gamma p_3$$

má řešení

$$p_3(t) = e^{-4\gamma t} p_3(0).$$

Podobně pro z máme rovnici

$$\dot{z} = -\left(i \frac{2E}{\hbar} + 2\gamma\right) z,$$

jejím řešením je

$$z(t) = e^{-i \frac{2E}{\hbar} t} e^{-2\gamma t} z(0).$$

První dvě složky vektoru polarizace jsou tedy

$$\begin{aligned} p_1(t) &= \cos\left(\frac{2E}{\hbar}t\right) e^{-2\gamma t} p_1(0), \\ p_2(t) &= \sin\left(\frac{2E}{\hbar}t\right) e^{-2\gamma t} p_2(0). \end{aligned}$$

Vidíme, že vektor polarizace klesá s časem k nule, tj. limitou je $\vec{p}(\infty) = (0, 0, 0)$, což odpovídá maximálně smíšenému (nepolarizovanému) stavu

$$\rho(\infty) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Tento typ dekoherence se nazývá depolarizace.

Kapitola 9

Variační metoda a WKB aproximace

9.1 Variační metoda

Variační metodu můžeme použít pro odhad vlastních čísel hamiltoniánu se zdola omezeným spektrem. Pokud E_0 je energie základního stavu, pak zřejmě platí

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi \geq E_0, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Pro daný problém si vhodně zvolíme množinu zkušebních normalizovaných vektorů $|\psi(\alpha_i)\rangle$ (obecně n -parametrickou) a spočítáme funkci

$$E(\alpha_i) = \langle \psi(\alpha_i) | \hat{H} | \psi(\alpha_i) \rangle. \quad (9.1)$$

Odhad energie základního stavu variační metodou pak dostaneme jako minimum funkce $E(\alpha_i)$, tj.

$$E_0^{VM} = E(\alpha_i^0), \quad \left. \frac{\partial E}{\partial \alpha_i} \right|_{\alpha_i^0} = 0.$$

Přibližný vlastní vektor je

$$|\psi_0^{VM}\rangle = |\psi(\alpha_i^0)\rangle.$$

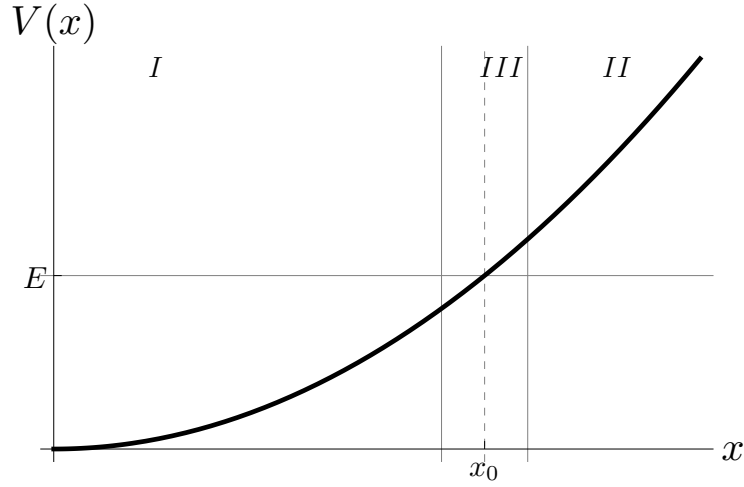
Hodnotu první excitované hladiny můžeme odhadnout nalezením vázaného extrému funkce (9.1) s podmínkou

$$\langle \psi(\alpha_i) | \psi_0^{VM} \rangle = 0.$$

Analogicky můžeme postupovat pro vyšší excitované hladiny.

9.2 WKB aproximace

WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin) aproximace je metoda pro nalezení přibližného řešení lineárních diferenciálních rovnic s nekonstantními koeficienty. V kvantové mechanice je



Obrázek 9.1: Průběh potenciálu $V(x)$. Pro danou hodnotu energie E je x_0 klasický bod obratu. Oblast I je klasicky dovolená, oblast II klasicky zakázaná a oblast III je přechodová.

často využívána pro semiklasické řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice pro částici na přímce v potenciálu $V(x)$, který se nemění příliš rychle,

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\psi''(x) = (E - V(x))\psi(x). \quad (9.2)$$

Označme jako x_0 klasický bod obratu daný podmínkou $E = V(x_0)$. Uvažujme nejprve případ, kdy $V(x)$ v bodě obratu x_0 roste. Reálnou osu rozdělíme na tři oblasti (viz. obrázek 9.1)

I Klasicky povolená oblast — $E \gg V(x)$

II Klasicky zakázaná oblast — $E \ll V(x)$

III Přechodová oblast — $E \sim V(x)$

V klasicky povolené oblasti hledáme řešení ve tvaru

$$\psi_I(x) = A(x)e^{i\varphi(x)},$$

kde A a φ jsou reálné funkce. Dosazením do (9.2) získáme rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2M}(A'' + 2iA'\varphi' - A\varphi'^2 + iA\varphi'') = (E - V)A, \quad (9.3)$$

kde vystupují pouze derivace φ . Zavedením $k(x) = \varphi'(x)$ přepíšeme rovnici do tvaru

$$-\frac{\hbar^2}{2M}(A'' + 2iA'k - Ak^2 + iAk') = (E - V)A. \quad (9.4)$$

Rovnici rozdělíme na reálnou a imaginární část, obě musí být splněné samostatně. Z rovnice pro imaginární část plyne

$$2A'k + Ak' = 0 \Rightarrow A(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}}.$$

V reálné části rovnice (9.4) zanedbáme člen A'' (z předpokladu, že $V(x)$ se nemění příliš rychle plyne, že ani $A(x)$ se nebude měnit příliš rychle) a dostaneme tak algebraickou rovnici pro $k(x)$

$$\frac{\hbar^2}{2M} Ak^2 = (E - V)A.$$

Jejím řešením je

$$k(x) = \pm \frac{p(x)}{\hbar}, \quad p(x) = \sqrt{2M(E - V(x))}, \quad (9.5)$$

kde $p(x)$ je velikost klasické hybnost v bodě x . Řešení v klasicky povolené oblasti I tedy můžeme zapsat ve tvaru kombinace oscilujících exponenciál

$$\psi_I(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx'\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx'\right),$$

respektive

$$\psi_I(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' + \varphi_0\right). \quad (9.6)$$

V klasicky zakázané oblasti stejným postupem dostaneme řešení ve tvaru kombinace rostoucí a klesající exponenciály

$$\psi_{II}(x) = \frac{\tilde{C}_1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'\right) + \frac{\tilde{C}_2}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'\right).$$

V klasickém bodě obratu je lokální hybnost $p(x_0)$ nulová, takže řešení $\psi_I(x)$ a $\psi_{II}(x)$ v něm nejsou definována. Musíme tedy uvažovat nějaké okolí bodu x_0 jako přechodovou oblast, ve které aproximujeme potenciál přímkou. V prvním řádu Taylorova rozvoje v okolí bodu x_0 platí

$$V(x) \simeq V(x_0) + (x - x_0) \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_0} = E + F(x - x_0), \quad F > 0.$$

Dosazením do (9.2) dostaneme rovnici

$$\psi'' = \frac{2MF}{\hbar^2} (x - x_0) \psi.$$

Substitucí

$$y = \left(\frac{2MF}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} (x - x_0), \quad \phi(y) = \psi(x)$$

převédeme rovnici do kanonického tvaru

$$\phi'' - y\phi = 0.$$

Řešení této diferenciální rovnice jsou Airyho funkce Ai a Bi. Airyho funkce prvního druhu Ai lze zapsat implicitně pomocí integrálu

$$\text{Ai}(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos \left(\frac{t^3}{3} + yt \right) dt.$$

Pro dostatečně malá nebo velká y má funkce Ai následující chování

$$\begin{aligned} \text{Ai}(y) &\stackrel{y \ll 0}{\approx} \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}} \sin \left(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right), \\ \text{Ai}(y) &\stackrel{y \gg 0}{\approx} \frac{1}{2\sqrt{\pi}(y)^{\frac{1}{4}}} \exp \left(-\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}} \right). \end{aligned} \quad (9.7)$$

Airyho funkce druhého druhu Bi je definována vztahem

$$\text{Bi}(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left[\exp \left(-\frac{t^3}{3} + yt \right) + \sin \left(\frac{t^3}{3} + yt \right) \right] dt.$$

Má podobné chování jako Ai(y) pro záporná y , pro kladná exponenciálně diverguje

$$\begin{aligned} \text{Bi}(y) &\stackrel{y \ll 0}{\approx} \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}} \cos \left(\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right), \\ \text{Bi}(y) &\stackrel{y \gg 0}{\approx} \frac{1}{\sqrt{\pi}(y)^{\frac{1}{4}}} \exp \left(\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}} \right). \end{aligned}$$

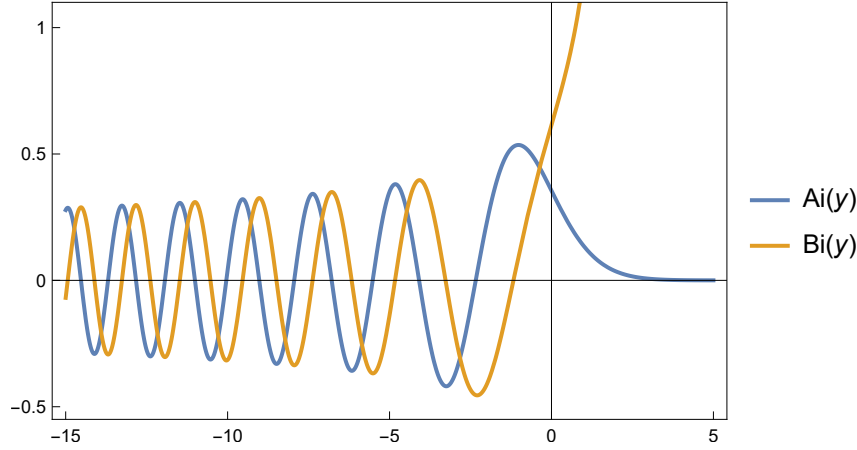
Pro ilustraci je průběh Airyho funkcí v okolí nuly znázorněn v Obrázku 9.2.

Z chování Airyho funkcí lze vidět, že nám umožní spojitě navázat oscilující řešení v klasicky povolené oblasti na exponenciální řešení v klasicky zakázané oblasti. Skutečně, přechodem zpět k proměnné x dostaneme následující propojovací formule

$$\frac{1}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \longleftrightarrow \frac{1}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx' \right), \quad (9.8)$$

$$\frac{1}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx' \right). \quad (9.9)$$

Pokud potenciál v bodě obratu x_0 klesá, pak musíme ve všech integrálech prohodit meze.



Obrázek 9.2: Airyho funkce $Ai(y)$ a $Bi(y)$ v okolí nuly.

9.2.1 Vázané stavy a kvantovací podmínka

Hledejme nyní přibližné řešení rovnice (9.2) pro potenciál tvaru jako na obr. 9.3. Označme x_1 a x_2 klasické body obratu. Vázaný stav musí být kvadraticky integrabilní, takže řešení v oblasti II_2 musí mít tvar

$$\psi_{II_2}(x) = \frac{\tilde{C}_2}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx' \right).$$

Propojovacím vzorcem (9.8) dostaneme nalevo od x_2 řešení ve tvaru

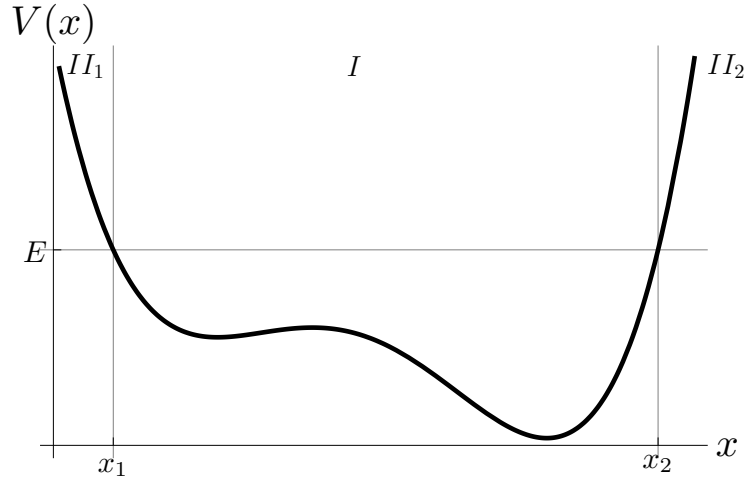
$$\psi_{I_2}(x) = \frac{2\tilde{C}_2}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right). \quad (9.10)$$

V klasicky povolené oblasti I tedy volíme $C = 2\tilde{C}_2$ a $\varphi_0 = \pi/4$. Přechod mezi exponenciálním a sinusovým řešením je doprovázen fázovým zrychlením o $\pi/4$. Stejnou funkci pak budeme chtít ve druhém bodě obratu x_1 napojit opět na exponenciálu klesající k nule pro $x \rightarrow -\infty$

$$\psi_{II_1}(x) = \frac{\tilde{C}_1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx' \right),$$

kde $\tilde{C}_1 = (-1)^n \tilde{C}_2$, protože vlastní funkci hamiltoniánu částice na přímce lze zvolit reálnou. Tím dojde k dalšímu zrychlení o $\pi/4$. Na intervalu $\langle x_1, x_2 \rangle$ vlnová funkce získá celkovou fázi

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx + 2 \times \frac{\pi}{4},$$



Obrázek 9.3: Průběh potenciálu $V(x)$. Pro danou hodnotu energie E jsou $x_{1,2}$ klasické body obratu. Oblast I je klasicky dovolená, oblasti $II_{1,2}$ klasicky zakázané.

kteřá musí být celočíselným (a zřejmě přirozeným) násobkem π , aby nějaký (kladný nebo záporný) násobek pravé strany (9.7) šel se získanou funkcí v oblasti I dát do rovnosti. Vzhledem k tomu, že klasická lokální hybnost (9.5) závisí na energii E , dostáváme podmínku, která může platit jen pro některé speciální hodnoty volby E – tedy kvantovací podmínku uvažovaného systému

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad n \in \mathbb{Z}_+. \quad (9.11)$$

Integrál na levé straně můžeme upravit do tvaru

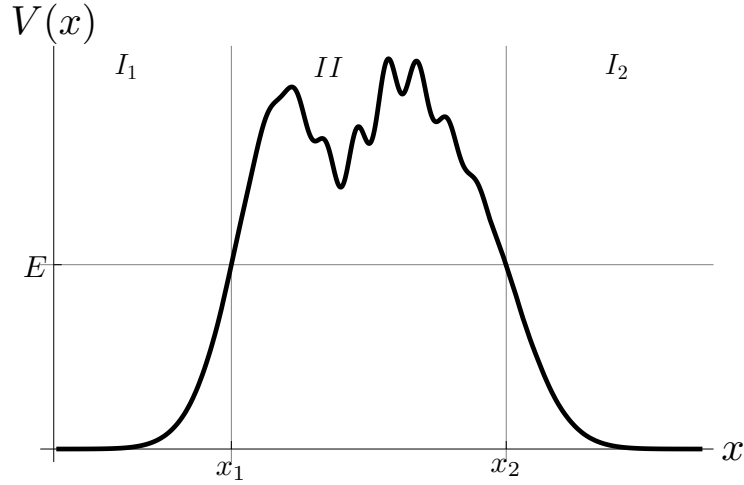
$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \frac{\pi}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} 2p(x) dx = \frac{\pi}{\hbar} S_0,$$

kde S_0 je zkrácená akce. Vztah (9.11) můžeme přepsat do ekvivalentního tvaru

$$S_0 = \left(n + \frac{1}{2}\right) h \quad (9.12)$$

což je přesnější verze historické Bohr–Sommerfeldovy kvantovací podmínky (oproti které je navíc oprava $\frac{1}{2}$ k násobku Planckovy konstanty), používané k odhadům energetických spekter před vyvinutím dnešní podoby kvantové mechaniky. WKB aproximace tedy tento vzorec nejen opravňuje, navíc přidává tuto opravu a především doplňuje i o přibližný tvar vlnových funkcí odpovídajících získaným energiím E_n^{WKB} .

Poznamenejme, že tento vztah platí, pokud body obratu x_i nejsou pevné konce. Za každý pevný konec (odpovídající obratu o nekonečnou bariéru) musíme do závorky na



Obrázek 9.4: Průběh potenciálové bariéry $V(x)$. Pro danou hodnotu energie E jsou $x_{1,2}$ klasické body obratu. Oblasti $I_{1,2}$ jsou klasicky dovolené, oblast II je klasicky zakázaná.

pravé straně (9.11) nebo (9.12) přičíst $\frac{1}{4}$. Důvodem je to, že neexistuje přechodová oblast a vlnová funkce je za tímto bodem obratu identicky rovna nule. Pro řešení v klasicky povolené oblasti (9.6) pak musíme volit $\varphi_0 = 0$.

9.2.2 Rozptylové stavy, tunelový jev a Gamowův koeficient

Uvažujme nyní částici s energií $E = \frac{p_0^2}{2M}$ nalétávající na potenciálovou bariéru $V(x)$, která v nekonečnách klesá k nule, viz. obr. 9.4. Pomocí WKB přiblížení odvodíme tzv. Gamowův koeficient, který udává pravděpodobnost průchodu částice bariérou.

Hledáme rozptylový stav, tj. řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice (9.2), které není kvadraticky integrabilní. V asymptotické oblasti, kde potenciál vymizí, budeme předpokládat řešení ve tvaru

$$\begin{aligned} x \rightarrow -\infty : \quad \psi_{I_1}(x) &= A \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right) + B \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_0 x\right), \\ x \rightarrow +\infty : \quad \psi_{I_2}(x) &= C \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right), \end{aligned} \quad (9.13)$$

tj. pro $x \ll x_1$ je řešení superpozicí dopadající a odražené vlny s amplitudami A a B , pro $x \gg x_2$ je rovno transmitované vlně s amplitudou C . Hledaná pravděpodobnost průchodu je

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2}.$$

Amplitudy A , B a C určíme propojením WKB řešení v jednotlivých oblastech přes Airyho funkce. Budeme postupovat zprava doleva. WKB řešení v oblasti I_2 se správným

asymptotickým chováním pro velká x , kdy $V(x) \approx 0$ a $p(x) \approx p_0$, má tvar (fáze $\frac{\pi}{4}$ je vhodně zvolená pro navázání v bodě x_2)

$$\psi_{I_2}(x) = \frac{D}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + i \frac{\pi}{4} \right) \stackrel{x \rightarrow +\infty}{\simeq} \frac{D}{\sqrt{p_0}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} p_0 x + i \varphi_0 \right),$$

takže (D je nenulové číslo, v poměru amplitud vymizí)

$$C = \frac{D}{\sqrt{p_0}} e^{i\varphi_0}.$$

Funkci $\psi_{I_2}(x)$ přepíšeme pomocí sinů a cosinů

$$\psi_{I_2}(x) = \frac{D}{\sqrt{p(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) + i \frac{D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right),$$

a s pomocí vztahů (9.8), (9.9) s opačnými mezemi ji spojitě navážeme v oblasti II na funkci

$$\psi_{II}(x) = \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \left[\exp \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx' \right) + \frac{i}{2} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx' \right) \right].$$

Pro napojení v bodě x_1 nejprve přepíšeme integrály do mezí x_1, x , tj.

$$\int_x^{x_2} |p(x')| dx' = \int_{x_1}^{x_2} |p(x')| dx' - \int_{x_1}^x |p(x')| dx'.$$

Označíme-li

$$Q = \exp \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x')| dx' \right),$$

pak funkci $\psi_{II}(x)$ můžeme zapsat ve tvaru

$$\psi_{II}(x) = \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \left[Q \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' \right) + \frac{i}{2Q} \exp \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' \right) \right].$$

S použitím propojovacích formulí (9.8), (9.9) dostaneme řešení v oblasti I_1

$$\psi_{I_1}(x) = \frac{D}{\sqrt{p(x)}} \left[2Q \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) + \frac{i}{2Q} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \right].$$

V asymptotické oblasti se funkce chová jako

$$\begin{aligned}\psi_{I_1}(x) &\stackrel{x \rightarrow -\infty}{\simeq} \frac{D}{\sqrt{p_0}} \left[2Q \sin\left(-\frac{p_0 x}{\hbar} + \varphi'_0\right) + \frac{i}{2Q} \cos\left(-\frac{p_0 x}{\hbar} + \varphi'_0\right) \right] \\ &= i \frac{D}{\sqrt{p_0}} \left[\frac{1 - 4Q^2}{4Q} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_0 x + i\varphi'_0\right) + \frac{1 + 4Q^2}{4Q} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x - i\varphi'_0\right) \right].\end{aligned}$$

Porovnáním s tvarem (9.13) dostaneme

$$A = i \frac{D}{\sqrt{p_0}} \frac{1 + 4Q^2}{4Q} e^{-i\varphi'_0}.$$

Pravděpodobnost průchodu je tedy rovna

$$T = \frac{16Q^2}{(1 + 4Q^2)^2}.$$

Pro velké Q (odpovídající velmi vysoké a/nebo široké bariéry) můžeme vztah zjednodušit na

$$T \approx Q^{-2} = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2M(V(x) - E)} dx\right), \quad (9.14)$$

což je tzv. *Gamowův koeficient průniku*.

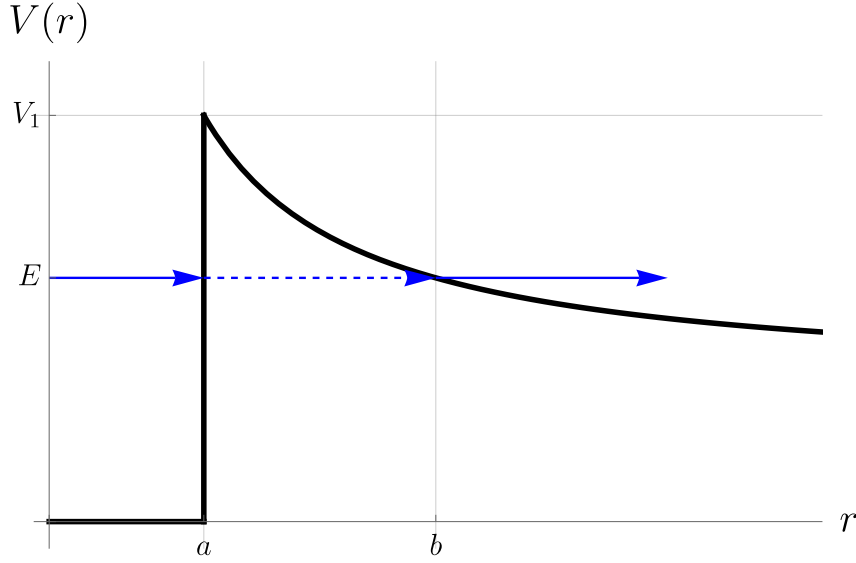
9.3 Model radioaktivního rozpadu α

Jako příklad využití WKB metody pro tunelový jev si probereme jednoduchý model radioaktivního rozpadu α . Ten je z pohledu klasické fyziky velkou záhadou. Pro daný izotop jsou vyletující α částice v podstatě monoenergetické. Zatímco rozsah kinetických energií α částic pro různé izotopy je zhruba od 4 do 10 MeV, poločasy rozpadu se mohou lišit až o 25 řádů, např. pro $^{152}_{62}\text{Sm}$ je $T_{1/2} \simeq 2.5 \cdot 10^{11}$ let $\simeq 7.9 \cdot 10^{18}$ s, ale v případě $^{214}_{85}\text{At}$ je $T_{1/2} \simeq 10^{-6}$ s. Velké rozdíly mohou nastat i pro dva izotopy jednoho prvku, např. pro $^{210}_{84}\text{Po}$ je $T_{1/2} \simeq 138$ dní $\simeq 1.2 \cdot 10^8$ s, zatímco pro $^{212}_{84}\text{Po}$ je $T_{1/2} \simeq 3 \cdot 10^{-7}$ s. Na základě experimentálních dat formulovali v roce 1911 Geiger a Nuttall vztah, který dává do souvislosti střední dobu života $\tau = \frac{T_{1/2}}{\ln 2}$, protonové číslo jádra po rozpadu Z a kinetickou energii E částice

$$\ln \tau = C_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} + C_2, \quad (9.15)$$

kde C_i jsou konstanty. Geigerův-Nuttallův vztah ukazuje, že poločas rozpadu závisí exponenciálně na kinetické energii vyletující α částice.

Vysvětlení exponenciální závislosti poločasu rozpadu na energii α částice představili v roce 1928 nezávisle na sobě G. Gamow a R. W. Garney s E. Condonem a hrálo důležitou roli pro přijetí kvantové teorie širší fyzikální komunitou. Na α částici uvnitř jádra



Obrázek 9.5: Schéma potenciálu $V(r)$.

působí přitažlivé jaderné síly, které mají krátký dosah řádově 10^{-14} m. Vně jádra je naopak odpuzovaná Coulombická interakcí. Z klasického pohledu α částice nemá dostatečnou kinetickou energii k překonání potenciálové bariéry jaderných sil, kvantově mechanicky ale může bariérou protunelovat. Pravděpodobnost průchodu bariérou je sice extrémně malá, ale k nárazům na bariéru dochází řádově $10^{20} \times$ za sekundu, což vede ke konečnému poločas rozpadu. Exponenciální závislost pravděpodobnosti průchodu bariérou na energii α částice pak vysvětluje Geigerův-Nuttelův empirický vztah (9.15).

Uvažujme nyní zjednodušený model α rozpadu popsany částicí ve sféricky symetrickém potenciálu $V(r)$. Z rozptylových experimentů α částic na jádře víme, že pro $r > a$, kde $a \simeq 1.6A^{1/3}$ fm a A je nukleonové číslo dceřiného jádra po α rozpadu, je potenciál čistě Coulombický

$$V(r) = \frac{2Zq}{r}, \quad r \geq a.$$

Zde jsme označili $q = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$. Na kratších vzdálenostech ale dominují přitažlivé jaderné interakce, které vážou α částici v jádře. Pro jednoduchost budeme považovat potenciál pro $r < a$ za nulový. Průběh potenciálu je znázorněn na obrázku 9.5. Výška potenciálové bariéry, kterou α částice musí protunelovat, je

$$V_1 \simeq \frac{2Zq}{a} \simeq 1.8 \frac{Z}{A^{1/3}} \text{ MeV}.$$

Typická hodnota V_1 pro těžká jádra je zhruba 25 MeV, tj. $3 - 5 \times$ větší, než je kinetická energie vyletující α částice.

Určíme nejprve pravděpodobnost průniku potenciálovou bariérou při jednom nárazu,

kteřá je dána Gamowovým koeficientem

$$T = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2M(V(r) - E)} dr \right)$$

Horní mez integrálu je určena podmínkou

$$V(b) = E \quad \Rightarrow \quad b = \frac{2Zq}{E}.$$

Integrál postupně upravíme do tvaru

$$\begin{aligned} \int_a^b \sqrt{2M(V(r) - E)} dr &= \left\{ \begin{array}{l} \frac{r}{b} = t, \\ dr = b dt \end{array} \right\} = \underbrace{2Zq \sqrt{\frac{2M}{E}}}_{\kappa} \int_{\frac{a}{b}}^1 \sqrt{\frac{1}{t} - 1} dt \\ &= \left\{ \begin{array}{l} t = u^2, \\ dt = 2u du \end{array} \right\} = 2\kappa \int_{\sqrt{\frac{a}{b}}}^1 \sqrt{1 - u^2} du. \end{aligned} \quad (9.16)$$

K integrálu na pravé straně nalezneme primitivní funkci

$$\begin{aligned} \int \sqrt{1 - u^2} du &= \left\{ \begin{array}{l} u = \sin z, \\ du = \cos z dz \end{array} \right\} = \int \cos^2 z dz = \int \frac{1}{2} (1 + \cos 2z) dz \\ &= \frac{1}{2} \left(z + \frac{1}{2} \sin 2z \right) = \frac{1}{2} (z + \sin z \cos z) \\ &= \frac{1}{2} \left(\arcsin u + u \sqrt{1 - u^2} \right). \end{aligned}$$

Dosazením do (9.16) nalezneme

$$\begin{aligned} \int_a^b \sqrt{2M(V(r) - E)} dr &= \kappa \left[\arcsin u + u \sqrt{1 - u^2} \right]_{\sqrt{\frac{a}{b}}}^1 \\ &= \kappa \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{a}{b}} - \sqrt{\frac{a}{b}} \left(1 - \frac{a}{b} \right) \right) \\ &= \kappa \left(\arccos \sqrt{\frac{a}{b}} - \sqrt{\frac{a}{b}} \left(1 - \frac{a}{b} \right) \right) \end{aligned}$$

Pravděpodobnost průniku α částice z jádra je pak

$$T = \exp \left[-\frac{2\kappa}{\hbar} \left(\arccos \sqrt{\frac{a}{b}} - \sqrt{\frac{a}{b}} \left(1 - \frac{a}{b} \right) \right) \right] \quad (9.17)$$

Poločas rozpadu a střední dobu života určíme z rozpadového zákona

$$N(t) = N_0 e^{-\gamma t},$$

kterým se radioaktivní rozpad z makroskopického pohledu řídí (N_0 je počet atomů v čase $t = 0$, který exponenciálně klesá). Rozpadová konstanta γ určuje střední dobu života

$$\tau = \frac{1}{\gamma},$$

a poločas rozpadu

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\gamma} = \tau \ln 2. \quad (9.18)$$

γ udává pravděpodobnost rozpadu za jednotku času. Odhadneme ji pomocí vztahu

$$\gamma = fT,$$

kde f je počet nárazů α částice do bariéry za sekundu a T je dříve určená pravděpodobnost průniku potenciálovou bariérou při jednom nárazu (9.17). Jádro aproximujeme sféricky symetrickou potenciálovou bariérou šířky $2a$, takže f je rovno

$$f = \frac{v}{2a},$$

kde v je rychlost α -částice. Ty jsou řádově 10-20% rychlosti světla, takže můžeme použít nerelativistický vztah pro energii a vyjádřit f způsobem

$$f = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{2E}{M}}.$$

Celkem pro poločas rozpadu dostáváme vztah

$$T_{1/2} = \frac{2a \ln 2}{T} \sqrt{\frac{M}{2E}}. \quad (9.19)$$

Numerické výsledky pro izotopy $^{238}_{92}\text{U}$, $^{224}_{88}\text{Ra}$, $^{210}_{84}\text{Po}$, $^{212}_{84}\text{Po}$ jsou shrnuty v tabulce 9.1. Je zde uvedena kinetická energie vyletující α částice E v MeV, vzdálenosti a a b v fm, výška potenciálové bariéry V_1 v MeV, pravděpodobnost průniku potenciálovou bariérou při jednom nárazu T , poločas rozpadu $T_{1/2}$ spočítaný podle vztahu (9.19) a jeho experimentálně určená hodnota $T_{1/2}^{exp}$. V případě izotopů polonia jsme pro lepší shodu s experimentálními daty uvažovali $a \simeq 1.4A^{\frac{1}{3}}$ fm. Ve vzorcích se protonové číslo Z a nukleonové číslo A vztahují k dceřinému jádru po α rozpadu, např. pro $^{238}_{92}\text{U}$ musíme dosadit $Z = 90$ a $A = 234$.

Na závěr provedeme odhad pro $\ln \tau$. Protože $b \gg a$ (viz. tabulka 9.1), můžeme aproximovat

$$\arccos \sqrt{\frac{a}{b}} - \sqrt{\frac{a}{b} \left(1 - \frac{a}{b}\right)} \approx \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{a}{b}}.$$

α zářič	E (MeV)	a (fm)	b (fm)	V_1 (MeV)	T	$T_{1/2}$	$T_{1/2}^{exp}$
$^{238}_{92}\text{U}$	4.2	9.86	62	26.2	$6.4 \cdot 10^{-39}$	$2 \cdot 10^{17} \text{ s} \simeq 4.7 \cdot 10^9 \text{ let}$	$4.468 \cdot 10^9 \text{ let}$
$^{224}_{88}\text{Ra}$	5.7	9.65	43	25.6	$6 \cdot 10^{-27}$	$133906 \text{ s} \simeq 1.55 \text{ dne}$	3.632 dne
$^{210}_{84}\text{Po}$	5.4	8.27	44	28.5	$6 \cdot 10^{-29}$	$1.166 \cdot 10^7 \text{ s} \simeq 134.9 \text{ dne}$	138.4 dne
$^{212}_{84}\text{Po}$	8.8	8.29	26.8	28.4	$1.9 \cdot 10^{-16}$	$3 \cdot 10^{-6} \text{ s}$	$3 \cdot 10^{-7} \text{ s}$

Tabulka 9.1: Výsledky pro několik vybraných izotopů.

Dosazením do (9.19) a (9.18) postupně dostaneme výsledek

$$\begin{aligned}
\ln \tau &= \ln T_{1/2} - \ln \ln 2 = -\ln T + \ln \left(2a \sqrt{\frac{M}{2E}} \right) \\
&\approx \frac{2\kappa}{\hbar} \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{a}{b}} \right) + \ln \left(2a \sqrt{\frac{M}{2E}} \right) \\
&\approx \frac{2q\pi\sqrt{2M}}{\hbar} \frac{Z}{\sqrt{E}} - \frac{8}{\hbar} \sqrt{\frac{aZq}{2}} + \ln \left(2a \sqrt{\frac{M}{2E}} \right),
\end{aligned}$$

který přibližně odpovídá Geiger-Nuttallovu vztahu (9.15).

9.4 Příklady

Cvičení 29. *Mějme částici v nekonečné pravoúhlé potenciálové jámě se schodem, tj. potenciálem*

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| \geq a \\ V_0, & -a < x < 0 \\ 0, & 0 < x < a \end{cases}.$$

Najděte přibližné hodnoty energií

1. *Poruchovou metodou v 1. řádu*
2. *WKB metodou*

Návod:

1. Poruchová metoda v 1. řádu

V_0 budeme chápat jako poruchu. Připomeňme, že vlastní funkce a vlastní čísla pro $V_0 = 0$ jsou

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \left(\frac{n\pi}{2a} (x - a) \right), \quad E_n = \frac{1}{2M} \left(\frac{n\pi\hbar}{2a} \right)^2, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Oprava prvního řádu je pak

$$E_n^{(1)} = \frac{V_0}{a} \int_{-a}^0 \sin\left(\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right)^2 dx = \frac{V_0}{2}.$$

V prvním řádu poruchové teorie tak dostaneme výsledek

$$E_n^{PT} = E_n + E_n^{(1)} = \frac{1}{2M} \left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2 + \frac{V_0}{2},$$

tj. částice cítí schod o poloviční výšce po celém dnu jámy.

2. WKB metoda

Oba body obratu jsou pevné, takže kvantovací podmínka zní

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a p(x) dx = n\pi,$$

kde hybnost je rovna

$$p(x) = \sqrt{2M(E - V(x))} = \begin{cases} \sqrt{2M(E - V_0)}, & -a < x < 0 \\ \sqrt{2ME}, & 0 < x < a \end{cases}.$$

Dosazením a integrací dostaneme

$$\sqrt{E - V_0} + \sqrt{E} = \frac{n\pi\hbar}{a\sqrt{2M}}.$$

Umocníme obě strany na druhou a upravíme do tvaru

$$2\sqrt{E(E - V_0)} = 4E_n - 2E + V_0.$$

Po dalším umocnění na druhou můžeme vyjádřit $E = E_n^{WKB}$

$$E_n^{WKB} = E_n + \frac{V_0}{2} + \frac{V_0^2}{16E_n}.$$

Pro velká n můžeme poslední člen zanedbat a E_n^{WKB} přejde ve výsledek obdržený poruchovou metodou.

Cvičení 30. *Uvažujte částici v potenciálu*

$$V(z) = \begin{cases} Mgz, & z > 0, \\ +\infty, & z \leq 0. \end{cases}$$

Najděte přibližnou hodnotu energie základního stavu

1. použitím variační metody se zkušební funkcí

$$\psi(z, \alpha) = \begin{cases} Cze^{-\alpha z}, & z > 0, \\ 0, & z \leq 0. \end{cases}$$

2. použitím WKB aproximace.

Návod:

1. Variační metoda

Pro výpočet střední hodnoty energie musíme funkci správně normovat

$$(\psi, \psi) = C^2 \int_0^{\infty} z^2 e^{-2\alpha z} dz = \frac{C^2}{4\alpha^3} \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow C = 2\alpha^{\frac{3}{2}}$$

Střední hodnota energie je pak rovna

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= (\psi(\alpha), \hat{H}\psi(\alpha)) \\ &= 4\alpha^3 \frac{\hbar^2}{2M} \int_0^{+\infty} (2\alpha z - \alpha^2 z^2) e^{-2\alpha z} dz + 4\alpha^3 Mg \int_0^{+\infty} z^3 e^{-2\alpha z} dz \\ &= \frac{\hbar^2}{2M} \alpha^2 + \frac{3Mg}{2\alpha}. \end{aligned}$$

Funkce nabývá minima v bodě α_0 daném podmínkou

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = \frac{\hbar^2}{M} \alpha - \frac{3Mg}{2\alpha^2} = 0 \Rightarrow \alpha_0 = \left(\frac{3M^2g}{2\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Odhad energie základního stavu variační metodou je pak

$$E_0^{VM} = E(\alpha_0) = \frac{3}{2} \left(\frac{9}{2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{1}{2} Mg^2 \hbar^2 \right)^{\frac{1}{3}} \quad (9.20)$$

2. WKB metoda

Body obratu jsou $z_1 = 0$ a $z_2 = \frac{E}{Mg}$, z_1 je pevný konec. Kvantovací podmínka

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{\frac{E}{Mg}} p(z) dz = \left(n + \frac{3}{4} \right) \pi, \quad p(z) = \sqrt{2M(E - Mgz)},$$

po zintegrování vede na vztah

$$\sqrt{\frac{8E^3}{9Mg^2}} = \left(n + \frac{3}{4} \right) \pi \Rightarrow E_n^{WKB} = \left(\frac{9\pi^2}{4} \left(n + \frac{3}{4} \right)^2 \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{1}{2} Mg^2 \hbar^2 \right)^{\frac{1}{3}}.$$

Energie základního vztahu určená WKB metodou je tedy přibližně

$$E_0^{WKB} = \frac{3}{4} (3\pi^2)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{1}{2} M g^2 \hbar^2 \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (9.21)$$

Energie je možné určit přesně řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice pro částici na polopřímce

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2\psi}{dz^2} + Mgz\psi = E\psi,$$

s okrajovou podmínkou $\psi(0) = 0$. Substitucí

$$x = \left(\frac{\hbar^2}{2M^2g} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{2M}{\hbar^2} (Mgz - E), \quad \psi(z) = \phi(x)$$

rovnici převedeme na tvar

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - x\phi(x) = 0,$$

jejíž kvadraticky integrabilní řešení je Airyho funkce $\text{Ai}(x)$. Diskretizace energií plyne z okrajové podmínky

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow \text{Ai} \left(-E \left(\frac{2}{Mg^2\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \right) = 0,$$

a z toho, že $\text{Ai}(x)$ je nulová pouze v jistých hodnotách x . Uzly Airyho funkce se značí R_n , jejich numerické hodnoty jsou v tabulkách, pro malá n mají přibližné hodnoty

$$R_0 \doteq -2,338, \quad R_1 \doteq -4,088, \quad R_2 \doteq -5,521.$$

Energie vyjádřené pomocí kořenů Airyho funkce jsou

$$E_n = (-R_n) \left(\frac{1}{2} M g^2 \hbar^2 \right)^{\frac{1}{3}}.$$

Porovnáním s přibližnými hodnotami (9.20) a (9.21) dostaneme

$$\begin{aligned} E_0^{VM} &\simeq 1,059 E_0, \\ E_0^{WKB} &\simeq 0,992 E_0. \end{aligned}$$

Pro vyšší hladiny dává WKB metoda ještě přesnější odhad energií

$$E_1^{WKB} \simeq 0,998 E_1, \quad E_2^{WKB} \simeq 0,999 E_2.$$

Cvičení 31. Uvažujte LHO na polopřímce, tj. částici v potenciálu

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} M \omega^2 x^2, & x > 0, \\ +\infty, & x \leq 0. \end{cases}$$

Najděte přibližnou hodnotu energie základního stavu

1. použitím variační metody se zkušební funkcí

$$\psi(x, \alpha) = \begin{cases} Cxe^{-\alpha x^2}, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

2. použitím WKB aproximace.

Návod:

1. Variační metoda

Funkci musíme správně normovat

$$(\psi, \psi) = C^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow C = 2 \left(\frac{2^3 \alpha^3}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}}.$$

Střední hodnota energie ve stavu $\psi(\alpha)$ pak je

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= (\psi(\alpha), \hat{H}\psi(\alpha)) \\ &= 16\sqrt{\frac{2\alpha^5}{\pi}} \frac{\hbar^2}{2M} \int_0^{+\infty} x^2 (3 - 2\alpha x^2) e^{-2\alpha x^2} dx + 4M\omega^2 \sqrt{\frac{2\alpha^3}{\pi}} \int_0^{+\infty} x^4 e^{-2\alpha x^2} dx \\ &= \frac{3\hbar^2}{2M}\alpha + \frac{3M\omega^2}{8\alpha}. \end{aligned}$$

Nalezneme minimum funkce

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = \frac{3\hbar^2}{2M} - \frac{3M\omega^2}{8\alpha^2} = 0 \Rightarrow \alpha_0 = \frac{M\omega}{2\hbar}.$$

Odhad energie základního stavu variační metodou je tedy

$$E_0^{VM} = E(\alpha_0) = \frac{3}{2}\hbar\omega.$$

2. WKB metoda

Body obratu jsou $x_1 = 0$ a $x_2 = \sqrt{\frac{2E}{M\omega^2}}$, x_1 je pevný konec. Kvantovací podmínka je tedy

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}} p(x) dx \stackrel{!}{=} \left(n + \frac{3}{4}\right)\pi, \quad p(x) = \sqrt{2M\left(E - \frac{1}{2}M\omega^2 x^2\right)}.$$

Integrál můžeme spočítat substitucí $x = x_2 \sin y$, $dx = x_2 \cos y dy$, výsledek je

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}} p(x) dx = \frac{M\omega}{\hbar} \int_0^{x_2} \sqrt{x_2^2 - x^2} dx = \frac{M\omega}{\hbar} x_2^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 y dy = \frac{M\omega}{\hbar} x_2^2 \frac{\pi}{4} = \frac{\pi E}{2\hbar\omega}.$$

Energie pak vyjdou rovny

$$E_n^{WKB} = \left(2n + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Energie základního vztahu určená WKB metodou je tedy

$$E_0^{WKB} = \frac{3}{2} \hbar\omega.$$

V obou případech jsme dostali přesný výsledek. Řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice pro LHO na polopřímce je možné nalézt exaktně - pro $x > 0$ jsou to vlastní funkce hamiltoniánu LHO s lichým kvantovým číslem $2n + 1$, které spojitě navážeme na nulu pro $x \leq 0$. Energie odpovídají energiím LHO s lichým kvantovým číslem, tj.

$$E_n = (2n + 1 + \frac{1}{2}) \hbar\omega = (2n + \frac{3}{2}) \hbar\omega.$$

Cvičení 32. Elektron je v kovu vázán potenciálem

$$V_0(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x \geq 0. \end{cases}$$

Jaká je pravděpodobnost uvolnění elektronu s energií E při zapnutí vnějšího elektrického homogenního pole s intenzitou $\mathcal{E}$ (tzv. studená emise elektronů)?

Návod: Po zapnutí vnějšího pole se potenciál změní na

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0 - e\mathcal{E}x, & x \geq 0. \end{cases}$$

V přiblížení $E \ll V_0$ je pravděpodobnost uvolnění elektronu dána Gamowovým koeficientem průniku (9.14)

$$T = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_2} \sqrt{2M(V(x) - E)} dx \right), \quad x_2 = \frac{V_0 - E}{e\mathcal{E}}.$$

Po integraci dostaneme

$$T = \exp \left(-\frac{4\sqrt{2M}(V_0 - E)^{\frac{3}{2}}}{3\hbar e\mathcal{E}} \right).$$

Pravděpodobnost tedy exponenciálně roste s intenzitou elektrického pole.

Kapitola 10

Různé obrazy časového vývoje v kvantové mechanice

10.1 Schrödingerův obraz

Dosud jsme pracovali s kvantovou mechanikou v tzv. Schrödingerově obraze, kdy se s časem vyvíjí stavy a operátory pozorovatelných jsou typicky na čase nezávislé (maximálně se mohou měnit s časem podle nějakého předepsaného způsobu, ale ne v důsledku dynamiky). Časový vývoj stavů je dán Schrödingerovou rovnicí

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle, \quad (10.1)$$

s počáteční podmínkou $|\psi(t_0)\rangle$ v nějakém čase t_0 . Časový vývoj stavů lze alternativně popsat pomocí evolučního operátoru $\hat{U}(t, t_0)$

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad (10.2)$$

který je lineární, unitární

$$\hat{U}(t, t_0)^\dagger = \hat{U}^{-1}(t, t_0) = \hat{U}(t_0, t), \quad (10.3)$$

a splňuje vlastnost pro všechna $(t_2 \in (t_1, t_3))$

$$\hat{U}(t_3, t_1) = \hat{U}(t_3, t_2)\hat{U}(t_2, t_1). \quad (10.4)$$

Evoluční operátor ve Schrödingerově obraze je určen řešením diferenciální rovnice

$$\hat{H}\hat{U}(t, t_0) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}. \quad (10.5)$$

V případě, že je hamiltonián na čase nezávislý má evoluční operátor tvar

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}. \quad (10.6)$$

V dalším budou pozorovatelné a kety bez horního indexu značit Schrödingerův obraz. V nějakém čase t_1 (nemusí být nutně roven t_0) se různé obrazy budou shodovat.

10.2 Heisenbergův obraz

V Heisenbergově obraze je časový vývoj převeden ze stavů na pozorovatelné. Stavy v Heisenbergově obraze jsou definovány předpisem

$$|\psi^H(t; t_1)\rangle = \hat{U}^{-1}(t, t_1)|\psi(t)\rangle = |\psi(t_1)\rangle \equiv |\psi^H\rangle, \quad (10.7)$$

tj. vektory se s časem nemění. Vztah mezi pozorovatelnou v Heisenbergově a Schrödingerově obraze je

$$\hat{A}^H(t; t_1) = \hat{U}^{-1}(t, t_1)\hat{A}(t)\left(\hat{U}^{-1}(t, t_1)\right)^\dagger = \hat{U}^\dagger(t, t_1)\hat{A}(t)\hat{U}(t, t_1). \quad (10.8)$$

Předpovědi výsledků měření, jako např. střední hodnoty, jsou v obou obrazech ve všech časech shodné

$$\langle \hat{A} \rangle_{\psi(t)} = \langle \hat{A}^H(t; t_1) \rangle_{\psi^H}. \quad (10.9)$$

Časovou derivací rovnice (10.8) a použitím rovnice pro evoluční operátor ve Schrödingerově obraze (10.5) dostaneme pohybovou rovnici pro pozorovatelné v Heisenbergově obraze

$$\frac{d}{dt}\hat{A}^H(t; t_1) = \hat{U}^\dagger(t, t_1) \left(\frac{1}{i\hbar} [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] + \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \right) \hat{U}(t, t_1) \quad (10.10)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^H(t; t_1), \hat{H}^H(t)] + \hat{U}^\dagger(t, t_1) \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \hat{U}(t, t_1), \quad (10.11)$$

s počáteční podmínkou

$$\hat{A}^H(t_1; t_1) = \hat{A}(t_1). \quad (10.12)$$

Tato rovnice je analogií Hamiltonovy pohybové rovnice v klasické mechanice

$$\frac{da}{dt} = \{a, H\} + \frac{\partial a}{\partial t}. \quad (10.13)$$

Pokud je hamiltonián $\hat{H}$ nezávislý na čase, pak komutuje s $\hat{U}(t, t_1)$ a tedy

$$\hat{H}^H(t) \equiv \hat{H}. \quad (10.14)$$

V takovém případě můžeme pohybovou rovnici (10.11) zapsat ve tvaru

$$\frac{d}{dt}\hat{A}^H(t; t_1) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^H(t), \hat{H}] + \hat{U}^\dagger(t, t_1) \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \hat{U}(t, t_1). \quad (10.15)$$

Pokud je $\hat{A}$ integrál pohybu, pak je v Heisenbergově obraze konstantní $\hat{A}^H(t; t_1) \equiv \hat{A}(t_1)$, takže z rovnice (10.15) dostaneme

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{A}(t), \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} = 0, \quad (10.16)$$

což souhlasí s podmínkou na integrál pohybu ve Schrödingerově obraze odvozenou z neměnnosti středních hodnot $\hat{A}$ ve všech řešeních Schrödingerovy rovnice

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle_{\psi(t)} = \left\langle \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}(t), \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \right\rangle_{\psi(t)} \stackrel{!}{=} 0, \quad \forall \psi(t).$$

10.3 Diracův (interakční) obraz

Diracův (interakční) obraz je kombinací Schrödingerova a Heisenbergova obrazu, kde na čase závisí stavy i pozorovatelné. Uvažujeme hamiltonián tvaru

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (10.17)$$

kde $\hat{H}_0$ je hamiltonián nezávislý na čase, pro který známe operátor časového vývoje

$$\hat{U}_0(t, t_1) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_1)}. \quad (10.18)$$

Operátor $\hat{V}$ popisuje např. interakci s vnějším polem, které může být závislé na čase. Stavy a pozorovatelné v Diracově obraze jsou definovány vztahy

$$|\psi^D(t; t_1)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t, t_1)|\psi(t)\rangle, \quad (10.19)$$

$$\hat{A}^D(t; t_1) = \hat{U}_0^\dagger(t, t_1)\hat{A}(t)\hat{U}_0(t, t_1). \quad (10.20)$$

Derivací (10.19) podle času dostaneme pohybovou rovnici pro stavy v Diracově obraze (tzv. Schwinger-Tomonagova rovnice)

$$\hat{V}^D(t; t_1)|\psi^D(t; t_1)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^D(t; t_1)\rangle. \quad (10.21)$$

Stavy se tedy vyvíjí podle interakčního členu v Diracově obraze. Analogicky, derivací (10.20) podle času dostaneme pohybovou rovnici pro pozorovatelné v Diracově obraze (využijeme toho, že $\hat{H}_0$ je nezávislý na čase a komutuje s $\hat{U}_0(t, t_1)$, takže $\hat{H}_0^D \equiv \hat{H}_0$)

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^D(t; t_1) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^D(t; t_1), \hat{H}_0] + \hat{U}_0^\dagger(t, t_1) \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \hat{U}_0(t, t_1) \quad (10.22)$$

Tato rovnice má stejný tvar jako pohybová rovnice v Heisenbergově obraze s časově nezávislým hamiltoniánem $\hat{H}_0$ (10.15).

Zavedeme dále evoluční operátor v Diracově obraze $\hat{U}^D(t, t_0; t_1) \equiv \hat{S}(t, t_0; t_1)$ vztahem

$$|\psi^D(t; t_1)\rangle = \hat{S}(t, t_0; t_1)|\psi^D(t_0; t_1)\rangle. \quad (10.23)$$

$\hat{S}(t, t_0; t_1)$ je řešením rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S}(t, t_0; t_1) = \hat{V}^D(t; t_1) \hat{S}(t, t_0; t_1), \quad (10.24)$$

s počáteční podmínkou

$$\hat{S}(t_0, t_0; t_1) = \hat{I}. \quad (10.25)$$

Porovnáním (10.2) a (10.19) vidíme, že evoluční operátor v Diracově obraze můžeme zapsat jako součin

$$\hat{S}(t, t_0; t_1) = \hat{U}_0^\dagger(t, t_1) \hat{U}(t, t_0) \hat{U}_0(t_0, t_1), \quad (10.26)$$

kde $\hat{U}(t, t_0)$ je evoluční operátor pro celkový hamiltonián (10.17).

V Heisenbergově a Diracově obraze je parametr t_1 , který určuje, kdy se obrazy shodují se Schrödingerovým. V praxi se setkáme se dvěma případy. Buď zkoumáme časový vývoj o konečný čas, pak se typicky volí $t_1 = t_0$. V takovém případě t_1 v předchozích vztazích nemusíme vypisovat. Evoluční operátor v Diracově obraze se zjednoduší na

$$\hat{S}(t, t_0) = \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0). \quad (10.27)$$

Ve druhém případě, který odpovídá rozptylu, uvažujeme $t_0 \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow +\infty$, a t_1 se typicky volí rovné nule a opět se explicitně nevypisuje. Evoluční operátor v Diracově obraze v limitě definuje tzv. operátor S -matice

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow +\infty}} \hat{S}(t, t_0) = \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow +\infty}} \hat{U}_0^\dagger(t, 0) \hat{U}(t, t_0) \hat{U}_0(t_0, 0).$$

10.4 Příklady

Cvičení 33. Nalezněte v Heisenbergově obraze operátory polohy $\hat{X}^H(t)$ a hybnosti $\hat{P}^H(t)$ pro volnou částici na přímce. Určete časový vývoj středních hodnot polohy a hybnosti v libovolném stavu $|\psi(t)\rangle$. Uvažujte, že v čase $t_1 = t_0 = 0$ se Schrödingerův a Heisenbergův obraz shodují.

Návod: Hamiltonián volné částice na přímce je tvaru

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M}.$$

Jelikož je hamiltonián na čase nezávislý, budeme se snažit najít pohybové rovnice (10.15) pro operátory $\hat{X}^H(t)$ a $\hat{P}^H(t)$. Proto spočítáme komutátory

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{H}] &= \left[\hat{X}, \frac{\hat{P}^2}{2M} \right] = i\hbar \frac{\hat{P}}{M}, \\ [\hat{P}, \hat{H}] &= 0. \end{aligned}$$

Dosazením do pohybových rovnic dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{X}^H &= \frac{1}{i\hbar} \hat{U}^\dagger [\hat{X}, \hat{H}] \hat{U} = \frac{\hat{P}^H}{M}, \\ \frac{d}{dt} \hat{P}^H &= \frac{1}{i\hbar} \hat{U}^\dagger [\hat{P}, \hat{H}] \hat{U} = 0. \end{aligned}$$

Postup řešení těchto rovnic je analogický jako např. v TEF jen s tím rozdílem, že dvojici integračních konstant nahradí dvojice na čase nezávislých operátorů. Snadno nahlédneme, že řešení druhé rovnice je

$$\hat{P}^H(t) = \hat{A}.$$

Dosazením do první rovnice a integrací získáme

$$\hat{X}^H(t) = \frac{\hat{A}}{M}t + \hat{B}.$$

Počáteční podmínky říkají, že v čase $t = 0$ Schrödingerův a Heisenbergův obraz splývají, tedy $\hat{X}^H(0) = \hat{X}$ a $\hat{P}^H(0) = \hat{P}$. Po dosazení do rovnic získáváme řešení

$$\begin{aligned}\hat{X}^H(t) &= \frac{\hat{P}}{M}t + \hat{X}, \\ \hat{P}^H(t) &= \hat{P}.\end{aligned}$$

Nyní využijeme toho, že střední hodnota pozorovatelné v čase t je stejná jako střední hodnota pozorovatelné vyjádřené v Heisenbergově obraze v libovolném čase vývoje. Pak totiž

$$\begin{aligned}\langle \hat{X} \rangle_{\psi(t)} &= \langle \hat{X}^H(t) \rangle_{\psi(0)} = \frac{\langle \hat{P} \rangle_{\psi(0)}}{M}t + \langle \hat{X} \rangle_{\psi(0)} \equiv \frac{p_0}{M}t + x_0, \\ \langle \hat{P} \rangle_{\psi(t)} &= \langle \hat{P}^H(t) \rangle_{\psi(0)} = \langle \hat{P} \rangle_{\psi(0)} \equiv p_0.\end{aligned}$$

Výsledek říká, že střední hodnoty pozorovatelných sledují klasické trajektorie a že střední hodnota hybnosti zůstává konstantní, což plně souhlasí se zákonem zachování hybnosti.

Cvičení 34. Nalezněte v Heisenbergově obraze operátory polohy $\hat{X}^H(t)$ a hybnosti $\hat{P}^H(t)$ pro částici na přímce v homogenním poli. Určete časový vývoj středních hodnot polohy a hybnosti v libovolném stavu $|\psi(t)\rangle$. Uvažujte, že v čase $t_1 = t_0 = 0$ se Schrödingerův a Heisenbergův obraz shodují.

Návod: Hamiltonián pro studovaný systém je tvaru

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} - k\hat{X}.$$

Spočteme příslušné komutátory s hamiltoniánem, které potřebujeme pro určení rovnic časového vývoje operátorů $\hat{X}^H$ a $\hat{P}^H$.

$$\begin{aligned}[\hat{X}, \hat{H}] &= \left[\hat{X}, \frac{\hat{P}^2}{2M} \right] = i\hbar \frac{\hat{P}}{M}, \\ [\hat{P}, \hat{H}] &= [\hat{P}, -k\hat{X}] = i\hbar k\hat{I}.\end{aligned}$$

Dosazením do vztahů (10.15) získáme

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{X}^H &= \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger [\hat{X}, \hat{H}] \hat{U} = \frac{\hat{P}^H}{M}, \\ \frac{d}{dt}\hat{P}^H &= \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger [\hat{P}, \hat{H}] \hat{U} = k\hat{I}.\end{aligned}$$

Druhou rovnici můžeme přímo zintegrovat a po započtení počáteční podmínky, totiž že $\hat{P}^H(0) = \hat{P}$ dostáváme její řešení

$$\hat{P}^H(t) = \hat{P} + kt\hat{I}$$

Dosadíme-li jej do rovnice pro $\hat{X}^H(t)$, získáme

$$\frac{d}{dt}\hat{X}^H = \frac{\hat{P}}{M} + \frac{kt}{M}\hat{I}.$$

Integrací získáme po zohlednění počáteční podmínky $\hat{X}^H(0) = \hat{X}$ dostáváme

$$\hat{X}^H(t) = \hat{X} + \frac{\hat{P}}{M}t + \frac{kt^2}{2M}\hat{I}.$$

Označíme-li $\langle \hat{X} \rangle_{\psi(0)} = x_0$ a $\langle \hat{P} \rangle_{\psi(0)} = p_0$, pak pro střední hodnoty s využitím vztahu (10.9)

$$\begin{aligned}\langle \hat{X} \rangle_{\psi(t)} &= \langle \hat{X}^H(t) \rangle_{\psi(0)} = x_0 + \frac{p_0}{M}t + \frac{kt^2}{2M}, \\ \langle \hat{P} \rangle_{\psi(t)} &= \langle \hat{P}^H(t) \rangle_{\psi(0)} = p_0 + kt.\end{aligned}$$

Cvičení 35. Nalezněte $\hat{X}^H(t)$ a $\hat{P}^H(t)$ pro LHO. Určete časový vývoj středních hodnot polohy a hybnosti v libovolném stavu $|\psi(t)\rangle$. Čemu je rovno $\hat{a}^H(t)$, resp. $\hat{a}^{H\dagger}(t)$? Z tvaru $\hat{a}^H(t)$ určete časový vývoj koherentních stavů. Uvažujte, že v čase $t_1 = t_0 = 0$ se Schrödingerův a Heisenbergův obraz shodují.

Návod: Hamiltonián LHO je

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{X}^2.$$

Pro komutátory $\hat{X}$ a $\hat{P}$ s hamiltoniánem nalezneme

$$\begin{aligned}[\hat{X}, \hat{H}] &= \left[\hat{X}, \frac{\hat{P}^2}{2M} \right] = i\hbar \frac{\hat{P}}{M}, \\ [\hat{P}, \hat{H}] &= \left[\hat{P}, \frac{1}{2}M\omega^2\hat{X}^2 \right] = -i\hbar M\omega^2\hat{X}.\end{aligned}$$

Pohybové rovnice pro operátory polohy a hybnosti v Heisenbergově obraze pak mají tvar

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{X}^H &= \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger [\hat{X}, \hat{H}] \hat{U} = \frac{\hat{P}^H}{M}, \\ \frac{d}{dt}\hat{P}^H &= \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger [\hat{P}, \hat{H}] \hat{U} = -M\omega^2\hat{X}^H.\end{aligned}$$

Postup řešení těchto rovnic je stejný jako v klasické mechanice, jen integrační konstanty budou operátory. První rovnici zderivujeme podle času a dosadíme za $\frac{d}{dt}\hat{P}^H$ ze druhé

$$\frac{d^2}{dt^2}\hat{X}^H = -\omega^2\hat{X}^H.$$

Řešením rovnice je

$$\hat{X}^H(t) = \hat{A} \cos \omega t + \hat{B} \sin \omega t,$$

kde $\hat{A}$ a $\hat{B}$ jsou na čase nezávislé operátory. Pro $\hat{P}^H(t)$ pak dostaneme

$$\hat{P}^H(t) = -M\omega\hat{A} \sin \omega t + M\omega\hat{B} \cos \omega t.$$

Operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ určíme z počátečních podmínek

$$\begin{aligned}\hat{X}^H(0) &= \hat{X} = \hat{A}, \\ \hat{P}^H(0) &= \hat{P} = M\omega\hat{B}.\end{aligned}$$

Pro LHO jsou tedy operátory polohy a hybnosti v Heisenbergově obraze rovny

$$\begin{aligned}\hat{X}^H(t) &= \hat{X} \cos \omega t + \frac{\hat{P}}{M\omega} \sin \omega t, \\ \hat{P}^H(t) &= -M\omega\hat{X} \sin \omega t + \hat{P} \cos \omega t.\end{aligned}$$

Tyto výsledky jsou přesnou analogií řešení klasických pohybových rovnic (důvodem je, že hamiltonián LHO je kvadratický v poloze i hybnosti). Díky vztahu (10.9) odsud snadno nalezneme časový vývoj středních hodnot polohy a hybnosti v libovolném stavu

$$\begin{aligned}\langle \hat{X} \rangle_{\psi(t)} &= \langle \hat{X}^H(t) \rangle_{\psi(0)} = x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{M\omega} \sin \omega t, \\ \langle \hat{P} \rangle_{\psi(t)} &= \langle \hat{P}^H(t) \rangle_{\psi(0)} = -M\omega x_0 \sin \omega t + p_0 \cos \omega t,\end{aligned}$$

kde x_0 a p_0 značí počáteční střední hodnoty polohy a hybnosti

$$x_0 = \langle \hat{X} \rangle_{\psi(0)}, \quad p_0 = \langle \hat{P} \rangle_{\psi(0)}.$$

Střední hodnoty polohy a hybnosti LHO sledují klasickou trajektorii, jak ostatně plyne i z Ehrenfestova teorému.

Pro posunovací operátory platí komutační relace s hamiltoniánem

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega\hat{a}, \quad [\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger$$

Pohybová rovnice pro anihilační operátor v Heisenbergově obraze je tedy

$$\frac{d}{dt}\hat{a}^H = \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger [\hat{a}, \hat{H}] \hat{U} = -i\omega\hat{a}^H.$$

Jejím řešením s počáteční podmínkou $\hat{a}^H(0) = \hat{a}$ je

$$\hat{a}^H(t) = \hat{a}e^{-i\omega t}.$$

Kreační operátor dostaneme hermitovským sdružením

$$\hat{a}^{H\dagger}(t) = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t}.$$

Koherentní stav v Heisenbergově obraze je nezávislý na čase

$$|\alpha^H\rangle = \hat{U}^\dagger |\alpha(t)\rangle = |\alpha(0)\rangle,$$

a platí pro něj

$$\hat{a}^H(t)|\alpha^H\rangle = \hat{a}e^{-i\omega t}|\alpha(0)\rangle = \alpha(0)e^{-i\omega t}|\alpha^H\rangle.$$

Ve Schrödingerově obraze dostaneme

$$\hat{a}|\alpha(t)\rangle = \hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{a}\hat{U}\hat{U}^\dagger|\alpha(t)\rangle = \hat{U}\hat{a}^H(t)|\alpha^H\rangle = \hat{U}\alpha(0)e^{-i\omega t}|\alpha(0)\rangle = \alpha(0)e^{-i\omega t}|\alpha(t)\rangle,$$

tj. koherentní stav zůstává koherentní v každém čase, vlastní číslo $\hat{a}$ se s časem mění

$$\alpha(t) = \alpha(0)e^{-i\omega t}.$$

Stejný výsledek jsme obdrželi v zimním semestru řešením Schrödingerovy rovnice, ale k tomu jsme potřebovali nejprve nalézt rozklad koherentního stavu do báze vlastních vektorů hamiltoniánu.

Cvičení 36. Spin $\frac{1}{2}$ s magnetickým momentem μ je v homogenním magnetickém poli ve směru osy z $\vec{B} = (0, 0, B_0)$. Určete časový vývoj operátorů složek spinu v Heisenbergově obraze $\hat{S}_j^H(t)$. V čase $t_1 = 0$ se Schrödingerův a Heisenbergův obraz shoduje.

Návod: Hamiltonián pro spin $\frac{1}{2}$ v magnetickém poli je

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = -\frac{\mu B_0}{\hbar} \hat{S}_3 = -\omega_0 \hat{S}_3.$$

Komutátory složek spinu s hamiltoniánem jsou

$$\begin{aligned} [\hat{S}_1, \hat{H}] &= -\omega_0 i\hbar \varepsilon_{132} \hat{S}_2 = i\hbar \omega_0 \hat{S}_2, \\ [\hat{S}_2, \hat{H}] &= -\omega_0 B_0 i\hbar \varepsilon_{231} \hat{S}_1 = -i\hbar \omega_0 \hat{S}_1, \\ [\hat{S}_3, \hat{H}] &= 0. \end{aligned}$$

Třetí složka spinu je integrál pohybu, v Heisenbergově obraze je stejná jako ve Schrödingerově

$$\hat{S}_3^H(t) = \hat{S}_3.$$

Pohybové rovnice pro první dvě složky v Heisenbergově obrazu jsou

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{S}_1^H &= \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger [\hat{S}_1, \hat{H}] \hat{U} = \omega_0 \hat{S}_2^H, \\ \frac{d}{dt}\hat{S}_2^H &= \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger [\hat{S}_2, \hat{H}] \hat{U} = -\omega_0 \hat{S}_1^H.\end{aligned}$$

První rovnici zderivujeme podle času a dosadíme za $\frac{d}{dt}\hat{S}_2^H$ ze druhé

$$\frac{d^2}{dt^2}\hat{S}_1^H = -\omega_0^2 \hat{S}_1^H.$$

Řešením této rovnice je

$$\hat{S}_1^H(t) = \hat{A} \cos(\omega_0 t) + \hat{B} \sin(\omega_0 t).$$

Pro druhou složku spinu v Heisenbergově obrazu dostaneme

$$\hat{S}_2^H(t) = -\hat{A} \sin(\omega_0 t) + \hat{B} \cos(\omega_0 t).$$

Operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ určíme z počátečních podmínek

$$\begin{aligned}\hat{S}_1^H(0) &= \hat{S}_1 = \hat{A}, \\ \hat{S}_2^H(0) &= \hat{S}_2 = \hat{B}.\end{aligned}$$

Složky operátoru spinu v Heisenbergově obraze jsou tedy

$$\begin{aligned}\hat{S}_1^H(t) &= \hat{S}_1 \cos(\omega_0 t) + \hat{S}_2 \sin(\omega_0 t), \\ \hat{S}_2^H(t) &= -\hat{S}_1 \sin(\omega_0 t) + \hat{S}_2 \cos(\omega_0 t), \\ \hat{S}_3^H(t) &= \hat{S}_3.\end{aligned}$$

Časový vývoj odpovídá rotaci okolo osy z o úhel $\omega_0 t$.

Cvičení 37. Uvažujte dvouhladinový atom s bazickými stavy $|g\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (základní stav) a $|e\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ (excitovaný stav), které odpovídají energiím $\mp E$. Hamiltonián volného atomu má tvar

$$\hat{H}_0 = E|e\rangle\langle e| - E|g\rangle\langle g| = \frac{\hbar\omega_0}{2}|e\rangle\langle e| - \frac{\hbar\omega_0}{2}|g\rangle\langle g| = -\frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

kde $\omega_0 = \frac{2E}{\hbar}$ je přechodová frekvence atomu (odpovídá úhlové frekvenci fotonu vyzářeného při přeskoku z excitované hladiny na základní). Atom je v klasickém harmonickém elektrickém poli o frekvenci ω (hvězdička značí komplexní sdružení)

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i\omega t} + \vec{E}_0^* e^{i\omega t}.$$

V dipólové aproximaci je interakce atomu s polem popsána operátorem

$$\hat{V}(t) = -\hat{\vec{D}} \cdot \vec{E}(t),$$

kde operátor dipólového momentu atomu je ($\vec{d}$ je nějaký konstantní vektor)

$$\hat{\vec{D}} = \vec{d}|e\rangle\langle g| + \vec{d}^*|g\rangle\langle e|.$$

Nalezněte interakční člen v Diracově obraze $\hat{V}^D(t)$. V čase $t_1 = 0$ se Schrödingerův a Diracův obraz shodují.

Návod: Nejprve upravíme interakční hamiltonián ve Schrödingerově obraze

$$\begin{aligned}\hat{V}(t) &= -\left(\vec{d}|e\rangle\langle g| + \vec{d}^*|g\rangle\langle e|\right) \cdot \left(\vec{E}_0 e^{-i\omega t} + \vec{E}_0^* e^{i\omega t}\right) \\ &= -\left(\vec{d} \cdot \vec{E}_0 e^{-i\omega t} + \vec{d} \cdot \vec{E}_0^* e^{i\omega t}\right) |e\rangle\langle g| - \left(\vec{d}^* \cdot \vec{E}_0 e^{-i\omega t} + \vec{d}^* \cdot \vec{E}_0^* e^{i\omega t}\right) |g\rangle\langle e|.\end{aligned}$$

Označíme si

$$\vec{d} \cdot \vec{E}_0 = \alpha \hbar, \quad \vec{d} \cdot \vec{E}_0^* = \tilde{\alpha} \hbar.$$

Interakční člen pak zapíšeme ve tvaru

$$\hat{V}(t) = -\hbar (\alpha e^{-i\omega t} + \tilde{\alpha} e^{i\omega t}) |e\rangle\langle g| - \hbar (\tilde{\alpha}^* e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t}) |g\rangle\langle e|,$$

což odpovídá matici ve standardní bázi

$$V(t) = -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\alpha}^* e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t} \\ \alpha e^{-i\omega t} + \tilde{\alpha} e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}.$$

Snadno určíme matici evolučního operátoru pro volný atom

$$U_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega_0}{2}t} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\omega_0}{2}t} \end{pmatrix} = e^{-i\frac{\omega_0}{2}t} \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matice interakčního členu v Diracově obraze je potom rovna součinu

$$\begin{aligned}V^D(t) &= U_0^\dagger(t) V(t) U_0(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega_0 t} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} V(t) \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= -\hbar \begin{pmatrix} 0 & (\tilde{\alpha}^* e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t}) e^{-i\omega_0 t} \\ (\alpha e^{-i\omega t} + \tilde{\alpha} e^{i\omega t}) e^{i\omega_0 t} & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Označíme-li $\Delta = \omega - \omega_0$, pak lze $V^D(t)$ zapsat ve tvaru

$$V^D(t) = -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\alpha}^* e^{-i(\omega+\omega_0)t} + \alpha^* e^{i\Delta t} \\ \alpha e^{-i\Delta t} + \tilde{\alpha} e^{i(\omega+\omega_0)t} & 0 \end{pmatrix}. \quad (10.28)$$

Kapitola 11

Přechody v dvouhladinových systémech

Pro dvouhladinový systém, jako je spin $\frac{1}{2}$, je v určitých případech možné exaktně vyřešit Schrödingerovu rovnici i pro časově závislý hamiltonián tvaru

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).$$

Jak uvidíme, vlivem poruchy $\hat{V}(t)$ dochází k přechodům mezi vlastními stavy volného hamiltoniánu $\hat{H}_0$. Jedním z takovýchto modelů je spin v rotujícím magnetickém poli, který si nyní probereme. Tento model představuje základní fyzikální princip nukleární magnetické rezonance. Navíc je na něj možné převést obecné dvouhladinové systémy s konstantní nebo harmonickou poruchou volného hamiltoniánu. Ukážeme si i jeho využití v precizní spektroskopii.

11.1 Spin v rotujícím magnetickém poli

Uvažujme spin $\frac{1}{2}$ v magnetickém poli

$$\vec{B}(t) = \vec{B}_0 + \vec{B}_1(t),$$

které lze rozložit na statickou část $\vec{B}_0$ ve směru osy z

$$\vec{B}_0 = (0, 0, B_0),$$

a časově závislou část $\vec{B}_1(t)$, která svírá s osou z úhel θ a rotuje kolem ní úhlovou rychlostí ω , tj.

$$\vec{B}_1(t) = (B_1 \sin \theta \cos \omega t, -B_1 \sin \theta \sin \omega t, B_1 \cos \theta).$$

Hamiltonián spinu je na čase závislý

$$\begin{aligned} \hat{H}(t) &= -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}(t) = -\frac{\mu B_0}{\hbar} \hat{S}_3 - \frac{\mu B_1}{\hbar} \left[\sin \theta \left(\hat{S}_1 \cos \omega t - \hat{S}_2 \sin \omega t \right) - \hat{S}_3 \cos \theta \right] \\ &= -(\omega_0 + \omega_1 \cos \theta) \hat{S}_3 - \omega_1 \sin \theta \left(\hat{S}_1 \cos \omega t - \hat{S}_2 \sin \omega t \right) \\ &= -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 + \omega_1 \cos \theta & \omega_1 \sin \theta e^{i\omega t} \\ \omega_1 \sin \theta e^{-i\omega t} & -\omega_0 - \omega_1 \cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (11.1)$$

kde jsme zavedli přechodové frekvence spinu v polích intenzity B_0 a B_1

$$\omega_0 = \frac{\mu B_0}{\hbar}, \quad \omega_1 = \frac{\mu B_1}{\hbar}.$$

V reálných aplikacích je $B_1 \ll B_0$, takže i $\omega_1 \ll \omega_0$.

11.1.1 Řešení Schrödingerovy rovnice přechodem do rotující soustavy

Využijeme toho, že časově závislá část hamiltoniánu lze napsat jako $\hat{S}_1$ otočený o úhel $-\omega t$ okolo osy z

$$\hat{S}_1 \cos \omega t - \hat{S}_2 \sin \omega t = e^{\frac{i}{\hbar} \omega t \hat{S}_3} \hat{S}_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \omega t \hat{S}_3} = \hat{R}_z(-\omega t) \hat{S}_1 \hat{R}_z^\dagger(-\omega t).$$

Protože $\hat{S}_3$ komutuje s operátorem rotace okolo osy z , můžeme hamiltonián (11.1) zapsat ve tvaru

$$\hat{H}(t) = \hat{R}_z(-\omega t) \left(-(\omega_0 + \omega_1 \cos \theta) \hat{S}_3 - \omega_1 \sin \theta \hat{S}_1 \right) \hat{R}_z^\dagger(-\omega t) = \hat{R}_z(-\omega t) \hat{H}(0) \hat{R}_z^\dagger(-\omega t),$$

tj. časovou závislost lze separovat jako dodatečnou rotaci. Přejdeme do rotující souřadné soustavy

$$|\psi'(t)\rangle = \hat{R}_z^\dagger(-\omega t) |\psi(t)\rangle.$$

Ze Schrödingerovy rovnice pro $|\psi(t)\rangle$ dostaneme rovnici v rotující soustavě

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle &= i\hbar \left(\frac{d}{dt} \hat{R}_z^\dagger(-\omega t) \right) |\psi(t)\rangle + \hat{R}_z^\dagger(-\omega t) \underbrace{i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle}_{\hat{H}(t) |\psi(t)\rangle} \\ &= i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} \omega \hat{S}_3 \right) \hat{R}_z^\dagger(-\omega t) |\psi(t)\rangle + \underbrace{\hat{R}_z^\dagger(-\omega t) \hat{H}(t) \hat{R}_z(-\omega t)}_{\hat{H}(0)} \hat{R}_z^\dagger(-\omega t) |\psi(t)\rangle \\ &= \left(\hat{H}(0) + \omega \hat{S}_3 \right) |\psi'(t)\rangle = \hat{H}_{ef} |\psi'(t)\rangle, \end{aligned} \quad (11.2)$$

s efektivním hamiltoniánem nezávislým na čase

$$\hat{H}_{ef} = \hat{H}(0) + \omega \hat{S}_3 = (\Delta - \omega_1 \cos \theta) \hat{S}_3 - \omega_1 \sin \theta \hat{S}_1 = \Omega \vec{n}_\Omega \cdot \hat{\vec{S}}. \quad (11.3)$$

Zde Δ (detuning) značí rozdíl frekvence rotujícího magnetického pole a přechodové frekvence spinu ω_0

$$\Delta = \omega - \omega_0.$$

Dále jsme zavedli Rabiho frekvenci Ω a jednotkový vektor $\vec{n}_\Omega$ vztahy

$$\Omega = \sqrt{\Delta^2 - 2\Delta\omega_1 \cos \theta + \omega_1^2}, \quad \vec{n}_\Omega = \frac{1}{\Omega} (-\omega_1 \sin \theta, 0, \Delta - \omega_1 \cos \theta). \quad (11.4)$$

V rotující soustavě snadno nalezneme řešení Schrödingerovy rovnice (11.2) (v čase $t_0 = 0$ se laboratorní a rotující soustava shodují, tj. $|\psi'(0)\rangle = |\psi(0)\rangle$)

$$|\psi'(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{eff}t}|\psi'(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\Omega t \vec{n}_\Omega \cdot \vec{\hat{S}}}|\psi'(0)\rangle = \hat{R}_{\vec{n}_\Omega}(\Omega t)|\psi(0)\rangle, \quad (11.5)$$

lze ho napsat jako rotaci počátečního stavu okolo osy $\vec{n}_\Omega$ o úhel Ωt . Do laboratorní soustavy se vrátíme dodatečnou rotací okolo osy z , tj.

$$|\psi(t)\rangle = \hat{R}_z(-\omega t) \hat{R}_{\vec{n}_\Omega}(\Omega t)|\psi(0)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\omega t \hat{S}_3} e^{-\frac{i}{\hbar}\Omega t \vec{n}_\Omega \cdot \vec{\hat{S}}}|\psi(0)\rangle = \hat{U}(t, 0)|\psi(0)\rangle. \quad (11.6)$$

Zde jsme zavedli evoluční operátor $\hat{U}(t, 0)$, který odpovídá časovému vývoji z $t_0 = 0$ do t . Protože hamiltonián (11.1) závisí na čase, je evoluční operátor závislý na koncovém i počátečním čase, ne jen jejich rozdílu. Ve standardní bázi tvořené vlastními vektory $\hat{S}_z$ můžeme matici evolučního operátoru $\hat{U}(t, 0)$ s využitím rotačních matic pro spin $\frac{1}{2}$ (2.10) zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} U(t, 0) &= R_z^{(\frac{1}{2})}(-\omega t) R_{\vec{n}_\Omega}^{(\frac{1}{2})}(\Omega t) \\ &= \left(\cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) \mathbb{I} + i \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \sigma_3 \right) \left(\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \mathbb{I} - i \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma} \right) \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega}{2}t} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\frac{\Delta - \omega_1 \cos\theta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) & i\frac{\omega_1 \sin\theta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \\ i\frac{\omega_1 \sin\theta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) & \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + i\frac{\Delta - \omega_1 \cos\theta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \left[\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\frac{\Delta - \omega_1 \cos\theta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] e^{i\frac{\omega}{2}t} & i\frac{\omega_1 \sin\theta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) e^{i\frac{\omega}{2}t} \\ i\frac{\omega_1 \sin\theta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) e^{-i\frac{\omega}{2}t} & \left[\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + i\frac{\Delta - \omega_1 \cos\theta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] e^{-i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11.7)$$

V dalším předpokládáme, že vektor $\vec{B}_1(t)$ rotuje v rovině xy , tj. $\theta = \frac{\pi}{2}$ a

$$\vec{B}_1(t) = (B_1 \cos \omega t, -B_1 \sin \omega t, 0). \quad (11.8)$$

Rabiho frekvence a jednotkový vektor $\vec{n}_\Omega$ se pak zjednoduší na

$$\Omega = \sqrt{\Delta^2 + \omega_1^2}, \quad \vec{n}_\Omega = \frac{1}{\Omega}(-\omega_1, 0, \Delta). \quad (11.9)$$

Matice evolučního operátoru (11.7) pro $\theta = \frac{\pi}{2}$ je

$$U(t, 0) = \begin{pmatrix} \left[\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] e^{i\frac{\omega}{2}t} & i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) e^{i\frac{\omega}{2}t} \\ i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) e^{-i\frac{\omega}{2}t} & \left[\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] e^{-i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}. \quad (11.10)$$

11.1.2 Pravděpodobnost překlopení spinu, π - a $\frac{\pi}{2}$ -puls

Uvažujme nyní počáteční stav

$$|\psi(0)\rangle = |z, +\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \psi(0).$$

Stav spinu v čase t je roven

$$\psi(t) = U(t)\psi(0) = \begin{pmatrix} [\cos(\frac{\Omega t}{2}) - i\frac{\Delta}{\Omega} \sin(\frac{\Omega t}{2})] e^{i\frac{\omega}{2}t} \\ i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin(\frac{\Omega t}{2}) e^{-i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}. \quad (11.11)$$

Pravděpodobnost naměření kladné nebo záporné projekce spinu do osy z v čase t je

$$\begin{aligned} W_+(t) &= \cos^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + \left(\frac{\Delta}{\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right), \\ W_-(t) &= \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Delta}{\omega_1}\right)^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right). \end{aligned} \quad (11.12)$$

Vidíme, že pravděpodobnost překlopení spinu osciluje s Rabiho frekvencí Ω . Maximální hodnoty dosáhne po čase $T_\pi^{(\Delta)}$, který odpovídá délce tzv. π -pulsu, kdy

$$\Omega T_\pi^{(\Delta)} = \pi.$$

Průběh $W_-(t)$ s časem je znázorněn na obrázku (11.1) pro $\Delta = 0, \omega_1, 2\omega_1$.

Maximální pravděpodobnost překlopení spinu je rovna

$$W_-^{max} = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Delta}{\omega_1}\right)^2}. \quad (11.13)$$

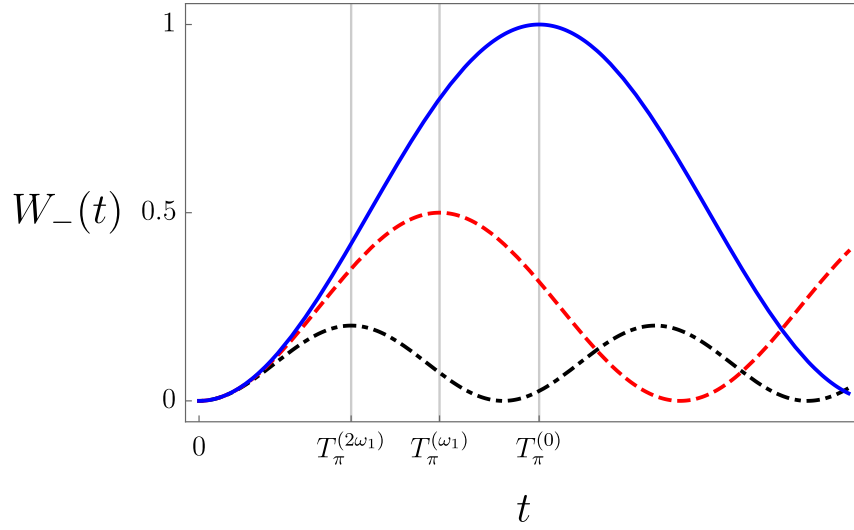
W_-^{max} má jako funkce Δ/ω_1 výrazně rezonanční charakter, viz. obrázek 11.2. V rezonanci, kdy $\omega = \omega_0$ a tedy $\Delta = 0$, je $W_-^{max} = 1$. Tomuto jevu se říká magnetická rezonance.

Rabiho frekvence se v rezonanci shoduje s frekvencí ω_1 a délka π -pulsu je tedy $T_\pi^{(0)} = \frac{\pi}{\omega_1}$. Pokud puls trvá poloviční dobu ($\frac{\pi}{2}$ -puls), dojde k překlopení spinu do roviny xy . Vektor $\vec{n}_\Omega$ (11.9) míří v záporném směru osy x , $\vec{n}_\Omega = (-1, 0, 0)$. V rotující soustavě (11.5) bude spin po $\frac{\pi}{2}$ -pulsu mířit ve směru osy y

$$|\psi'(T_{\frac{\pi}{2}}^{(0)})\rangle = \hat{R}_{-x}\left(\frac{\pi}{2}\right)|z, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = |y, +\rangle.$$

V laboratorní soustavě musíme udělat dodatečnou rotaci okolo osy z

$$\begin{aligned} |\psi(T_{\frac{\pi}{2}}^{(0)})\rangle &= \hat{R}_z\left(-\pi\frac{\omega_0}{2\omega_1}\right)|\psi'(T_{\frac{\pi}{2}}^{(0)})\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\pi\frac{\omega_0}{4\omega_1}} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi\frac{\omega_0}{4\omega_1}} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\pi\frac{\omega_0}{4\omega_1}} \\ ie^{-i\pi\frac{\omega_0}{4\omega_1}} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\pi\frac{\omega_0}{4\omega_1}} |z, +\rangle + e^{-i\pi\frac{\omega_0}{4\omega_1}} |z, -\rangle \right) = |\vec{p}, +\rangle. \end{aligned}$$



Obrázek 11.1: Průběh pravděpodobnosti překlopení spinu (11.12) v rezonanci $\Delta = 0$ (modrá čára), $\Delta = \omega_1$ (červená čárkovaná čára) a $\Delta = 2\omega_1$ (černá čerchovaná čára). Maxima je dosaženo po π -pulsu pro dané Δ .

Výsledek odpovídá čistému stavu s vektorem polarizace $\vec{p} = \left(\cos\left(\pi \frac{\omega_0}{2\omega_1}\right), -\sin\left(\pi \frac{\omega_0}{2\omega_1}\right), 0 \right)$.

Matice evolučního operátoru od času $t_0 = 0$ (11.10) se pro $\frac{\pi}{2}$ - a π -puls zjednoduší na

$$U\left(T_{\frac{\pi}{2}}^{(\Delta)}, 0\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\pi \frac{\omega}{4\Omega}} \left(1 - i\frac{\Delta}{\Omega}\right) & i\frac{\omega_1}{\Omega} e^{i\pi \frac{\omega}{4\Omega}} \\ i\frac{\omega_1}{\Omega} e^{-i\pi \frac{\omega}{4\Omega}} & e^{-i\pi \frac{\omega}{4\Omega}} \left(1 + i\frac{\Delta}{\Omega}\right) \end{pmatrix}, \quad (11.14)$$

$$U\left(T_{\pi}^{(\Delta)}, 0\right) = \begin{pmatrix} -i\frac{\Delta}{\Omega} e^{i\pi \frac{\omega}{2\Omega}} & i\frac{\omega_1}{\Omega} e^{i\pi \frac{\omega}{2\Omega}} \\ i\frac{\omega_1}{\Omega} e^{-i\pi \frac{\omega}{2\Omega}} & i\frac{\Delta}{\Omega} e^{-i\pi \frac{\omega}{2\Omega}} \end{pmatrix}.$$

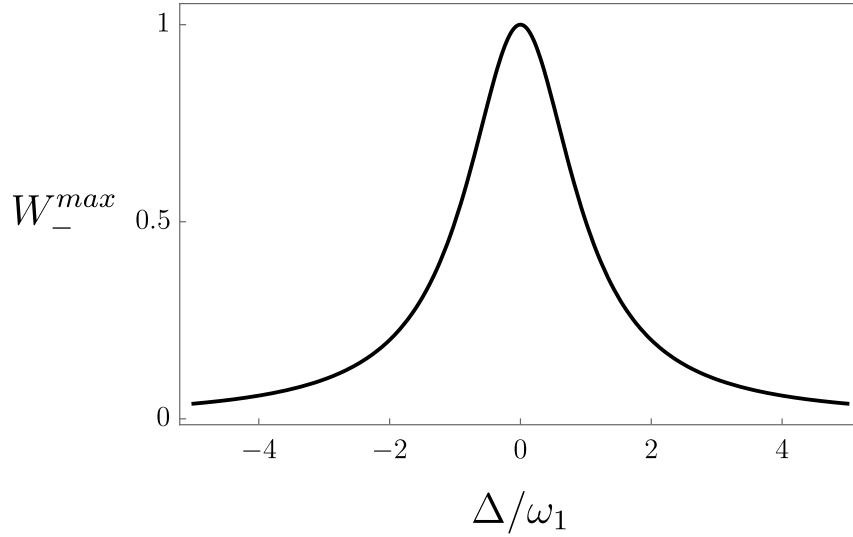
V rezonanci dostaneme

$$U\left(T_{\frac{\pi}{2}}^{(0)}, 0\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\pi \frac{\omega_0}{4\omega_1}} & ie^{i\pi \frac{\omega_0}{4\omega_1}} \\ ie^{-i\pi \frac{\omega_0}{4\omega_1}} & e^{-i\pi \frac{\omega_0}{4\omega_1}} \end{pmatrix},$$

$$U\left(T_{\pi}^{(0)}, 0\right) = \begin{pmatrix} 0 & ie^{i\pi \frac{\omega_0}{2\omega_1}} \\ ie^{-i\pi \frac{\omega_0}{2\omega_1}} & 0 \end{pmatrix}.$$

11.1.3 Nukleární magnetická rezonance

Nalezená odezva spinu na rotující magnetické pole zachycuje základní fyzikální princip nukleární magnetické rezonance, které lze využít např. v zobrazování a diagnostice (magnetic resonance imaging - MRI), nebo ve spektroskopii. V medicínských aplikacích MRI se



Obrázek 11.2: Maximální pravděpodobnost překlopení spinu (11.13) jako funkce Δ .

využívá spinu jádra vodíku (protonu) v molekule vody. Za běžných teplot a bez magnetického pole jsou spiny orientovány náhodně. Silným statickým polem $\vec{B}_0$ se dostatečně velká část spinů orientuje ve směru osy z , vznikne tzv. longitudinální magnetizace. Následně se aplikuje rezonanční $\frac{\pi}{2}$ -puls, který spiny překlopí do roviny xy . Po skončení pulsu spiny dále rotují v této rovině s frekvencí ω_0 a vytváří oscilující magnetické pole, které je zaznamenáno detekční cívkou. Síla signálu je úměrná hustotě spinů - je tedy možné určit množství molekul vody v daném místě a tak rozlišit různé tkáně. Signál navíc exponenciálně klesá v důsledku vzájemné interakce spinů s časovou škálou T_2 (střední doba poklesu signálu na $1/e$ původní hodnoty). Určením T_2 lze např. detekovat abnormální akumulaci tekutin v daném místě (otok). Spiny se také postupně vrací do rovnováhy s okolím, tj. znovu se orientují ve směru osy z a dojde obnovení longitudinální magnetizace. Tento proces probíhá na časové škále T_1 (řádově jedna sekunda), která se liší pro různé tkáně a je možné ji dále ovlivnit např. použitím kontrastních látek. Typické MRI přístroje používají statické magnetické pole B_0 intenzity v jednotkách T . Další tzv. gradientní magnety lokálně ovlivňují hodnotu B_0 , a tedy i frekvence ω_0 - tím lze dosáhnout prostorového rozlišení řádově v desetinách milimetru.

11.2 Obecný dvouhladinový systém

Uvažujme nyní obecný dvouhladinový systém s volným hamiltoniánem $\hat{H}_0$ a poruchou $\hat{V}(t)$. Pohybovou rovnici pro stavy v Diracově obraze (10.21)

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi^D(t)\rangle = \hat{V}^D(t) |\psi^D(t)\rangle, \quad (11.15)$$

přepíšeme maticově v bázi vlastních vektorů volného hamiltoniánu $|\psi_{1,2}\rangle$. Zvolíme jejich pořadí tak, že platí $E_1 \leq E_2$, a označíme

$$\frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \omega \geq 0.$$

Zavedeme $d(t)$ jako sloupcový vektor koeficientů rozvoje stavu $|\psi^D(t)\rangle$

$$d(t) = \begin{pmatrix} d_1(t) \\ d_2(t) \end{pmatrix}, \quad |\psi^D(t)\rangle = d_1(t)|\psi_1\rangle + d_2(t)|\psi_2\rangle.$$

Přechod mezi Schrödingerovým a Diracovým obrazem je dán $\hat{U}_0(t)$, takže

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}_0(t)|\psi^D(t)\rangle = d_1(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}|\psi_1\rangle + d_2(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}|\psi_2\rangle.$$

Matice interakčního členu $\hat{V}^D(t)$ v Diracově obraze je v bázi $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ rovna

$$V^D(t) = U_0^\dagger(t)V(t)U_0(t) = \begin{pmatrix} V_{11}(t) & V_{12}(t)e^{-i\omega t} \\ \bar{V}_{12}(t)e^{i\omega t} & V_{22}(t) \end{pmatrix}. \quad (11.16)$$

Operátor $\hat{V}(t)$ je hermitovský, takže $V_{11}(t)$ a $V_{22}(t)$ jsou reálné funkce. Rovnici (11.15) pak lze ekvivalentně zapsat maticově

$$i\hbar\dot{d}(t) = V^D(t)d(t). \quad (11.17)$$

11.2.1 Konstantní porucha pro dvouhladinový systém

V případě konstantní poruchy $\hat{V}(t) = \hat{V}$ je matice $V^D(t)$ (11.16) rovna

$$V^D(t) = \begin{pmatrix} V_{11} & \bar{V}_{21}e^{-i\omega t} \\ V_{21}e^{i\omega t} & V_{22} \end{pmatrix}. \quad (11.18)$$

Má podobný tvar jako matice hamiltoniánu (11.1) pro spin v rotujícím magnetickém poli z kapitoly 11 (až na opačné znaménko ω). Postup řešení rovnice (11.17) je analogický - časovou závislost odseparujeme unitární transformací (rotací)

$$V^D(t) = e^{-\frac{i}{2}\omega t\sigma_3}V^D(0)e^{\frac{i}{2}\omega t\sigma_3}.$$

V rotující soustavě je matice efektivní interakce V_{ef}^D rovna

$$\begin{aligned} V_{ef}^D &= V^D(0) - \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_3 = \begin{pmatrix} V_{11} - \frac{\hbar\omega}{2} & \bar{V}_{21} \\ V_{21} & V_{22} + \frac{\hbar\omega}{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{V_{11} + V_{22}}{2} I + \text{Re}V_{21} \sigma_1 + \text{Im}V_{21} \sigma_2 + \frac{V_{11} - V_{22} - \hbar\omega}{2} \sigma_3. \end{aligned}$$

Násobek jednotkové matice je v časovém vývoji irelevantní (způsobí dodatečnou globální fázi, která nemá žádný fyzikální význam). Zbylou část lze zapsat ve tvaru (11.3)

$$V_{ef}^{D'} = \frac{\hbar}{2} \Omega \vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma},$$

pomocí Rabiho frekvence Ω a jednotkového vektoru $\vec{n}_\Omega$ (11.4)

$$\begin{aligned} \Omega &= \sqrt{\Delta^2 + \frac{4}{\hbar^2} |V_{21}|^2}, \quad \Delta = \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar} - \omega, \\ \vec{n}_\Omega &= \frac{1}{\Omega} \left(\frac{2}{\hbar} \text{Re} V_{21}, \frac{2}{\hbar} \text{Im} V_{21}, \Delta \right). \end{aligned} \quad (11.19)$$

Evoluční operátor v Diracově obraze je potom roven (viz. (11.10))

$$\begin{aligned} S(t, 0) &= e^{-\frac{i}{2} \omega t \sigma_3} e^{-\frac{i}{2} \Omega t \vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma}} \\ &= \left(\cos \left(\frac{\omega t}{2} \right) I - i \sin \left(\frac{\omega t}{2} \right) \sigma_3 \right) \left(\cos \left(\frac{\Omega t}{2} \right) I - i \sin \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma} \right) \\ &= \begin{pmatrix} \left[\cos \left(\frac{\Omega t}{2} \right) - i \frac{\Delta}{\Omega} \sin \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \right] e^{-\frac{i}{2} \omega t} & -i \frac{2V_{21}}{\hbar \Omega} \sin \left(\frac{\Omega t}{2} \right) e^{-\frac{i}{2} \omega t} \\ -i \frac{2V_{21}}{\hbar \Omega} \sin \left(\frac{\Omega t}{2} \right) e^{\frac{i}{2} \omega t} & \left[\cos \left(\frac{\Omega t}{2} \right) + i \frac{\Delta}{\Omega} \sin \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \right] e^{\frac{i}{2} \omega t} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Pro počáteční podmínku, kdy je částice v čase $t_0 = 0$ v základním stavu $\hat{H}_0$, tj.

$$d(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

je řešením rovnice (11.17) (viz. (11.11))

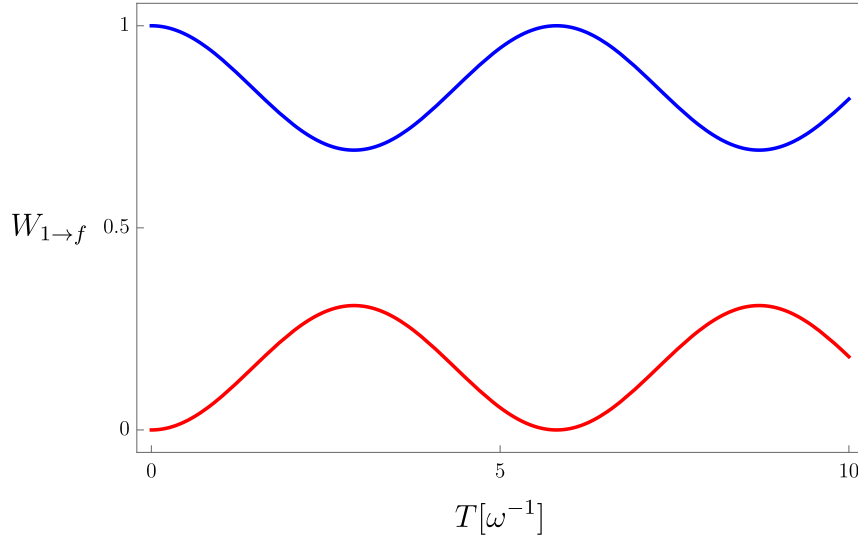
$$d(t) = S(t, 0) d(0) = \begin{pmatrix} \left[\cos \left(\frac{\Omega t}{2} \right) - i \frac{\Delta}{\Omega} \sin \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \right] e^{-\frac{i}{2} \omega t} \\ -i \frac{2V_{21}}{\hbar \Omega} \sin \left(\frac{\Omega t}{2} \right) e^{\frac{i}{2} \omega t} \end{pmatrix}.$$

Odsud určíme přesné pravděpodobnosti přechodu mezi stavy volného hamiltoniánu za čas T (viz. (11.12))

$$\begin{aligned} W_{1 \rightarrow 1}(T) &= \cos^2 \left(\frac{\Omega T}{2} \right) + \left(\frac{\Delta}{\Omega} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{\Omega T}{2} \right), \\ W_{1 \rightarrow 2}(T) &= \frac{4|V_{21}|^2}{\hbar^2 \Omega^2} \sin^2 \left(\frac{\Omega T}{2} \right). \end{aligned} \quad (11.20)$$

Vzhledem k (11.19) platí

$$W_{1 \rightarrow 1}(T) + W_{1 \rightarrow 2}(T) = \cos^2 \left(\frac{\Omega T}{2} \right) + \underbrace{\frac{\Delta^2 + \frac{4|V_{21}|^2}{\hbar^2}}{\Omega^2}}_1 \sin^2 \left(\frac{\Omega T}{2} \right) = 1.$$



Obrázek 11.3: Exaktní pravděpodobnosti přechodu $W_{1 \rightarrow 1}(t)$ (modrá čára) a $W_{1 \rightarrow 2}(t)$ (červená čára). V obrázku je zvoleno $V_{11} - V_{22} = 0.1 \hbar\omega$, $|V_{21}| = 0.3 \hbar\omega$. Rabiho frekvence je potom přibližně $\Omega \approx 1.08 \omega$.

11.2.2 Harmonická porucha pro dvouhladinový systém, rotating wave aproximace

Přechodovou frekvenci systému přeznačíme na

$$\omega_{21} = -\omega_{12} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \omega_0,$$

a uvažujme harmonickou poruchu tvaru

$$\hat{V}(t) = \hat{v}e^{-i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{i\omega t},$$

kde matice operátoru $\hat{v}$ má tvar

$$v = (\langle \psi_i | \hat{v} | \psi_j \rangle) = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22} \end{pmatrix}, \quad v_{11}, v_{22} \in \mathbb{R}.$$

Matice interakčního členu v Diracově obraze je

$$V^D(t) = \begin{pmatrix} v_{11}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) & v_{12}e^{-i(\omega+\omega_0)t} + \bar{v}_{21}e^{i(\omega-\omega_0)t} \\ v_{21}e^{-i(\omega-\omega_0)t} + \bar{v}_{12}e^{i(\omega+\omega_0)t} & v_{22}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \end{pmatrix}.$$

V tomto případě obecně neumíme vyřešit pohybové rovnice (11.17) analyticky. Pokud jsme ale blízko rezonance, kdy

$$\Delta = \omega - \omega_0 \approx 0,$$

lze použít tzv. „rotating wave approximation“ (RWA). Spočívá v tom, že ve $V^D(t)$ ponecháme pouze členy úměrné $e^{\pm i\Delta t}$. Ostatní členy rychle oscilují a na delší časové škále se jejich vliv vyruší. V RWA je pak interakční člen v Diracově obraze roven

$$V_{RWA}^D(t) = \begin{pmatrix} 0 & \bar{v}_{21}e^{i\Delta t} \\ v_{21}e^{-i\Delta t} & 0 \end{pmatrix}.$$

Má tedy stejný tvar jako pro konstantní poruchu (11.18) s $V_{11} = V_{22} = 0$ a záměnou $\omega \rightarrow -\Delta$. Postup řešení je analogický, efektivní interakce je v tomto případě

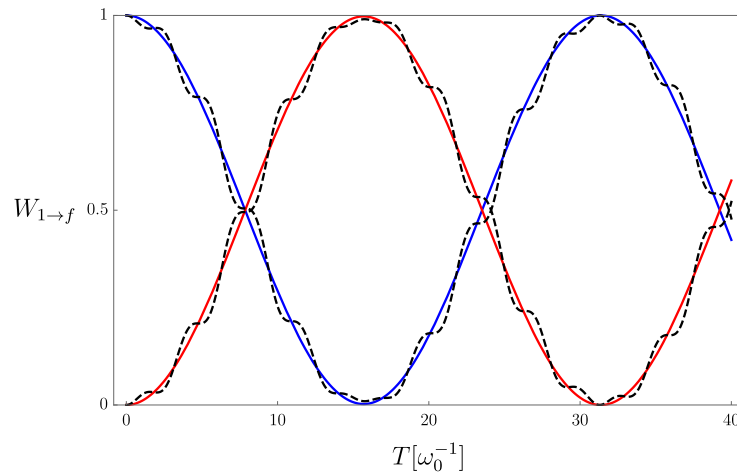
$$V_{ef}^D = V_{RWA}^D(0) + \frac{\hbar\Delta}{2}\sigma_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Delta & \frac{2}{\hbar}\bar{v}_{21} \\ \frac{2}{\hbar}v_{21} & -\Delta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\Omega\vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma}.$$

Rabiho frekvence Ω a jednotkový vektor $\vec{n}_\Omega$ jsou

$$\Omega = \sqrt{\Delta^2 + \frac{4}{\hbar^2}|v_{21}|^2}, \quad \vec{n}_\Omega = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{2}{\hbar}\text{Re } v_{21}, \frac{2}{\hbar}\text{Im } v_{21}, \Delta \right).$$

Pro harmonickou poruchu v RWA jsou tedy pravděpodobnosti přechodu $W_{i \rightarrow f}^{(RWA)}(T)$ dány vztahy (11.20) s $\Delta = \omega - \omega_0$.

Pro ilustraci je na obrázku 11.4 srovnání výsledku v RWA s numerickým řešením rovnic (11.17).



Obrázek 11.4: Porovnání pravděpodobností přechodu v RWA s numerickým řešením pohybových rovnic (11.17). V simulacích je zvoleno $\omega = 1.01 \omega_0$, $v_{ij} = 0.1 \hbar\omega_0$

11.3 Precizní spektroskopie

Magnetické rezonance lze využít k velmi přesnému určení vlastní přechodové frekvence ω_0 . Z předchozího víme, že pravděpodobnost překlpení spinu závisí na rozdílu frekvencí

rotujícího pole a spinu Δ , a také na době působení pole. Maximální pravděpodobnost překlopení lze dosáhnout pro $\Delta = 0$. Přesnost určení ω_0 pak závisí na šířce maxima δ okolo rezonance (tzv. full width at half maximum - FWHM). Ukážeme si základní principy dvou metod měření ω_0 . V obou postupech částice prolétávají přístrojem rychlostí v magnetickými poli. V bezinterakční oblasti je pouze statické pole ve směru osy z $\vec{B}_0$, v interakční oblasti je navíc pole $\vec{B}_1(t)$ rotující v rovině xy (11.8). Doba působení pole závisí na rychlosti částice a délce oblasti.

11.3.1 Rabiho metoda měření ω_0

V Rabiho přístroji máme pouze jednu interakční oblast délky L . Dobu, kterou v ní částice stráví, označíme jako $\tau = \frac{L}{v}$. Pravděpodobnost překlopení spinu po průletu Rabiho přístrojem je daná vztahem (11.12). Délka interakční oblasti se zvolí tak, že je rovná π -pulsu pro hledanou rezonanci, tj.

$$\frac{L}{v} = \tau = T_{\pi}^{(0)} = \frac{\pi}{\omega_1}. \quad (11.21)$$

Pravděpodobnost překlopení spinu jako funkce Δ/ω_1 je potom rovna

$$W_-^{Rabi} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Delta}{\omega_1}\right)^2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta}{\omega_1}\right)^2} \right). \quad (11.22)$$

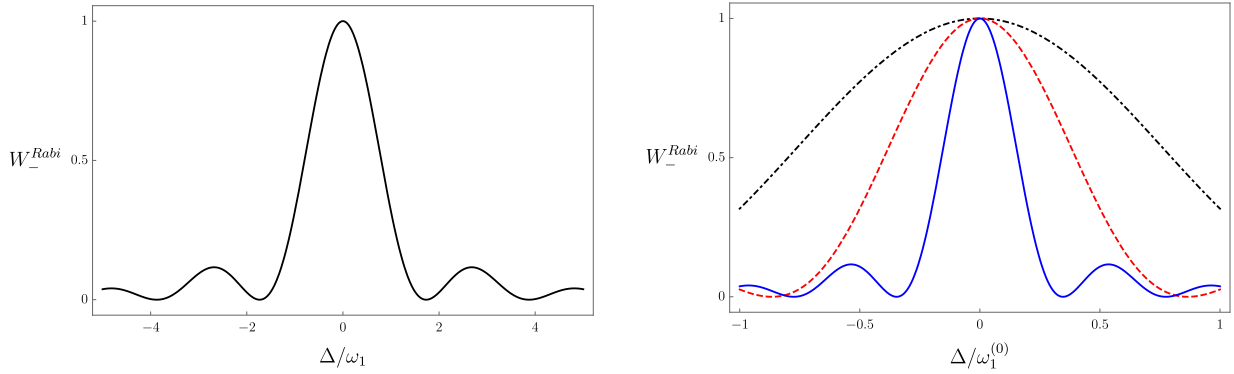
Průběh této funkce je na obrázku 11.5 vlevo. Šířka maxima δ je úměrná $\omega_1 \sim \frac{1}{\tau}$, jak lze vidět z grafu vpravo pro různé hodnoty ω_1 . Přesnost určení frekvence ω_0 lze tedy zlepšit současným prodloužením délky interakční oblasti (zvětší τ) a snížením intenzity rotujícího magnetického pole (zmenší $\omega_1 \sim B_1$) tak, že stále platí podmínka (11.21). Ve skutečnosti tu hrají podstatnou roli další faktory (částice mají nějaké netriviální rozdělení rychlostí, rotující magnetické pole není dostatečně homogenní v celé interakční oblasti), které šířku maxima zvětšují. Vliv těchto poruch roste s délkou interakční oblasti. Přesnost určení ω_0 tedy nelze zlepšovat prodlužováním interakční oblasti dle libosti. Existuje nějaká optimální délka L , pro kterou dosáhneme nejlepší přesnosti.

11.3.2 Ramseyho interferometr

Lepší přesnosti určení ω_0 lze dosáhnout pomocí Ramseyho interferometru, který se skládá ze tří oblastí. V 1. a 3. je zapnuté rotující magnetické pole, ve 2. je pouze statické pole ve směru osy z . Délka interakčních oblastí je stejná, označme ji opět L . Volí se tak, že doba průletu interakční oblastí τ odpovídá $\frac{\pi}{2}$ -pulsu pro hledanou rezonanci

$$\frac{L}{v} = \tau = T_{\frac{\pi}{2}}^{(0)} = \frac{\pi}{2\omega_1}.$$

Délku bezinterakční oblasti označíme L_0 , dobu průletu $T = \frac{L_0}{v}$. Ukážeme, že šířka maxima okolo rezonance bude nepřímo úměrná T .



Obrázek 11.5: Vlevo je znázorněná pravděpodobnost překlopení spinu v Rabiho přístroji (11.22). Vpravo je stejná funkce pro $\omega_1 = \omega_1^{(0)}$ (čerchovaná černá čára), $\omega_1 = \omega_1^{(0)}/2$ (čárkovaná červená čára) a $\omega_1 = \omega_1^{(0)}/5$ (modrá čára). Šířka maxima klesá s klesajícím ω_1 , je úměrná $\omega_1 \sim \frac{1}{\tau}$.

Celkový evoluční operátor pro Ramseyho interferometr $\hat{U}_R$ lze zapsat jako součin tří evolučních operátorů pro jednotlivé oblasti

$$\hat{U}_R = \hat{U}(T + 2\tau, T + \tau) \hat{U}_0(T + \tau, \tau) \hat{U}(\tau, 0).$$

Operátor $\hat{U}(\tau, 0)$ máme v rovnici (11.10). $\hat{U}_0$ je evoluční operátor v bezinterakční oblasti, kde je pouze statické magnetické pole $\vec{B}_0$ ve směru osy z , tj.

$$\hat{U}_0(T + \tau, \tau) = \hat{U}_0(T) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 T} = e^{i\omega_0 \hat{S}_3 T} \equiv \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega_0}{2} T} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\omega_0}{2} T} \end{pmatrix} \quad (11.23)$$

Evoluční operátor $\hat{U}(t, t_0)$ s libovolným počátečním časem t_0 určíme s využitím vlastnosti (10.4) a unitarity

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, 0) \hat{U}(0, t_0) = \hat{U}(t, 0) \hat{U}^\dagger(t_0, 0).$$

Z tvaru evolučního operátoru $\hat{U}(t, 0)$ (11.6) pak dostaneme

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} \omega t \hat{S}_3} e^{-\frac{i}{\hbar} \Omega t \vec{n}_\Omega \cdot \hat{\vec{S}}} e^{\frac{i}{\hbar} \Omega t_0 \vec{n}_\Omega \cdot \hat{\vec{S}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \omega t_0 \hat{S}_3} = e^{\frac{i}{\hbar} \omega t \hat{S}_3} e^{-\frac{i}{\hbar} \Omega(t-t_0) \vec{n}_\Omega \cdot \hat{\vec{S}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \omega t_0 \hat{S}_3}. \quad (11.24)$$

Matice tohoto operátoru ve standardní bázi je

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= R_z^{(\frac{1}{2})}(-\omega t) R_{\vec{n}_\Omega}^{(\frac{1}{2})}(\Omega(t-t_0)) R_z^{(\frac{1}{2})}(\omega t_0) \\ &= \begin{pmatrix} \left[\cos\left(\frac{\Omega(t-t_0)}{2}\right) - i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega(t-t_0)}{2}\right) \right] e^{i\frac{\omega}{2}(t-t_0)} & i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega(t-t_0)}{2}\right) e^{i\frac{\omega}{2}(t+t_0)} \\ i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega(t-t_0)}{2}\right) e^{-i\frac{\omega}{2}(t+t_0)} & \left[\cos\left(\frac{\Omega(t-t_0)}{2}\right) + i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega(t-t_0)}{2}\right) \right] e^{-i\frac{\omega}{2}(t-t_0)} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (11.25)$$

všimněme si, že v exponenciálách na antidiagonále je součet časů $t + t_0$.

Určíme nejprve amplitudu pravděpodobnosti překlopení spinu po průchodu interferometrem

$$\mathcal{A}_- = \langle z, -|\hat{U}_R|z, + \rangle = \langle z, -|\hat{U}(T + 2\tau, T + \tau) \hat{U}_0(T + \tau, \tau) \hat{U}(\tau, 0)|z, + \rangle.$$

Výpočet rozdělíme na dvě části, určíme zvlášť $\hat{U}_0(T + \tau, \tau) \hat{U}(\tau, 0)|z, + \rangle$ a $\langle z, -|\hat{U}(T + 2\tau, T + \tau)$. Pro první část s použitím matice (11.23) a výsledku (11.11) dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{U}_0(T + \tau, \tau) \hat{U}(\tau, 0)|z, + \rangle &\equiv U_0(T) U(\tau)\psi(0) = U_0(T)\psi(\tau) \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega_0}{2}T} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\omega_0}{2}T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [\cos(\frac{\Omega\tau}{2}) - i\frac{\Delta}{\Omega} \sin(\frac{\Omega\tau}{2})] e^{i\frac{\omega}{2}\tau} \\ i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin(\frac{\Omega\tau}{2}) e^{-i\frac{\omega}{2}\tau} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} [\cos(\frac{\Omega\tau}{2}) - i\frac{\Delta}{\Omega} \sin(\frac{\Omega\tau}{2})] e^{i\frac{\omega}{2}\tau} e^{i\frac{\omega_0}{2}T} \\ i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin(\frac{\Omega\tau}{2}) e^{-i\frac{\omega}{2}\tau} e^{-i\frac{\omega_0}{2}T} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11.26)$$

Druhá část je díky (11.25), kam dosadíme $t = T + 2\tau$, $t_0 = T + \tau$, rovna

$$\begin{aligned} \langle z, -|\hat{U}(T + 2\tau, T + \tau) &\equiv \\ \left(i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) e^{-i\frac{\omega}{2}(2T+3\tau)}, \left[\cos\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) + i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) \right] e^{-i\frac{\omega}{2}\tau} \right). \end{aligned} \quad (11.27)$$

Vynásobením vektorů (11.26) a (11.27) dostaneme amplitudu překlopení spinu

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_- &= i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) e^{-i\frac{\omega}{2}(2T+3\tau)} \left[\cos\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) - i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) \right] e^{i\frac{\omega}{2}\tau} e^{i\frac{\omega_0}{2}T} \\ &\quad + i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) e^{-i\frac{\omega}{2}\tau} e^{-i\frac{\omega_0}{2}T} \left[\cos\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) + i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) \right] e^{-i\frac{\omega}{2}\tau} \\ &= i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) e^{-i\omega\tau} e^{-i\frac{\omega}{2}T} \left(\left[\cos\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) - i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) \right] e^{-i\frac{\Delta}{2}T} + \right. \\ &\quad \left. + \left[\cos\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) + i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) \right] e^{i\frac{\Delta}{2}T} \right) \\ &= 2i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) e^{-i\omega\tau} e^{-i\frac{\omega}{2}T} \left(\cos\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) \cos\left(\frac{\Delta T}{2}\right) - \frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) \sin\left(\frac{\Delta T}{2}\right) \right). \end{aligned}$$

Pravděpodobnost překlopení spinu po průchodu Ramseyho interferometrem je pak

$$W_- = |\mathcal{A}_-|^2 = 4 \left(\frac{\omega_1}{\Omega} \right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) \cos\left(\frac{\Delta T}{2}\right) - \frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right) \sin\left(\frac{\Delta T}{2}\right) \right]^2.$$

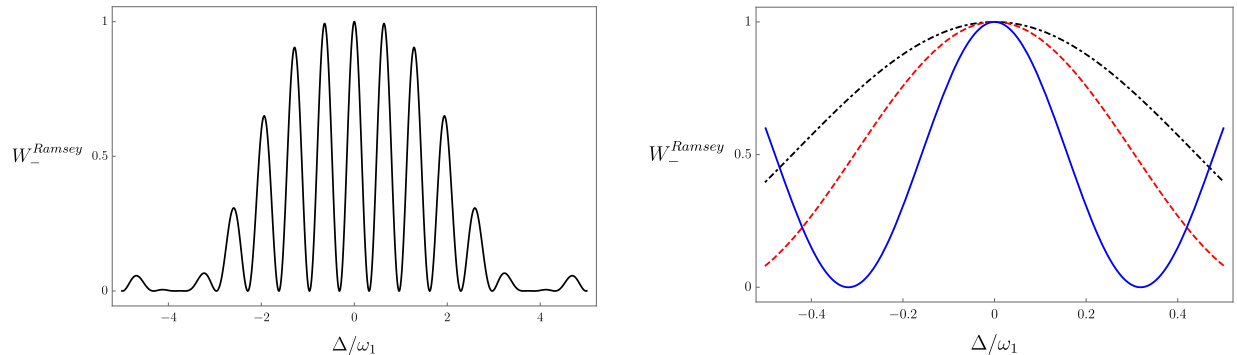
Pro $\tau = T_{\frac{\pi}{2}}^{(0)} = \frac{\pi}{2\omega_1}$ lze pravděpodobnost překlopení spinu upravit do tvaru

$$W_-^{Ramsey} = \frac{4}{1 + \left(\frac{\Delta}{\omega_1}\right)^2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{4} \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta}{\omega_1}\right)^2} \right) \left[\cos \left(\frac{\pi}{4} \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta}{\omega_1}\right)^2} \right) \cos \left(\frac{\Delta T}{2} \right) - \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\Delta}{\omega_1}\right)^2}} \sin \left(\frac{\pi}{4} \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta}{\omega_1}\right)^2} \right) \sin \left(\frac{\Delta T}{2} \right) \right]^2. \quad (11.28)$$

Průběh této funkce pro $T = 5\tau$ je na obrázku 11.6 vlevo. Jsou zde vidět typické úzké ostré píky (Ramsey fringes). Blízko rezonance lze vztah (11.28) aproximovat pomocí

$$\Delta \approx 0 \implies W_-^{Ramsey} \approx \cos^2 \left(\frac{\Delta T}{2} \right). \quad (11.29)$$

Šířka píku okolo $\Delta = 0$ je tedy nepřímo úměrná době průletu bezinterakční oblastí T (viz. graf vpravo pro různé hodnoty T). Vyšší přesnosti určení ω_0 tak lze dosáhnout jejím prodloužením, což je technicky jednodušší, než v případě Rabiho přístroje.



Obrázek 11.6: Vlevo je znázorněná pravděpodobnost překlopení spinu po průchodu Ramseyho interferometrem (11.28) jako funkce Δ/ω_1 pro $T = 5\tau = \frac{5\pi}{2\omega_1}$. Vpravo je pak okolí rezonančního maxima pro různé délky bezinterakční oblasti - $T = \tau$ (čerchovaná černá čára), $T = 2\tau$ (čárkovaná červená čára) a $T = 5\tau$ (modrá čára). Šířka maxima klesá s rostoucím T .

11.4 Příklady

Cvičení 38. V RWA nalezněte pravděpodobnost excitace atomu za čas T pro dvouhladinový atom interagující s klasickou elektrickou vlnou ze cvičení 37. V čase $t = 0$ je atom v základním stavu.

Návod: Interakční člen v Diracově obraze je ve vztahu (10.28). V RWA má potom tvar

$$V_{RWA}^D(t) = -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \bar{\alpha}e^{i\Delta t} \\ \alpha e^{-i\Delta t} & 0 \end{pmatrix},$$

kde $\Delta = \omega - \omega_0$. Efektivní interakční člen v rotující soustavě je tedy

$$V_{ef}^D = V_{RWA}^D(0) + \frac{\hbar\Delta}{2}\sigma_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Delta & -2\bar{\alpha} \\ -2\alpha & -\Delta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\Omega\vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma}.$$

Rabiho frekvence Ω a jednotkový vektor $\vec{n}_\Omega$ jsou rovny

$$\Omega = \sqrt{\Delta^2 + 4|\alpha|^2}, \quad \vec{n}_\Omega = \frac{1}{\Omega}(-2\text{Re}\alpha, -2\text{Im}\alpha, \Delta).$$

Pravděpodobnost excitace atomu v čase T bude podle (11.20) rovna

$$W_{g \rightarrow e}^{(RWA)}(T) = \frac{4|\alpha|^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega T}{2}\right).$$

Cvičení 39. Uvažujte spin $\frac{1}{2}$ v silném konstantním poli ve směru osy z $\vec{B}_0 = (0, 0, B_0)$ a slabém oscilujícím poli v ose x $\vec{B}_1 = (2B_1 \cos(\omega t), 0, 0)$. V RWA nalezněte pravděpodobnost překlopení spinu v čase T . V čase $t = 0$ má spin kladnou projekci do osy z .

Návod: Hamiltonián spinu v příslušných magnetických polích má tvar

$$\hat{H} = -\frac{\mu B_0}{\hbar}\hat{S}_3 - \frac{\mu B_1}{\hbar}2\cos(\omega t)\hat{S}_1 = -\omega_0\hat{S}_3 - \omega_1 2\cos(\omega t)\hat{S}_1 = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).$$

Oscilující pole v ose x představuje harmonickou poruchu

$$\hat{V}(t) = -\omega_1\hat{S}_1(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}).$$

V Diracově obraze dostaneme matici

$$V^D(t) = -\frac{\hbar\omega_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\Delta t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t} \\ e^{-i\Delta t} + e^{i(\omega+\omega_0)t} & 0 \end{pmatrix},$$

kde $\Delta = \omega - \omega_0$. Blízko rezonance, kdy $\Delta \approx 0$ využijeme RWA a nalezneme

$$V_{RWA}^D(t) = -\frac{\hbar\omega_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\Delta t} \\ e^{-i\Delta t} & 0 \end{pmatrix},$$

Efektivní interakční člen v rotující soustavě je tedy

$$V_{ef}^D = V_{RWA}^D(0) + \frac{\hbar\Delta}{2}\sigma_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Delta & \omega_1 \\ \omega_1 & -\Delta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\Omega\vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma}.$$

Rabiho frekvence Ω a jednotkový vektor $\vec{n}_\Omega$ jsou rovny

$$\Omega = \sqrt{\Delta^2 + \omega_1^2}, \quad \vec{n}_\Omega = \frac{1}{\Omega}(\omega_1, 0, \Delta).$$

Pravděpodobnost překlopení spinu v čase T bude podle (11.20) rovna

$$W_-^{(RWA)}(T) = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega T}{2}\right).$$

Kapitola 12

Nestacionární poruchová teorie

Uvažujeme hamiltonián tvaru

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

kde $\hat{H}_0$ nezávisí na čase (volný hamiltonián). Pro jednoduchost předpokládejme, že $\hat{H}_0$ má čistě bodové spektrum, tj. vlastní vektory $|\psi_m\rangle$ tvoří ON bázi

$$\hat{H}_0|\psi_m\rangle = E_m|\psi_m\rangle, \quad \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}, \quad \sum_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m| = \hat{I}. \quad (12.1)$$

Naším cílem je určit pravděpodobnost přechodu mezi vlastními stavy volného hamiltoniánu $|\psi(t_0)\rangle = |\psi_i\rangle$ a $|\psi_f\rangle$ časovým vývojem z času t_0 do t_f

$$W_{i \rightarrow f} = |\langle\psi_f|\psi(t_f)\rangle|^2 = |\langle\psi_f|\hat{U}(t_f, t_0)|\psi_i\rangle|^2. \quad (12.2)$$

Interakční člen $\varepsilon\hat{V}(t)$ považujeme za malou poruchu.

12.1 Dysonův rozvoj evolučního operátoru v Diracově obraze

Budeme pracovat v Diracově obraze, který se v čase $t_1 = t_0$ shoduje se Schrödingerovým. S použitím (10.27) přepíšeme $\hat{U}(t_f, t_0)$ pomocí evolučního operátoru v Diracově obraze a evolučního operátoru pro volný hamiltonián

$$\hat{U}(t_f, t_0) = \hat{U}_0(t_f, t_0)\hat{S}(t_f, t_0).$$

Finální stav $|\psi_f\rangle$ je vlastní vektor $\hat{H}_0$, takže pro pravděpodobnost přechodu (12.2) nalezneme

$$W_{i \rightarrow f} = |\langle\psi_f|\hat{U}(t_f, t_0)|\psi_i\rangle|^2 = |\langle\psi_f|\hat{S}(t_f, t_0)|\psi_i\rangle|^2. \quad (12.3)$$

Evoluční operátor v Diracově obraze $\hat{S}(t_f, t_0)$ se řídí diferenciální rovnicí

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S}(t, t_0) = \varepsilon \hat{V}^D(t) \hat{S}(t, t_0), \quad \hat{S}(t_0, t_0) = \hat{I}. \quad (12.4)$$

Její řešení hledáme ve formě mocninné (Dysonovy) řady

$$\hat{S}(t_f, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \hat{S}^{(n)}(t_f, t_0). \quad (12.5)$$

Dosazením do (12.4) dostaneme postupně vztahy pro jednotlivé členy

$n = 0$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S}^{(0)} = 0 \implies \hat{S}^{(0)}(t_f, t_0) = \hat{I}, \quad (12.6)$$

$n = 1$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S}^{(1)} = \hat{V}^D \hat{S}^{(0)} = \hat{V}^D \implies \hat{S}^{(1)}(t_f, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \hat{V}^D(t_1), \quad (12.7)$$

$n = 2$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S}^{(2)} = \hat{V}^D \hat{S}^{(1)} &\implies \hat{S}^{(2)}(t_f, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \hat{V}^D(t_2) \hat{S}^{(1)}(t_2, t_0) dt_2 \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{V}^D(t_2) \hat{V}^D(t_1), \end{aligned} \quad (12.8)$$

takže pro n -tý člen platí

$$\hat{S}^{(n)}(t_f, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t_f} dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{V}^D(t_n) \hat{V}^D(t_{n-1}) \dots \hat{V}^D(t_1). \quad (12.9)$$

Zavedeme operaci časového uspořádání součinu operátorů (předpokládáme, že ve stejném čase $t_1 = t_2$ operátory komutují)

$$T \left[\hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \right] = \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & t_1 \geq t_2 \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & t_1 \leq t_2 \end{cases},$$

analogicky pro libovolný počet operátorů. Snadno nahlédneme, že platí následující rovnost

$$\begin{aligned} &\int_{t_0}^{t_f} dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 T \left[\hat{V}^D(t_n) \hat{V}^D(t_{n-1}) \dots \hat{V}^D(t_1) \right] = \\ &= \sum_{\sigma \in S_n} \int_{t_0}^{t_f} dt_{\sigma(n)} \int_{t_0}^{t_{\sigma(n)}} dt_{\sigma(n-1)} \dots \int_{t_0}^{t_{\sigma(2)}} dt_{\sigma(1)} \hat{V}^D(t_{\sigma(n)}) \hat{V}^D(t_{\sigma(n-1)}) \dots \hat{V}^D(t_{\sigma(1)}) \end{aligned} \quad (12.10)$$

V sumě přes všechny permutace n prvků je pak $n!$ identických členů. n -tý člen rozvoje evolučního operátoru v Diracově obraze pak můžeme zapsat pomocí T -součinu ve tvaru

$$\hat{S}^{(n)}(t_f, t_0) = \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^{t_f} dt_n \int_{t_0}^{t_f} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_f} dt_1 T \left[\hat{V}^D(t_n) \hat{V}^D(t_{n-1}) \dots \hat{V}^D(t_1) \right], \quad (12.11)$$

kde všechny integrály mají stejné meze. Dysonovu řadu (12.5) lze formálně zapsat jako časově uspořádanou exponenciálu

$$\begin{aligned} \hat{S}(t_f, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \right)^n \int_{t_0}^{t_f} dt_n \int_{t_0}^{t_f} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_f} dt_1 T \left[\hat{V}^D(t_n) \hat{V}^D(t_{n-1}) \dots \hat{V}^D(t_1) \right] \\ &= T \left[\exp \left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \int_{t_0}^{t_f} dt \hat{V}^D(t) \right) \right]. \end{aligned} \quad (12.12)$$

12.2 Amplitudy přechodu

Maticové elementy rozvoje evolučního operátoru v Diracově obraze (12.5), tj. amplitudy přechodu v n -tém řádu poruchového rozvoje, označíme jako

$$S_{fi}^{(n)}(t_f, t_0) = \langle \psi_f | \hat{S}^{(n)}(t_f, t_0) | \psi_i \rangle. \quad (12.13)$$

Pravděpodobnost přechodu (12.3) je potom rovna

$$W_{i \rightarrow f} = \left| S_{fi}^{(0)}(t_f, t_0) + \varepsilon S_{fi}^{(1)}(t_f, t_0) + \varepsilon^2 S_{fi}^{(2)}(t_f, t_0) + \dots \right|^2. \quad (12.14)$$

Pro nultý řád s použitím (12.6) nalezneme

$$S_{fi}^{(0)}(t_f, t_0) = \delta_{fi}. \quad (12.15)$$

V 1. řádu ze vztahu (12.7) a přechodem do Schrödingerova obrazu (10.20) dostaneme

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(1)}(t_f, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \langle \psi_f | \hat{V}^D(t_1) | \psi_i \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \underbrace{\langle \psi_f | \hat{U}_0^\dagger(t_1, t_0)}_{e^{\frac{i}{\hbar} E_f(t_1 - t_0)} \langle \psi_f |} \hat{V}(t_1) \underbrace{\hat{U}_0(t_1, t_0) | \psi_i \rangle}_{e^{-\frac{i}{\hbar} E_i(t_1 - t_0)} | \psi_i \rangle} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 e^{i \frac{E_f - E_i}{\hbar} (t_1 - t_0)} \langle \psi_f | \hat{V}(t_1) | \psi_i \rangle. \end{aligned}$$

Označíme si maticové elementy interakčního členu ve Schrödingerově obraze $\hat{V}(t)$ v bázi vlastních vektorů $\hat{H}_0$

$$V_{mn}(t) = \langle \psi_m | \hat{V}(t) | \psi_n \rangle,$$

a Bohrovy frekvence odpovídající přeskoků mezi stavy $|\psi_m\rangle$ a $|\psi_n\rangle$

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}.$$

Amplitudu přechodu v 1. řádu pak zapíšeme ve tvaru

$$S_{fi}^{(1)}(t_f, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 e^{i\omega_{fi}(t_1-t_0)} V_{fi}(t_1). \quad (12.16)$$

Ve druhém řádu s použitím (12.8) a báze (12.1) analogickým postupem nalezneme

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(2)}(t_f, t_0) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \langle \psi_f | \hat{V}^D(t_2) \sum_{m_1} |\psi_{m_1}\rangle \langle \psi_{m_1}| \hat{V}^D(t_1) | \psi_i \rangle \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{m_1} \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 V_{fm_1}(t_2) e^{i\omega_{fm_1}(t_2-t_0)} V_{m_1i}(t_1) e^{i\omega_{m_1i}(t_1-t_0)}. \end{aligned}$$

Pro amplitudu přechodu v n -tém řádu pak platí

$$S_{fi}^{(n)}(t_f, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \sum_{m_1} \dots \sum_{m_{n-1}} \int_{t_0}^{t_f} dt_n \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 V_{fm_{n-1}}(t_n) e^{i\omega_{fm_{n-1}}(t_n-t_0)} \dots V_{m_1i}(t_1) e^{i\omega_{m_1i}(t_1-t_0)}$$

12.3 Přechody v 1. řádu poruchového rozvoje

V dalším budeme pracovat v 1. řádu poruchového rozvoje a položíme $\varepsilon = 1$, $t_0 = 0$ a $t_f = T$. Počáteční a finální stav musí být různé, jinak dostaneme pro pravděpodobnost přechodu nesmyslný výsledek. Pokud je totiž $i \equiv f$, pak je pravděpodobnost přechodu v 1. řádu rovna

$$W_{i \rightarrow i}^{(1)}(T) = \left| 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^T dt V_{ii}(t) \right|^2.$$

Druhý člen na pravé straně je ryze imaginární, protože V_{ii} je diagonální maticový element samosdruženého operátoru a jako takový musí být reálný. Pravděpodobnost návratu do výchozího stavu pak vychází větší nebo rovná jedné. Uvažujme v dalším $i \neq f$. Pravděpodobnost přechodu v 1. řádu je potom

$$W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T) = \left| S_{fi}^{(1)}(T, 0) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^T dt e^{i\omega_{fi}t} V_{fi}(t) \right|^2. \quad (12.17)$$

12.3.1 Porucha nezávislá na čase

Pro interakci nezávislou na čase $\hat{V} \neq \hat{V}(t)$ můžeme (12.17) upravit do tvaru

$$W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T) = \frac{4|V_{fi}|^2}{(E_f - E_i)^2} \sin^2 \left(\frac{(E_f - E_i)T}{2\hbar} \right) = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} I_T(\omega_{fi}), \quad (12.18)$$

kde $I_T(\omega)$ je funkce

$$I_T(\omega) = \left| \int_0^T dt e^{i\omega t} \right|^2 = \frac{4}{\omega^2} \sin^2 \left(\frac{\omega T}{2} \right). \quad (12.19)$$

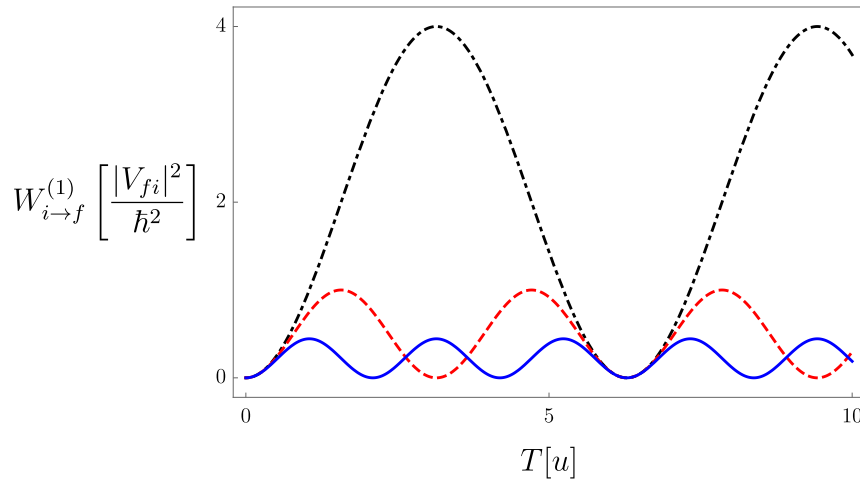
1. řád poruchového rozvoje lze použít pokud platí

$$|V_{fi}| \ll |E_f - E_i|.$$

Pravděpodobnost přechodu (12.18) jako funkce T je zobrazena na obrázku 12.1 pro různé hodnoty ω_{fi} . S rostoucím ω_{fi} výrazně klesá amplituda a oscilace se zrychlují. Je zde vidět rezonanční charakter - pravděpodobnost přechodu je výrazně větší pro malé ω_{fi} , tj. blízké energetické hladiny. V limitě $\omega_{fi} \rightarrow 0$ (přechod mezi ortogonálními stavy v rámci degenerované hladiny $E_f = E_i$) platí

$$W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T) = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} T^2.$$

Tento vztah lze použít jen pro velmi krátké časy $T \ll \frac{\hbar}{|V_{fi}|}$.



Obrázek 12.1: Pravděpodobnost přechodu v 1. řádu poruchové teorie (12.18) jako funkce T pro různé hodnoty ω_{fi} . Černá čerchovaná čára odpovídá $\omega_{fi} = \frac{1}{u}$, červená čárkovaná čára $\omega_{fi} = \frac{2}{u}$ a modrá čára $\omega_{fi} = \frac{3}{u}$.

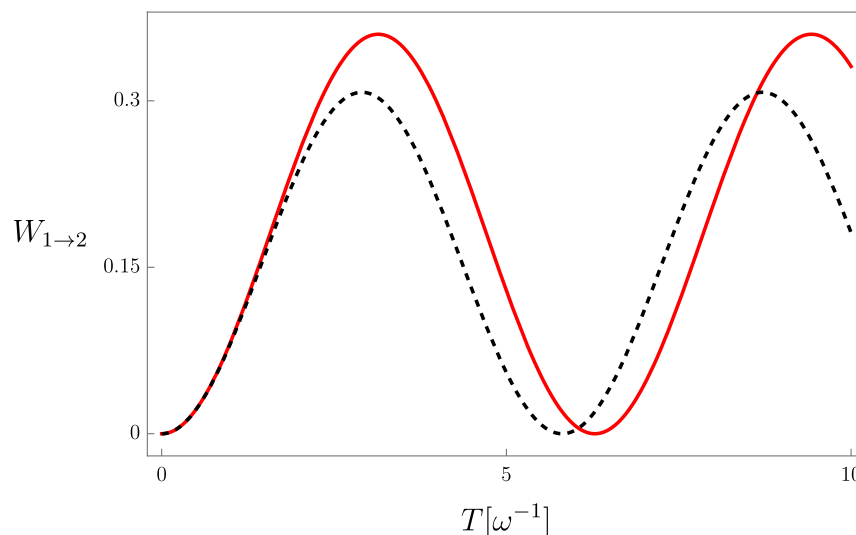
Pro dvouhladinové systémy můžeme porovnat poruchový výsledek (12.18) s přesným výsledkem (11.20) pro přechod mezi stavy $|1\rangle$ a $|2\rangle$. Pokud lze $\hat{V}$ považovat za malou poruchu, tj.

$$\frac{|V_{21}|}{\hbar} \ll \omega, \quad \frac{|V_{11} - V_{22}|}{\hbar} \ll \omega,$$

pak je Rabiho frekvence Ω (11.19) srovnatelná s ω . V takovém případě je poruchový výsledek velmi blízký přesnému

$$W_{1 \rightarrow 2}^{(1)}(T) = \frac{4|V_{21}|^2}{\hbar^2 \omega^2} \sin^2\left(\frac{\omega T}{2}\right) \approx W_{1 \rightarrow 2}(T), \quad (12.20)$$

alespoň na krátké časové škále $T \ll \frac{2\pi}{\omega}$. Pro ilustraci je na obrázku 12.2 porovnána přesná pravděpodobnost přechodu (11.20) s výsledkem 1. řádu poruchového rozvoje (12.20). Parametry jsou zvoleny stejně jako v obrázku 11.3.



Obrázek 12.2: Pravděpodobnost přechodu ze základní na excitovanou hladinu dvouhladinového systému. Červená křivka odpovídá přesnému výsledku (11.20), černá čárkovaná čára je 1. řád poruchového rozvoje (12.20). Parametry jsou zvoleny stejně jako v obrázku 11.3.

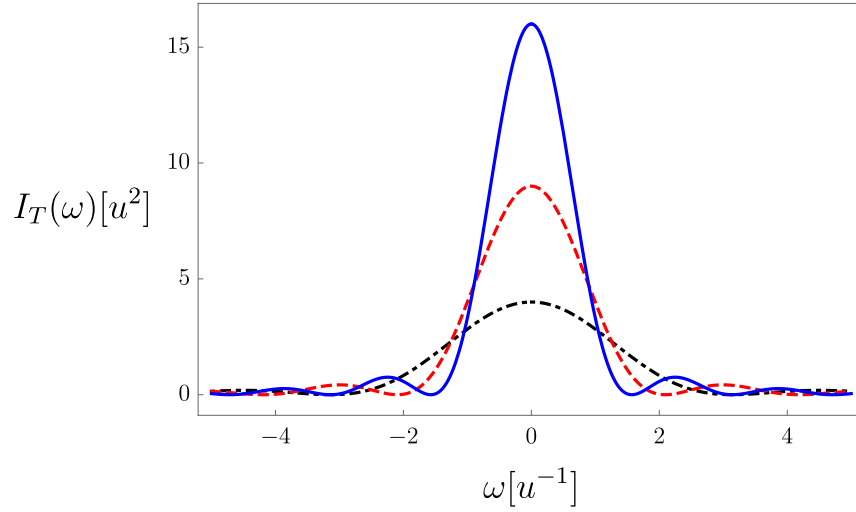
Průběh funkce $I_T(\omega)$ pro různé hodnoty T je znázorněn na obrázku 12.3. S rostoucím T je pík okolo $\omega = 0$ stále užší a vyšší. Pološířka maxima $I_T(\omega)$ v nule je přibližně $\frac{2\pi}{T}$, mimo tento interval je funkce v podstatě nulová. Za čas T tak může dojít s nezanedbatelnou pravděpodobností k přechodům pouze do této oblasti, tj.

$$|\omega_{fi}| = \frac{|E_f - E_i|}{\hbar} \equiv \frac{\Delta E}{\hbar} \leq \frac{2\pi}{T}.$$

Odsud plynou „relace neurčitosti mezi časem a energií“

$$\Delta E \leq \frac{h}{T},$$

které říkají, že za čas T jsme schopni určit energii s přesností maximálně $\frac{h}{T}$.



Obrázek 12.3: Funkce $I_T(\omega)$ (12.19) pro různé hodnoty T . Černá čerchovaná čára odpovídá $T = 2u$, červená čárkovaná čára $T = 3u$ a modrá čára $T = 4u$.

12.3.2 Harmonická porucha

Uvažujme nyní harmonickou poruchu

$$\hat{V}(t) = \hat{v}e^{-i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{i\omega t}, \quad (12.21)$$

kde $\omega > 0$. Její maticové elementy jsou

$$V_{fi}(t) = \langle \psi_f | \hat{v}e^{-i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{i\omega t} | \psi_i \rangle = v_{fi}e^{-i\omega t} + \bar{v}_{if}e^{i\omega t}.$$

Amplitudu přechodu za čas T v 1. řádu (12.16) postupně upravíme do tvaru

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(1)}(T, 0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt e^{i\omega_{fi}t} (v_{fi}e^{-i\omega t} + \bar{v}_{if}e^{i\omega t}) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt (v_{fi}e^{i\omega_-t} + \bar{v}_{if}e^{i\omega_+t}) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left(v_{fi}e^{i\frac{\omega_-T}{2}} A_T(\omega_-) + \bar{v}_{if}e^{i\frac{\omega_+T}{2}} A_T(\omega_+) \right), \end{aligned} \quad (12.22)$$

kde jsme označili $\omega_\pm = \omega_{fi} \pm \omega$ a $A_T(\omega)$ je funkce

$$A_T(\omega) = \frac{2}{\omega} \sin\left(\frac{\omega T}{2}\right), \quad A_T(\omega)^2 = I_T(\omega). \quad (12.23)$$

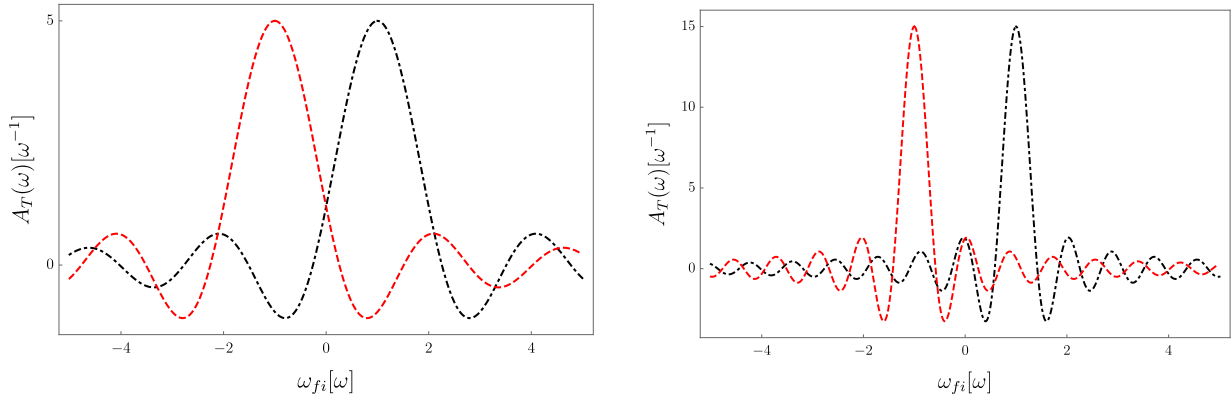
Pravděpodobnost přechodu je v 1. řádu rovna

$$W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T) = \frac{1}{\hbar^2} \left| v_{fi}e^{i\frac{\omega_-T}{2}} A_T(\omega_-) + \bar{v}_{if}e^{i\frac{\omega_+T}{2}} A_T(\omega_+) \right|^2,$$

roli tak hraje i interference příspěvků od $\hat{v}e^{-i\omega t}$ a $\hat{v}^\dagger e^{i\omega t}$. Ta je podstatná na krátké časové škále, pro velká T je možné ji zanedbat. Důvodem je, že $A_T(\omega)$ má dominantní maximum v nule hodnoty

$$A_T(0) = T,$$

pološířka píku klesá jako $\frac{\pi}{T}$. $A_T(\omega_\pm)$ tak mají hlavní píky v bodech $\omega_{fi} = \mp\omega$, které se s rostoucím časem zužují a přestávají překrývat. Průběh funkcí $A_T(\omega_\pm)$ v závislosti na ω_{fi} je znázorněn na obrázku 12.4 pro $T = \frac{5}{\omega}$ (vlevo) a $T = \frac{15}{\omega}$ (vpravo).



Obrázek 12.4: Funkce (12.23) pro různé časy - $T = \frac{5}{\omega}$ (vlevo) a $T = \frac{15}{\omega}$ (vpravo). $A_T(\omega_+)$ je červená čárkovaná čára, $A_T(\omega_-)$ černá čerchovaná čára. S rostoucím časem se dominantní píky zvětšují, zužují a oddělují.

Vlivem harmonické poruchy dochází dominantně ke dvěma procesům. Člen $\hat{v}^\dagger e^{i\omega t}$ přispívá zejména k přechodům s $E_f \simeq E_i - \hbar\omega$ (stimulovaná emise), člen $\hat{v}e^{-i\omega t}$ způsobuje přechody do $E_f \simeq E_i + \hbar\omega$ (stimulovaná absorpce). Šířka intervalů $(E_i \pm \hbar\omega - \frac{\Delta E}{2}, E_i \pm \hbar\omega + \frac{\Delta E}{2})$, kam může E_f s nezanedbatelnou pravděpodobností patřit, klesá s časem jako $\Delta E \sim \frac{\hbar}{T}$. Tyto intervaly se pro velká T nepřekrývají, takže ve výpočtu pravděpodobnosti stimulované emise můžeme amplitudu absorpce zanedbat a dostaneme podobný výsledek jako pro konstantní poruchu

$$W_{i \rightarrow f}^{emi}(T) = \frac{|v_{if}|^2}{\hbar^2} I_T(\omega_+) = \frac{|v_{if}|^2}{\hbar^2} I_T(\omega_{fi} + \omega). \quad (12.24)$$

Analogicky pro pravděpodobnost stimulované absorpce platí

$$W_{i \rightarrow f}^{abs}(T) = \frac{|v_{fi}|^2}{\hbar^2} I_T(\omega_-) = \frac{|v_{fi}|^2}{\hbar^2} I_T(\omega_{fi} - \omega). \quad (12.25)$$

12.3.3 Dlouhé působení poruchy, rychlosti přechodu

Uvažujme nyní působení poruchy po delší čas T . Z předchozí diskuze víme, že šířka intervalu, do kterého může energie finální stavu s nezanedbatelnou pravděpodobností patřit, klesá jako $1/T$. Pík funkce $I_T(\omega)$ v nule je stále užší a vyšší. Nicméně, zatímco pro krátké

časy roste $I_T(\omega)$ kvadraticky, pro dlouhé časy je nárůst lineární v T . Z limitního vyjádření δ -funkce ve tvaru

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(xt)}{\pi x^2 t} = \delta(x),$$

totiž pro funkci $I_T(\omega)$ dostaneme asymptotické chování

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{I_T(\omega)}{T} = 2\pi\delta(\omega). \quad (12.26)$$

Má pak smysl zavést rychlost přechodu (pravděpodobnost přechodu za jednotku času) vztahem

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T)}{T}. \quad (12.27)$$

Pro časově nezávislou poruchu z výsledku (12.18) a asymptotického chování (12.26) pro velká T plyne

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T)}{T} = \frac{2\pi|V_{fi}|^2}{\hbar} \delta(E_f - E_i),$$

kde δ -funkce představuje zákon zachování energie. Podobně pro harmonickou poruchu z (12.24) a (12.25) dostaneme

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f}^{emi} &= \frac{2\pi|v_{if}|^2}{\hbar} \delta(E_f - E_i + \hbar\omega), \\ \Gamma_{i \rightarrow f}^{abs} &= \frac{2\pi|v_{fi}|^2}{\hbar} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \end{aligned} \quad (12.28)$$

δ -funkce zde vyjadřuje to, že ke stimulované emisi nebo absorpci dochází pouze v rezonanci, kdy $E_f = E_i \pm \hbar\omega$.

12.4 Interakce atomu s klasickým elektromagnetickým polem

Ukážeme si nyní jako vzorový příklad chování jednoelektronového atomu interagujícího s klasickou monochromatickou elektromagnetickou vlnou. Uvažujme vektorový potenciál tvaru

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{A}_0(\vec{x})e^{-i\omega t} + \vec{A}_0^*(\vec{x})e^{i\omega t} = A_0\vec{\varepsilon} \left(e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right), \quad (12.29)$$

kde $\vec{\varepsilon}$ je jednotkový vektor. Určíme rychlosti stimulované absorpce a emise (12.28).

Volný hamiltonián elektronu v atomu má tvar

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2m_e} + V_0(\vec{x}).$$

Vlivem vnějšího elektromagnetického pole dostaneme hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\vec{P}} + e\vec{A} \right)^2 + V_0(\vec{x}) = \hat{H}_0 + \frac{e}{2m_e} \left(2\vec{A} \cdot \hat{\vec{P}} - i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \right) + \frac{e^2 A^2}{2m_e}.$$

Poslední člen zanedbáme a budeme pracovat v Coulombově kalibraci

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0.$$

Hamiltonián má pak tvar

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

kde interakční člen je roven

$$\begin{aligned} \hat{V}(t) &= \frac{e}{m_e} \vec{A}(t) \cdot \hat{\vec{P}} = \frac{e}{m_e} A_0 \left(e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right) \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{P}} \\ &\equiv \hat{v} e^{-i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{i\omega t}, \end{aligned} \quad (12.30)$$

kde jsme označili

$$\hat{v} = \frac{e}{m_e} A_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{P}}.$$

Interakce je tedy harmonická porucha a pro rychlosti stimulované emise a absorpce z (12.28) plyne

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f}^{emi} &= \frac{2\pi |v_{if}|^2}{\hbar} \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) = \frac{2\pi e^2}{m_e^2 \hbar} A_0^2 \left| \langle \psi_f | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{P}} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega), \\ \Gamma_{i \rightarrow f}^{abs} &= \frac{2\pi |v_{fi}|^2}{\hbar} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = \frac{2\pi e^2}{m_e^2 \hbar} A_0^2 \left| \langle \psi_f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{P}} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \end{aligned} \quad (12.31)$$

Pro porovnání s plně kvantovým výpočtem (který si ukážeme na konci semestru) upravíme ještě vektorový potenciál a vyjádříme A_0 pomocí středního počtu fotonů $\langle n \rangle$ a hustoty energie na jeden foton $\frac{\hbar\omega}{V}$ (celý systém bereme v konečném objemu V). Coulombova kalibrace pro vlnu (12.29) znamená

$$\vec{k} \cdot \vec{\varepsilon} = 0,$$

tj. $\vec{A}$ leží v rovině kolmé na směr šíření vlny $\vec{k}$. Vlna je řešením rovnice

$$\square \vec{A} = \left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \vec{A} = 0,$$

takže $k = \frac{\omega}{c}$. Hustota energie elektromagnetické vlny je

$$u = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_0 |\vec{E}|^2 + \frac{1}{\mu_0} |\vec{B}|^2 \right).$$

Určíme elektrickou intenzitu a magnetickou indukci

$$\begin{aligned}\vec{E} &= -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = i\omega A_0 \vec{\varepsilon} \left(e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} - e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right) = -2\omega A_0 \vec{\varepsilon} \sin(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t), \\ \vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A} = i(\vec{k} \times \vec{\varepsilon}) A_0 \left(e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} - e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right) = \frac{1}{c} \frac{\vec{k}}{k} \times \vec{E}.\end{aligned}$$

Hustota energie je potom (platí $\frac{1}{\mu_0} = \varepsilon_0 c^2$)

$$u = 4\varepsilon_0 A_0^2 \omega^2 \sin^2(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t).$$

Vystředováním za dlouhý čas T dostaneme

$$\langle u \rangle = 2\varepsilon_0 A_0^2 \omega^2 \equiv \frac{\hbar \omega}{V} \langle n \rangle.$$

A_0 lze tedy vyjádřit jako

$$A_0 = \sqrt{\frac{\langle n \rangle \hbar}{2V\varepsilon_0 \omega}}.$$

Dosazením do rychlosti stimulované emise a absorpce (12.31) nalezneme

$$\begin{aligned}\Gamma_{i \rightarrow f}^{emi} &= \frac{\pi e^2}{m_e^2 V \varepsilon_0 \omega} \langle n \rangle \left| \langle \psi_f | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{P}} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar \omega), \\ \Gamma_{i \rightarrow f}^{abs} &= \frac{\pi e^2}{m_e^2 V \varepsilon_0 \omega} \langle n \rangle \left| \langle \psi_f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{P}} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar \omega).\end{aligned}$$

Obě jsou úměrné střednímu počtu fotonů v poli. Pokud je klasického pole nulové, tj. $\langle n \rangle = 0$ a $\vec{A} = 0$, pak $\hat{H}_0$ je celkový hamiltonián, $|\psi_i\rangle$ a $|\psi_f\rangle$ jsou stacionární stavy a k žádným přechodům nedochází. Z klasického pohledu je absence pole shodná s absencí interakce. V reálných situacích ale dochází k tzv. spontánní emisi, kdy elektron z excitované hladiny za typicky velmi krátký čas přeskočí na nižší hladinu i bez přítomnosti vnějšího pole. Semiklasická teorie interakce látky a záření (atom je kvantový, elektromagnetické pole klasické) spontánní emisi vysvětlit nedokáže. Jak uvidíme, spontánní emise je důsledek kvantování elektromagnetického pole. Kvantované elektromagnetické pole má základní (vakuový) stav, ve kterém nejsou žádné fotony, ten ale neodpovídá absenci pole jako v klasickém případě. I když je kvantové pole ve vakuovém stavu, stále interaguje s atomem, a proto může dojít ke spontánní emisi.

12.5 Přechody do kontinua, Fermiho zlaté pravidlo

Zaměřme se nyní na přechod do stavu s finální energií E_f , která buď leží ve spojitém spektru volného hamiltoniánu $\hat{H}_0$, nebo v jejím blízkém okolí leží řada dalších diskrétních

hladin, které od sebe neumíme odlišit. V takovém případě nemá smysl hledat pravděpodobnost přechodu do přesného finálního stavu. Můžeme ale zkoumat pravděpodobnost přechodu $W_{i \rightarrow f}(T)$ do malého okolí E_f

$$\mathcal{I}(E_f) = \left(E_f - \frac{\Delta E}{2}, E_f + \frac{\Delta E}{2} \right), \quad \frac{\Delta E}{E_f} \ll 1,$$

za dlouhý čas T .

Pracujme nejprve neporuchově, stav částice po čase T je $|\psi_i(T)\rangle$. Označíme (zobecněné) vlastní vektory volného hamiltoniánu jako $|\alpha\rangle$

$$\hat{H}_0|\alpha\rangle = E(\alpha)|\alpha\rangle,$$

kde α souhrnně označuje všechna spojitá i diskrétní kvantová čísla popisující stav. Pravděpodobnost nalezení částice v nějakém malém okolí $\mathcal{I}(\alpha_f)$ v čase T je

$$W_{i \rightarrow f}(T) = \int_{\mathcal{I}(\alpha_f)} d\alpha |\langle \alpha | \psi_i(T) \rangle|^2.$$

Zajímá nás energie finálního stavu, a proto přejdeme od α k E a β , kde β zahrnuje všechna další kvantová čísla nutná k popisu stavu. Integrál pak můžeme přepsat do tvaru

$$W_{i \rightarrow f}(T) = \int_{\mathcal{I}(E_f)} \rho(E) dE \int_{\mathcal{I}(\beta_f)} d\beta |\langle \beta, E | \psi_i(T) \rangle|^2, \quad (12.32)$$

kde $\rho(E)$ je hustota kvantových stavů s energií E . Například pro volnou částici hraje roli α hybnost $\vec{p}$. Přechodem do sférických souřadnic dostaneme

$$d^3p = p^2 dp d\Omega = \rho(E) dE d\Omega.$$

Pro nerelativistickou částici, kdy $E(p) = \frac{p^2}{2M}$, je hustota stavů rovna

$$\rho(E) = p^2 \frac{dp}{dE} = 2ME \frac{d\sqrt{2ME}}{dE} = M\sqrt{2ME}.$$

V dalším budeme uvažovat infinitezimální interval $\mathcal{I}(\beta_f)$ a omezíme se na 1. řád poruchového rozvoje, tj. skalární součin v (12.32) nahradíme pomocí (12.17) a zapíšeme ve zkratce

$$\int_{\mathcal{I}(\beta_f)} d\beta |\langle \beta, E | \psi_i(T) \rangle|^2 = W_{i \rightarrow (\beta_f, E)}^{(1)}(T) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^T dt e^{i\omega_{Ei}t} V_{(\beta_f, E)i}(t) \right|^2,$$

kde $\omega_{Ei} = \frac{E-E_i}{\hbar}$ a $V_{(\beta_f, E)i}(t) = \langle \beta_f, E | \hat{V}(t) | \psi_i \rangle$.

12.5.1 Konstantní porucha

Pro konstantní poruchu v 1. řádu s použitím (12.18) dostaneme

$$W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\mathcal{I}(E_f)} |V_{(\beta_f, E)i}|^2 \rho(E) I_T \left(\frac{E - E_i}{\hbar} \right) dE.$$

Pro velká T pak s využitím (12.26) pro rychlost přechodu platí

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\mathcal{I}(E_f)} |V_{(\beta_f, E)i}|^2 \rho(E) 2\pi \hbar \delta(E - E_i) dE = \frac{2\pi |V_{fi}|^2}{\hbar} \rho(E_f = E_i), \quad (12.33)$$

kde jsme ve zkratce označili $V_{fi} = V_{(\beta_f, E_f)i}$. Vztah (12.33) se nazývá Fermiho zlaté pravidlo. Říká, že pro časově nezávislou poruchu je rychlost přechodu v 1. řádu poruchové teorie konstantní pro dostatečně dlouhý časový interval T .

12.5.2 Harmonická porucha

Fermiho zlaté pravidlo platí analogicky i pro harmonickou poruchu. Víme, že v případě diskrétních přechodů pro dlouhé časy platí pro pravděpodobnosti stimulované emise a absorpce vztahy (12.24) a (12.25). Pro přechod do malého intervalu okolo E_f pak platí

$$\begin{aligned} W_{i \rightarrow f}^{emi}(T) &= \frac{1}{\hbar^2} \int_{\mathcal{I}(E_f)} |v_{(\beta_f, E)i}|^2 \rho(E) I_T \left(\frac{E - E_i + \hbar\omega}{\hbar} \right) dE, \\ W_{i \rightarrow f}^{abs}(T) &= \frac{1}{\hbar^2} \int_{\mathcal{I}(E_f)} |v_{i(\beta_f, E)}|^2 \rho(E) I_T \left(\frac{E - E_i - \hbar\omega}{\hbar} \right) dE. \end{aligned}$$

Pro velká T pak obdobným způsobem jako v případě časově nezávislé poruchy dostaneme konstantní rychlosti emise a absorpce

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f}^{emi} &= \frac{2\pi |v_{if}|^2}{\hbar} \rho(E_f = E_i - \hbar\omega), \\ \Gamma_{i \rightarrow f}^{abs} &= \frac{2\pi |v_{fi}|^2}{\hbar} \rho(E_f = E_i + \hbar\omega). \end{aligned}$$

Pro harmonickou poruchu tvaru (12.21) platí tzv. princip detailní rovnováhy

$$\frac{\Gamma_{i \rightarrow f}^{emi}}{\rho(E_f)} = \frac{\Gamma_{f \rightarrow i}^{abs}}{\rho(E_i)}.$$

12.6 Příklady

Cvičení 40. Uvažujte lineární harmonický oscilátor s nábojem q v prvním excitovaném stavu $|1\rangle$. V čase $t_0 = 0$ zapneme homogenní elektrické pole

$$E(t) = V_0 e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad \tau > 0, \quad V_0 \ll 1.$$

Určete, do jakých stavů volného hamiltoniánu může oscilátor vlivem poruchy přejít v 1. řádu poruchového rozvoje, a určete pravděpodobnost přechodu v limitě $T \rightarrow \infty$.

Návod: Hamiltonián LHO má vlastní vektory $|n\rangle$ a vlastní čísla

$$\hat{H}_0|n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle.$$

Operátor poruchy je

$$\hat{V}(t) = -q\hat{X}E(t).$$

Amplituda přechodu ze stavu $|1\rangle$ do stavu $|n\rangle$ za čas T v 1. řádu je podle (12.16) rovna

$$S_{n1}^{(1)}(T, 0) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt e^{i\omega_{n1}t} V_{n1}(t).$$

Maticové elementy operátoru poruchy

$$V_{n1}(t) = -qV_0 e^{-\frac{t}{\tau}} \langle n|\hat{X}|1\rangle,$$

jsou nenulové jen pro $n = 0$ nebo $n = 2$. Pro tuto poruchu je tedy možný pouze přeskok o jednu hladinu nahoru nebo dolů. S použitím posunovacích operátorů

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger),$$

nalezneme

$$\langle 0|\hat{X}|1\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}, \quad \langle 2|\hat{X}|1\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}.$$

Pravděpodobnost přechodu na základní hladinu je potom

$$W_{1\rightarrow 0}^{(1)} = \left| S_{n1}^{(1)}(\infty, 0) \right|^2 = \frac{q^2 V_0^2}{\hbar^2} \frac{\hbar}{2M\omega} \left| \int_0^\infty dt e^{-\frac{t}{\tau}} e^{-i\omega t} \right|^2 = \frac{q^2 V_0^2}{2M\hbar\omega} \frac{1}{\omega^2 + 1/\tau^2}.$$

Pravděpodobnost přechodu na 2. excitovanou hladinu je dvojnásobná

$$W_{1\rightarrow 2}^{(1)} = \frac{q^2 V_0^2}{M\hbar\omega} \frac{1}{\omega^2 + 1/\tau^2} = 2W_{1\rightarrow 0}^{(1)}$$

Cvičení 41. Izotropní harmonický oscilátor s hmotností $M = \frac{\hbar}{\omega}$ je v čase $T_0 \rightarrow -\infty$ ve stavu $|\psi_i\rangle = |n, l, m\rangle = |1, 0, 0\rangle$. Určete, do kterých stavů $|\psi_f\rangle = |1, 1, m\rangle$ může přejít v 1. řádu nestacionární poruchové teorie vlivem poruchy

$$\hat{V}(t) = V_0 \hat{X}_3 \frac{1}{2\sqrt{\pi\eta}} e^{-\frac{t^2}{4\eta}}, \eta > 0.$$

Spočítejte příslušné pravděpodobnosti přechodu v limitě $T \rightarrow \infty$.

Návod: V 1. řádu NPT jsou pravděpodobnosti přechodu dány vztahem

$$W_{(1,0,0) \rightarrow (1,1,m)}^{(1)} = \frac{V_0^2}{\hbar^2} \left| \langle 1, 1, m | \hat{X}_3 | 1, 0, 0 \rangle \right|^2 \left| \frac{1}{2\sqrt{\pi\eta}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{t^2}{4\eta}} e^{i\omega t} dt \right|^2$$

Vlnové funkce vlastních stavů volného hamiltoniánu mají tvar

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \langle r, \theta, \varphi | n, l, m \rangle = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi).$$

Maticový element rozdělíme na radiální a úhlovou část ($x_3 = r \cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1,0}$)

$$\langle 1, 1, m | \hat{X}_3 | 1, 0, 0 \rangle = \langle 1, 1 | r | 1, 0 \rangle \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \langle 1, m | Y_{1,0} | 0, 0 \rangle.$$

Úhlovou část můžeme spočítat buď vztahem pro integrál součinu tří kulových funkcí

$$\langle 1, m | Y_{1,0} | 0, 0 \rangle = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \underbrace{(1, 0, 0, 0 | 1, 0)}_1 \underbrace{(1, 0, 0, 0 | 1, m)}_{\delta_{m,0}} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \delta_{m,0},$$

nebo přímým výpočtem (využijeme toho, že $Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ je konstantní)

$$\langle 1, m | Y_{1,0} | 0, 0 \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \overline{Y_{1,m}}(\theta, \varphi) Y_{1,0}(\theta, \varphi) Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (Y_{1,m}, Y_{1,0}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \delta_{m,0}.$$

Je tedy nenulový jen pro $m = 0$. K vyčíslení radiální části maticového elementu

$$\langle 1, 1 | r | 1, 0 \rangle = \int_0^\infty r^2 dr R_{1,1}(r) r R_{1,0}(r),$$

potřebujeme radiální část vlnové funkce izotropního oscilátoru. Obecně mají tvar ($L_n^\beta(z)$ jsou zobecněné Lagguerovy polynomy)

$$R_{n,l}(\xi) = K_{nl} \xi^l e^{-\frac{\xi^2}{2}} L_n^{l+\frac{1}{2}}(\xi^2), \quad \xi = r \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}, \quad K_{nl} = \frac{2}{\pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \left(\frac{2^{n+l} n!}{(2n+2l+1)!!} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

V našem případě platí $\xi = r$ a relevantní radiální funkce jsou

$$R_{1,0}(r) = \frac{2}{\pi^{\frac{1}{4}}} \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{3}{2} - r^2 \right) e^{-\frac{r^2}{2}}, \quad R_{1,1}(r) = \frac{4}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{15}} \left(\frac{5}{2} - r^2 \right) r e^{-\frac{r^2}{2}}.$$

S využitím vztahu

$$\int_0^\infty r^{2n} e^{-\alpha r^2} dr = (-1)^n \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{d^n}{d\alpha^n} \alpha^{-\frac{1}{2}}$$

pro radiální maticový element nalezneme

$$\begin{aligned} \langle 1, 1 | r | 1, 0 \rangle &= \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{5\pi}} \int_0^\infty r^4 (15 - 16r^2 + 4r^4) e^{-r^2} dr \\ &= \frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{5}} \left(15 \left. \frac{d^2}{d\alpha^2} \alpha^{-\frac{1}{2}} \right|_{\alpha=1} + 16 \left. \frac{d^3}{d\alpha^3} \alpha^{-\frac{1}{2}} \right|_{\alpha=1} + 4 \left. \frac{d^4}{d\alpha^4} \alpha^{-\frac{1}{2}} \right|_{\alpha=1} \right) \\ &= \frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{5}} \left(15 \frac{1 \cdot 3}{4} - 16 \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{8} + 4 \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7}{16} \right) = \sqrt{\frac{5}{2}}. \end{aligned}$$

Zbývá určit časový integrál

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi\eta}} \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{t^2}{4\eta} + i\omega t} dt = e^{-\eta\omega^2}.$$

Celkem pro pravděpodobnost přechodu do stavu s $m = 0$ v 1. řádu NPT dostaneme

$$W_{(1,0,0) \rightarrow (1,1,0)}^{(1)} = \frac{5V_0^2}{6\hbar^2} e^{-2\eta\omega^2},$$

přechody do stavů s $m = \pm 1$ jsou zakázané.

Kapitola 13

Propagátor a dráhový integrál

13.1 Propagátor

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

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

Jedná se tedy o maticový element evolučního operátoru v x -reprezentaci

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \langle \vec{x}_f | \hat{U}(t_f, t_0) | \vec{x}_0 \rangle. \quad (13.1)$$

Propagátor je řešením Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \hat{H} K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0),$$

s počáteční podmínkou

$$K(\vec{x}_f, t_0; \vec{x}_0, t_0) = \delta(\vec{x}_f - \vec{x}_0). \quad (13.2)$$

Vzhledem k tomu, že časový vývoj zachovává normu, splňuje propagátor podmínku

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \overline{K(\vec{x}, t_f; \vec{x}_0, t_0)} K(\vec{x}, t_f; \vec{x}'_0, t_0) = \delta(\vec{x}_0 - \vec{x}'_0). \quad (13.3)$$

Propagátor můžeme vyjádřit i v p -reprezentaci

$$\tilde{K}(\vec{p}_f, t_f; \vec{p}_0, t_0) = \langle \vec{p}_f | \hat{U}(t_f, t_0) | \vec{p}_0 \rangle.$$

Propagátor v x -reprezentaci K je s $\tilde{K}$ spojený vztahem

$$\begin{aligned} K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) &= \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}_0 \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \int_{\mathbb{R}^3} d^3p_0 \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{p}_0 \rangle \langle \vec{p}_0 | \vec{x}_0 \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \int_{\mathbb{R}^3} d^3p_0 e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \tilde{K}(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_0 \cdot \vec{x}_0}. \end{aligned} \quad (13.4)$$

Určíme propagátor volné kvantové částice v $\mathbb{R}^3$ $K_0(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0)$. Začneme v p -reprezentaci, kde je $\tilde{K}_0$ určeno rovnicí

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{K}_0(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0) = \frac{p^2}{2M} \tilde{K}_0(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0), \quad (13.5)$$

s počáteční podmínkou

$$\tilde{K}_0(\vec{p}, t_0; \vec{p}_0, t_0) = \delta(\vec{p} - \vec{p}_0).$$

Řešením rovnice (13.5) je

$$\tilde{K}_0(\vec{p}, t; \vec{p}_0, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2M} (t-t_0)} \delta(\vec{p} - \vec{p}_0).$$

V x -reprezentaci pak s použitím (13.4) vyjádříme propagátor pomocí integrálu

$$K_0(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \, e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2M} (t-t_0)}.$$

Integrál na pravé straně diverguje, situaci je možné zachránit regularizací $1/M \rightarrow 1/M - i\varepsilon$ a na konci provést limitu $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} K_0(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \, e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2M} (t-t_0)} e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \frac{p^2}{2} (t-t_0)} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \, e^{-\frac{(\varepsilon + \frac{i}{M})(t-t_0)}{2\hbar} \left(\vec{p} - i \frac{\vec{x} - \vec{x}_0}{(\varepsilon + \frac{i}{M})(t-t_0)} \right)^2} e^{-\frac{(\vec{x} - \vec{x}_0)^2}{2\hbar(\varepsilon + \frac{i}{M})(t-t_0)}} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{2\pi\hbar}{(\varepsilon + \frac{i}{M})(t-t_0)} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(\vec{x} - \vec{x}_0)^2}{2\hbar(\varepsilon + \frac{i}{M})(t-t_0)}} \\ &= \left(\frac{M}{2\pi i \hbar (t-t_0)} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(\frac{iM(\vec{x} - \vec{x}_0)^2}{2\hbar(t-t_0)} \right). \end{aligned} \quad (13.6)$$

13.2 Dráhový integrál

Rozdělíme časový interval $\langle t_0, t_f \rangle$ na dva úseky $\langle t_0, t_1 \rangle$ a $\langle t_1, t_f \rangle$ a použijeme definici propagátoru dvakrát pro výpočet $\psi(\vec{x}_f, t_f)$ z $\psi(\vec{x}_0, t_0)$ přes mezistavy $\psi(\vec{x}_1, t_1)$

$$\psi(\vec{x}_f, t_f) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_0 \, K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_1, t_1) K(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0) \psi(\vec{x}_0, t_0),$$

což nám dává identitu pro propagátor

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \, K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_1, t_1) K(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0). \quad (13.7)$$

Na přechod z $(\vec{x}_0, t_0)$ do $(\vec{x}_f, t_f)$ můžeme nahlížet jako na přechod skrz všechny možné mezibody $(\vec{x}_1, t_1)$.

Stejným způsobem můžeme zjemnit rozdělení časového úseku $\langle t_0, t_f \rangle$ na více intervalů s mezcasy $t_1, \dots, t_N$. Uvažujme dělení na intervaly stejné délky Δt , kde

$$\Delta t = \frac{t_f - t_0}{N + 1}, \quad N \in \mathbb{N}.$$

Propagátor zapíšeme jako maticový element evolučního operátoru (13.1), využijeme grupovou vlastnost evolučního operátoru (10.4), rozklad jednotky pomocí zobecněných vlastních vektorů polohy (7.1) vložíme mezi každou dvojici evolučních operátorů, a nalezneme

$$\begin{aligned} K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) &= \langle \vec{x}_f | \hat{U}(t_f, t_0) | \vec{x}_0 \rangle = \langle \vec{x}_f | \hat{U}(t_f, t_N) \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \dots \hat{U}(t_1, t_0) | \vec{x}_0 \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_N \langle \vec{x}_f | \hat{U}(t_f, t_N) | \vec{x}_N \rangle \dots \langle \vec{x}_1 | \hat{U}(t_1, t_0) | \vec{x}_0 \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_N \prod_{k=1}^{N+1} \langle \vec{x}_k | \hat{U}(t_k, t_{k-1}) | \vec{x}_{k-1} \rangle. \end{aligned} \quad (13.8)$$

Zde jsme označili $t_{N+1} = t_f$ a $\vec{x}_{N+1} = \vec{x}_f$. Pro malá Δt můžeme aproximovat evoluční operátor vztahem

$$\hat{U}(t_k, t_{k-1}) \approx \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(t_k), \quad (13.9)$$

kde Hamiltonián předpokládáme ve tvaru

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \hat{V}(\vec{x}, t).$$

Do 1. řádu v Δt pak dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_k, t_{k-1}) &\approx \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{\hat{P}^2}{2M} - \frac{i}{\hbar} \Delta t V(\vec{x}, t_k) \approx \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{V}(\vec{x}, t_k) \right) \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{\hat{P}^2}{2M} \right) \\ &\approx \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{V}(\vec{x}, t_k) \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{\hat{P}^2}{2M} \right). \end{aligned} \quad (13.10)$$

Tento přepis obložíme vektory $\langle \vec{x}_k |$ a $|\vec{x}_{k-1} \rangle$ a použijeme výsledek (13.6) pro propagátor volné částice

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_k | \hat{U}(t_k, t_{k-1}) | \vec{x}_{k-1} \rangle &\approx \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t V(\vec{x}_k, t_k) \right) \langle \vec{x}_k | \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{\hat{P}^2}{2M} \right) | \vec{x}_{k-1} \rangle \\ &= \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t V(\vec{x}_k, t_k) \right) \left(\frac{M}{2\pi i \hbar (t_k - t_{k-1})} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(\frac{iM(\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})^2}{2\hbar(t_k - t_{k-1})} \right) \\ &= \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(\frac{iM}{2\hbar} \Delta t \left(\frac{\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}}{t_k - t_{k-1}} \right)^2 - \frac{i}{\hbar} \Delta t V(\vec{x}_k, t_k) \right) \end{aligned} \quad (13.11)$$

Všimněme si výrazu v exponenciále, ve kterém již vystupují samé klasické proměnné (žádné operátory). Po vytknutí společných faktorů $\frac{i}{\hbar}\Delta t$ nalezneme hodnotu (klasického) lagrangiánu s formálně dosazenou rychlostí

$$L\left(\vec{x}_k, \frac{\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}}{t_k - t_{k-1}}, t_k\right) = \frac{1}{2}M\left(\frac{\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}}{t_k - t_{k-1}}\right)^2 - V(\vec{x}_k, t_k). \quad (13.12)$$

Dosazením (13.11) do (13.8) a uvažováním limity $N \rightarrow +\infty$ tedy dospíváme k výsledku

$$\begin{aligned} K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_N \prod_{k=1}^{N+1} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} L(\vec{x}_k, \frac{\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1}}{\Delta t}, t_k) \Delta t} \\ &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{3(N+1)}{2}} \int \left(\prod_{k=1}^N d^3x_k \right) e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} L(\vec{x}_j, \frac{\vec{x}_j - \vec{x}_{j-1}}{\Delta t}, t_j) \Delta t}, \end{aligned} \quad (13.13)$$

což je definiční vztah dráhového integrálu. Pro zjednodušení zápisu se symbolicky zavádí „míra“ na prostoru všech trajektorií spojujících $\vec{x}_0$ s $\vec{x}_f$ v odpovídajících pevných časech t_0 a t_f

$$\mathcal{D}\vec{x}(t) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{k=1}^N d^3x_k \right) \left(\frac{M(N+1)}{2\pi i \hbar (t_f - t_i)} \right)^{\frac{3(N+1)}{2}} \quad (13.14)$$

a vztah (13.13) se zapisuje ve tvaru

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \int \mathcal{D}\vec{x}(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) dt \right) = \int \mathcal{D}\vec{x}(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(t)]}, \quad (13.15)$$

kde v exponentu v integrandu rozpoznáváme (klasickou) akci. Tento integrál se interpretuje jako integrál přes všechny dráhy $\vec{x}(t)$ spojující počáteční a koncový bod v odpovídajících časech, tj. $\vec{x}(t_0) = \vec{x}_0$ a $\vec{x}(t_f) = \vec{x}_f$. Zapišeme trajektorii ve tvaru

$$\vec{x}(t) = \vec{x}_{cl}(t) + \vec{y}(t),$$

kde $\vec{x}_{cl}(t)$ je řešení pohybových rovnic pro Lagrangián L s příslušnými počátečními podmínkami, a $\vec{y}(t)$ splňuje podmínku pevných konců

$$\vec{y}(t_0) = \vec{y}(t_f) = 0.$$

V tzv. semiklasické aproximaci rozvíjíme akci ve fluktuacích $\vec{y}(t)$ kolem klasické trajektorie $\vec{x}_{cl}(t)$:

$$\begin{aligned} S[\vec{x}_{cl}(t) + \vec{y}(t)] &= \int_{t_0}^{t_f} dt \left(\frac{M}{2} (\dot{\vec{x}}_{cl} + \dot{\vec{y}})^2 - V(\vec{x}_{cl} + \vec{y}) \right) \\ &= \int_{t_0}^{t_f} dt \left(\frac{M}{2} \dot{\vec{x}}_{cl}^2 + M \dot{\vec{x}}_{cl} \cdot \dot{\vec{y}} + \frac{M}{2} \dot{\vec{y}}^2 - V(\vec{x}_{cl}) - y_i \frac{\partial V}{\partial x_i}(\vec{x}_{cl}) - \frac{y_i y_j}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j}(\vec{x}_{cl}) + \dots \right). \end{aligned}$$

Z podmínky pevných konců plyne

$$\int_{t_0}^{t_f} dt \left(M \dot{\vec{x}}_{cl} \cdot \dot{\vec{y}} - y_i \frac{\partial V}{\partial x_i}(\vec{x}_{cl}) \right) = \int_{t_0}^{t_f} dt \left(-M \ddot{\vec{x}}_{cl} - \vec{\nabla} V(\vec{x}_{cl}) \right) \cdot \vec{y} = 0,$$

kde jsme využili toho, že $\vec{x}_{cl}$ je řešením pohybových rovnic. Do druhého řádu v $\vec{y}$ tedy dostáváme

$$S[\vec{x}_{cl}(t) + \vec{y}(t)] \approx S[\vec{x}_{cl}(t)] + \tilde{S}[\vec{y}(t)], \quad \text{kde} \quad \tilde{S}[\vec{y}(t)] = \int_{t_0}^{t_f} dt \left(\frac{M}{2} \dot{\vec{y}}^2 - \frac{y_i y_j}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j}(\vec{x}_{cl}(t)) \right),$$

a pro propagátor v semiklasické aproximaci pak platí

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) \approx e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}_{cl}(t)]} \int_{\substack{\vec{y}(t_0)=\vec{0} \\ \vec{y}(t_f)=\vec{0}}} \mathcal{D}\vec{y}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{S}[\vec{y}(t)]}, \quad (13.16)$$

K jeho určení je zapotřebí najít klasickou trajektorii spojující body $\vec{x}_0$ a $\vec{x}_f$ a vypočítat dráhový integrál s kvadratickou akcí $\tilde{S}[\vec{y}(t)]$ (tzv. flukтуаční faktor). Ten už nezávisí na $\vec{x}_0$ ani $\vec{x}_f$ a je tedy pouze funkce času $F(t_f, t_0)$. V případě, kdy potenciál $V(\vec{x})$ je kvadratickou funkcí souřadnic, je funkcionál $\tilde{S}$ totožný s akcí S a semiklasická aproximace (13.16) dává přesný výsledek.

13.3 Matice hustoty termálního stavu

Propagátor lze využít mimo jiné pro určení matice hustoty termálního stavu

$$\hat{\rho}_{th} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}},$$

v x -reprezentaci. Pro časově nezávislý hamiltonián je evoluční operátor, a tedy i propagátor, funkcí rozdílu $t_f - t_0$, tj.

$$K(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) \equiv K(\vec{x}_f, \vec{x}_0; t_f - t_0).$$

Matici hustoty termálního stavu v x -reprezentaci pak můžeme vyjádřit jako propagátor v imaginárním čase

$$\rho_{th}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \langle \vec{x}_2 | \hat{\rho}_{th} | \vec{x}_1 \rangle = \frac{1}{Z} \langle \vec{x}_2 | e^{-\beta \hat{H}} | \vec{x}_1 \rangle = \frac{1}{Z} K(\vec{x}_2, \vec{x}_1; -i\hbar\beta). \quad (13.17)$$

Partiční sumu určíme integrálem

$$Z = \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, K(\vec{x}, \vec{x}; -i\hbar\beta). \quad (13.18)$$

13.4 Příklady

Cvičení 42. S použitím propagátoru (13.6) určete časový vývoj vlnové funkce volné částice, která má v čase t_0 tvar

$$\psi(\vec{x}, t_0) = C e^{-\frac{(\vec{x}-\vec{y})^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}.$$

Návod: Vlnová funkce v čase t je určena integrálem

$$\psi(\vec{x}, t) = C \left(\frac{M}{2\pi i \hbar (t - t_0)} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_0 e^{\frac{iM(\vec{x}-\vec{x}_0)^2}{2\hbar(t-t_0)}} e^{-\frac{(\vec{x}_0-\vec{y})^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_0}. \quad (13.19)$$

To je gaussův integrál, exponent stačí upravit na čtverec

$$iM \frac{(\vec{x} - \vec{x}_0)^2}{2\hbar(t - t_0)} - \frac{(\vec{x}_0 - \vec{y})^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_0 = \alpha (\vec{x}_0 - \frac{1}{2\alpha} \vec{a})^2 + iM \frac{x^2}{2\hbar(t - t_0)} - \frac{y^2}{4\sigma^2} + \frac{1}{4\alpha} a^2,$$

kde jsme zavedli

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{4\sigma^2} - i \frac{M}{2\hbar(t - t_0)}, \\ \vec{a} &= \frac{i}{\hbar} \vec{p} + \frac{1}{2\sigma^2} \vec{y} - i \frac{M}{\hbar(t - t_0)} \vec{x}. \end{aligned}$$

Integrál (13.19) je pak roven

$$\psi(\vec{x}, t) = C \left(\frac{M}{2\pi i \hbar (t - t_0)} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{3}{2}} e^{iM \frac{x^2}{2\hbar(t-t_0)} - \frac{y^2}{4\sigma^2} + \frac{1}{4\alpha} a^2}. \quad (13.20)$$

Označíme si

$$\chi(t) = 1 + \frac{i\hbar}{2\sigma^2 M} (t - t_0).$$

Koeficient před exponenciálou v (13.20) pak lze zjednodušit do tvaru

$$C \left(\frac{M}{2\pi i \hbar (t - t_0)} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{3}{2}} = C \chi^{-\frac{3}{2}}.$$

Do exponentu v (13.20) dosadíme za $\vec{a}$ a opět upravíme na čtverec

$$iM \frac{x^2}{2\hbar(t - t_0)} - \frac{y^2}{4\sigma^2} + \frac{1}{4\alpha} a^2 = -\frac{1}{4\sigma^2 \chi(t)} \left(\vec{x} - \vec{y} - \frac{2i\sigma^2}{\hbar} \vec{p} \right)^2 + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{y} - \frac{\sigma^2}{\hbar^2} p^2$$

Celkem má tedy vlnová funkce v čase t tvar

$$\psi(\vec{x}, t) = C \chi^{-\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{1}{4\sigma^2 \chi(t)} \left(\vec{x} - \vec{y} - \frac{2i\sigma^2}{\hbar} \vec{p} \right)^2 + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{y} - \frac{\sigma^2}{\hbar^2} p^2 \right].$$

Cvičení 43. Ukažte, že pro $\text{Re}\lambda > 0$ platí vztah

$$\int_{\mathbb{R}^N} e^{-\lambda \sum_{k=1}^{N+1} (x_k - x_{k-1})^2} dx_1 \dots dx_N = \sqrt{\frac{\pi^N}{(N+1)\lambda^N}} e^{-\frac{\lambda}{N+1} (x_{N+1} - x_0)^2}.$$

Návod: Důkaz provedeme indukcí. Pro $N = 1$ vztah ověříme přímým výpočtem

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-\lambda(x_1 - x_0)^2 - \lambda(x_2 - x_1)^2} = e^{-\lambda(x_0^2 + x_2^2)} \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} e^{\frac{\lambda}{2}(x_0 + x_2)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} e^{-\frac{\lambda}{2}(x_2 - x_0)^2}.$$

Indukční krok provedeme od $N - 1$ k N :

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-\lambda \sum_{k=1}^{N+1} (x_k - x_{k-1})^2} dx_1 \dots dx_N &\stackrel{\text{IP}}{=} \int_{\mathbb{R}} \sqrt{\frac{\pi^{N-1}}{N\lambda^{N-1}}} e^{-\frac{\lambda}{N}(x_N - x_0)^2 - \lambda(x_{N+1} - x_N)^2} dx_N \\ &= \sqrt{\frac{\pi^{N-1}}{N\lambda^{N-1}}} e^{-\frac{\lambda}{N}x_0^2 - \lambda x_{N+1}^2} \sqrt{\frac{\pi N}{\lambda(N+1)}} e^{\frac{\lambda(x_0 + N x_{N+1})^2}{N(N+1)}} \\ &= \sqrt{\frac{\pi^N}{(N+1)\lambda^N}} e^{-\frac{\lambda}{N+1}(x_{N+1} - x_0)^2}. \end{aligned}$$

Analogicky bude platit vztah

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} e^{-\lambda \sum_{k=1}^{N+1} (\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})^2} d^3x_1 \dots d^3x_N = \left(\frac{\pi^N}{(N+1)\lambda^N} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\lambda}{N+1} (\vec{x}_{N+1} - \vec{x}_0)^2}. \quad (13.21)$$

Cvičení 44. Určete propagátor volné částice v $\mathbb{R}^3$ pomocí definičního vztahu pro dráhový integrál (13.13).

Návod: Pro volnou částici má vztah (13.15) tvar

$$K_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \int \prod_{k=1}^N d^3x_k e^{\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2\Delta t} \sum_{k=1}^{N+1} (\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})^2}.$$

Integrály divergují, musíme použít regularizaci $M \rightarrow M + i\varepsilon$. Poté lze použít vzorec (13.21) s $\lambda = \frac{\varepsilon - iM}{2\hbar\Delta t}$ a provést limitu $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} K_0(\vec{x}_f, t_f; \vec{x}_0, t_0) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \left(\frac{(2\pi i \hbar \Delta t)^N}{(N+1)M^N} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2\Delta t(N+1)} (\vec{x}_{N+1} - \vec{x}_0)^2} \\ &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \Delta t(N+1)} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2\Delta t(N+1)} (\vec{x}_{N+1} - \vec{x}_0)^2}. \end{aligned}$$

Na závěr využijeme toho, že

$$\vec{x}_{N+1} = \vec{x}_f, \quad \Delta t(N+1) = t_f - t_0,$$

čímž se zbavíme N a dostaneme výsledek

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

Cvičení 45. Určete propagátor volné částice na přímce pomocí vztahu (13.16).

Návod: Pro volnou částici lze díky vztahu (13.16) propagátor zapsat ve tvaru

$$K_0(x_f, t_f; x_0, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}(t)]} F(t_f, t_0).$$

Nejprve určíme akci podél klasické trajektorie. Volná částice se pohybuje konstantní rychlostí, takže

$$x_{cl}(t) = x_0 + \frac{x_f - x_0}{t_f - t_0} (t - t_0).$$

Akce podél klasické trajektorie je tedy rovna

$$S[x_{cl}(t)] = \int_{t_0}^{t_f} \frac{1}{2} M \dot{x}_{cl}^2 dt = \frac{1}{2} M \frac{(x_f - x_0)^2}{t_f - t_0}.$$

Absolutní hodnotu funkce $F(t_f, t_0)$ určíme z podmínky (13.3), která pro volnou částici vede na

$$|F(t_f, t_0)|^2 \int_{\mathbb{R}} dx_f e^{-i \frac{M(x_f - x_0)^2}{2\hbar(t_f - t_0)}} e^{i \frac{M(x_f - x'_0)^2}{2\hbar(t_f - t_0)}} \stackrel{!}{=} \delta(x_0 - x'_0). \quad (13.22)$$

Po algebraických úpravách a substituci $\frac{M}{\hbar(t_f - t_0)} x_f = y$ dostaneme na levé straně integrální vyjádření δ -funkce (exponenciála před integrálem bude rovna jedné díky δ -funkci)

$$\begin{aligned} \text{LS} &= |F(t_f, t_0)|^2 \frac{\hbar(t_f - t_0)}{M} e^{-i \frac{M(x_0^2 - x'_0{}^2)}{2\hbar(t_f - t_0)}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dy e^{iy(x_0 - x'_0)}}_{2\pi\delta(x_0 - x'_0)} \\ &= |F(t_f, t_0)|^2 \frac{2\pi\hbar(t_f - t_0)}{M} \delta(x_0 - x'_0). \end{aligned}$$

Porovnáním s (13.22) dostaneme

$$|F(t_f, t_0)| = \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar(t_f - t_0)}}.$$

Zbývá určit fázi funkce F , kde využijeme podmínku (13.2). Spočítáme nejprve limitu

$$\lim_{t_f \rightarrow t_0} |F(t_f, t_0)| e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}(t)]} = \lim_{t_f \rightarrow t_0} \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar(t_f - t_0)}} e^{i \frac{M(x_f - x_0)^2}{2\hbar(t_f - t_0)}}.$$

Pomocí limitního vyjádření δ -funkce

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\sqrt{\pi\varepsilon}} e^{-\frac{x^2}{4\varepsilon}},$$

zjistíme, že platí

$$\lim_{t_f \rightarrow t_0} \sqrt{\frac{M}{2\pi\hbar(t_f - t_0)}} e^{i \frac{M(x_f - x_0)^2}{2\hbar(t_f - t_0)}} = \sqrt{i} \delta(x_f - x_0).$$

Abychom dostali správnou limitu, musíme $\sqrt{i}$ podělit. Propagátor volné částice na přímce je tedy roven

$$K_0(x_f, t_f; x_0, t_0) = \sqrt{\frac{M}{2\pi i \hbar(t_f - t_0)}} \exp\left(i \frac{M(x_f - x_0)^2}{2\hbar(t_f - t_0)}\right). \quad (13.23)$$

Cvičení 46. Určete propagátor LHO.

Návod: Lagrangián LHO je kvadratický v x a $\dot{x}$

$$L = \frac{1}{2} M \dot{x}^2 - \frac{1}{2} M \omega^2 x^2,$$

takže můžeme využít vztah (13.16) a napsat propagátor ve tvaru

$$K(x_f, t_f; x_0, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}(t)]} F(t_f, t_0).$$

Výpočet akce podél klasické trajektorie, kterou zapíšeme jako

$$x_{cl}(t) = a \sin \omega t + b \cos \omega t,$$

je poměrně pracný. Lagrangián má na klasické trajektorii hodnotu

$$L(x_{cl}, \dot{x}_{cl}, t) = \frac{1}{2} M \omega^2 ((a^2 - b^2) \cos(2\omega t) - 2ab \sin(2\omega t)),$$

takž akce je rovna

$$S[x_{cl}(t)] = \frac{1}{4} M \omega ((a^2 - b^2)(\sin(2\omega t_f) - \sin(2\omega t_0)) + 2ab(\cos(2\omega t_f) - \cos(2\omega t_0))). \quad (13.24)$$

Ve vztahu musíme vyjádřit a a b pomocí počátečního a koncového bodu trajektorie x_0 a x_f , pro které platí

$$\begin{aligned} x_{cl}(t_0) &= x_0 = a \sin \omega t_0 + b \cos \omega t_0, \\ x_{cl}(t_f) &= x_f = a \sin \omega t_f + b \cos \omega t_f. \end{aligned}$$

Řešením soustav rovnic dostaneme

$$\begin{aligned} a &= \frac{x_f \cos \omega t_0 - x_0 \cos \omega t_f}{\sin(\omega(t_f - t_0))}, \\ b &= \frac{x_f \sin \omega t_0 - x_0 \sin \omega t_f}{\sin(\omega(t_f - t_0))}. \end{aligned}$$

Po dosazení do (13.24) vyjádříme akci podél klasické trajektorie LHO ve tvaru

$$S[x_{cl}(t)] = \frac{1}{2} M \omega \frac{(x_f^2 + x_0^2) \cos(\omega(t_f - t_0)) - 2x_0 x_f}{\sin(\omega(t_f - t_0))}.$$

Zbývá určit funkci $F(t_f, t_0)$. Její absolutní hodnota je daná podmínkou (13.3), která pro LHO vede na

$$|F(t_f, t_0)|^2 e^{-i M \omega \frac{(x_0^2 - x_0'^2) \cos(\omega(t_f - t_0))}{2\hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}} \int_{\mathbb{R}} dx_f e^{i M \omega \frac{x_f(x_0 - x_0')}{\hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}} \stackrel{!}{=} \delta(x_0 - x_0'). \quad (13.25)$$

Po substituci

$$\frac{M \omega x_f}{\hbar \sin(\omega(t_f - t_0))} = y, \quad dx_f = \frac{\hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}{M \omega} dy,$$

upravíme levou stranu (13.25) do tvaru (exponenciála je rovna jedné díky δ -funkci)

$$\begin{aligned} \text{LS} &= |F(t_f, t_0)|^2 e^{-i \frac{M \omega (x_0^2 - x_0'^2) \cos(\omega(t_f - t_0))}{2\hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}} \frac{\hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}{M \omega} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dy e^{i y (x_0 - x_0')}}_{2\pi \delta(x_0 - x_0')} \\ &= |F(t_f, t_0)|^2 \frac{2\pi \hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}{M \omega} \delta(x_0 - x_0'). \end{aligned}$$

Porovnáním s pravou stranou (13.25) nalezneme

$$|F(t_f, t_0)| = \sqrt{\frac{M \omega}{2\pi \hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}}.$$

Pro určení fáze využijeme toho, že pro $\omega \rightarrow 0$ musíme dostat propagátor volné částice (13.23). Spočítáme limity

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow 0} |F(t_f, t_0)| &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \sqrt{\frac{M \omega}{2\pi \hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}} = \sqrt{\frac{M}{2\pi \hbar (t_f - t_0)}}, \\ \lim_{\omega \rightarrow 0} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{cl}(t)]} &= \lim_{\omega \rightarrow 0} e^{i M \omega \frac{(x_f^2 + x_0^2) \cos(\omega(t_f - t_0)) - 2x_0 x_f}{2\hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}} = e^{i \frac{M(x_f - x_0)^2}{2\hbar(t_f - t_0)}}, \end{aligned}$$

a porovnáním s (13.23) zjistíme, že ve výsledku chybí faktor $1/\sqrt{i}$. Celkem tedy pro propagátor LHO dostaneme vztah

$$K(x_f, t_f; x_0, t_0) = \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}} \exp\left(iM\omega \frac{(x_f^2 + x_0^2) \cos(\omega(t_f - t_0)) - 2x_0x_f}{2\hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}\right). \quad (13.26)$$

Na závěr si ještě ukážeme alternativní výpočet fluktuačního faktoru pomocí nekonečného součinu. Chceme určit funkci $F(t_f, t_0)$. Za tímto účelem nejprve rozvineme libovolnou trajektorii $y(t)$ s pevnými konci $y(t_0) = y(t_f) = 0$ do Fourierovy řady

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(n\Omega(t - t_0)),$$

kde jsme označili $\Omega = \frac{\pi}{t_f - t_0}$ a kde kosinová část Fourierova rozkladu vymizí díky podmínce pevných konců. Po dosazení do akce a využití relací ortogonality ($\forall m, n \in \mathbb{N}$)

$$\int_{t_0}^{t_f} \cos(m\Omega(t - t_0)) \cos(n\Omega(t - t_0)) dt = \frac{t_f - t_0}{2} \delta_{mn} = \frac{\pi}{2\Omega} \delta_{mn} \quad (13.27)$$

$$\int_{t_0}^{t_f} \sin(m\Omega(t - t_0)) \sin(n\Omega(t - t_0)) dt = \frac{t_f - t_0}{2} \delta_{mn} = \frac{\pi}{2\Omega} \delta_{mn} \quad (13.28)$$

dostáváme

$$S[y(t)] = \sum_{m,n=1}^{\infty} \left(\frac{M}{2} \Omega^2 mn b_m b_n - \frac{M}{2} \omega^2 b_m b_n \right) \frac{\pi}{2\Omega} \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{M\pi}{4\Omega} (\Omega^2 n^2 - \omega^2) b_n^2.$$

Integrál přes trajektorie $y(t)$ v rovnici (13.16) je nyní možné vnímat jako nekonečně-rozměrný integrál přes koeficienty Fourierova rozvoje. Je výhodné uvažovat podíl

$$\frac{F(t_f, t_0)}{F_{\omega=0}(t_f, t_0)} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (\prod_{n=1}^{\infty} db_n) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{M\pi}{4\Omega} (\Omega^2 n^2 - \omega^2) b_n^2\right)}{\int_{-\infty}^{+\infty} (\prod_{n=1}^{\infty} db_n) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{M\pi}{4\Omega} \Omega^2 n^2 b_n^2\right)} = \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{\Omega^2 n^2}{\Omega^2 n^2 - \omega^2}},$$

kde $F_{\omega=0}(t_f, t_0)$ fluktuační faktor pro volnou částici, viz výsledek (13.23). Nekonečný součin určíme z Eulerova vztahu

$$\frac{\sin \pi z}{\pi z} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{z^2}{n^2}\right).$$

Dostáváme tedy fluktuační faktor harmonického oscilátoru

$$F(t_f, t_0) = \frac{F_{\omega=0}(t_f, t_0)}{\sqrt{\prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\omega^2}{\Omega^2 n^2}\right)}} = \sqrt{\frac{M}{2\pi i \hbar (t_f - t_0)}} \sqrt{\frac{\pi \frac{\omega}{\Omega}}{\sin\left(\pi \frac{\omega}{\Omega}\right)}} = \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega(t_f - t_0))}}.$$

Cvičení 47. Určete matici hustoty termálního stavu LHO v x -reprezentaci. Nalezněte příslušnou partiční sumu.

Návod: Vyjdeme ze vztahu (13.17) a výsledku (13.26)

$$\begin{aligned}\rho_{\text{th}}(x_1, x_2) &= \frac{1}{Z} K(x_2, x_1; -i\hbar\beta) \\ &= \frac{1}{Z} \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi i\hbar \sin(-i\hbar\omega\beta)}} \exp\left(iM\omega \frac{(x_2^2 + x_1^2) \cos(-i\hbar\omega\beta) - 2x_1x_2}{2\hbar \sin(-i\hbar\omega\beta)}\right).\end{aligned}$$

Nahradíme sinus a cosinus exponenciálou

$$\sin(-i\hbar\omega\beta) = \frac{e^{\hbar\omega\beta} - e^{-\hbar\omega\beta}}{2i}, \quad \cos(-i\hbar\omega\beta) = \frac{e^{\hbar\omega\beta} + e^{-\hbar\omega\beta}}{2},$$

a po úpravách dostaneme

$$\rho_{\text{th}}(x_1, x_2) = \frac{1}{Z} \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar(e^{\hbar\omega\beta} - e^{-\hbar\omega\beta})}} \exp\left(-M\omega \frac{(x_2^2 + x_1^2)(e^{\hbar\omega\beta} + e^{-\hbar\omega\beta}) - 4x_1x_2}{2\hbar(e^{\hbar\omega\beta} - e^{-\hbar\omega\beta})}\right).$$

Partiční sumu určíme ze vztahu (13.18)

$$\begin{aligned}Z &= \int_{\mathbb{R}} dx K(x, x; -i\hbar\beta) \\ &= \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar(e^{\hbar\omega\beta} - e^{-\hbar\omega\beta})}} \int_{\mathbb{R}} dx \exp\left(-M\omega \frac{x^2(e^{\hbar\omega\beta} + e^{-\hbar\omega\beta}) - 2x^2}{\hbar(e^{\hbar\omega\beta} - e^{-\hbar\omega\beta})}\right) \\ &= \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar(e^{\hbar\omega\beta} - e^{-\hbar\omega\beta})}} \sqrt{\frac{\pi\hbar(e^{\hbar\omega\beta} - e^{-\hbar\omega\beta})}{M\omega(e^{\hbar\omega\beta} + e^{-\hbar\omega\beta}) - 2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\left(e^{\frac{\hbar\omega\beta}{2}} - e^{-\frac{\hbar\omega\beta}{2}}\right)^2}} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega\beta}{2}} - e^{-\frac{\hbar\omega\beta}{2}}} = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega\beta}{2}}}{1 - e^{-\hbar\omega\beta}} = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}}}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}.\end{aligned}$$

Kapitola 14

Základy teorie rozptylu

Přehled teorie

Úvod

V této kapitole si ukážeme základy teorie rozptylu v kvantové mechanice. Zaměříme se na pružný rozptyl bezspinové částice na potenciálu $V(\vec{x})$, který má buď konečný dosah R (tj. $V(\vec{x}) = 0$ pro $|\vec{x}| > R$), nebo vymizí pro $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ dostatečně rychle (rychleji než $\frac{1}{r}$). V takovém případě lze počáteční stav $|\psi_i\rangle$ rozptylované částice v čase $t_0 \rightarrow -\infty$ volit jako (zobecněný) vlastní stav volné částice (s hamiltoniánem $\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2M}$) s hybností $\vec{p}$ a energií $E = \frac{p^2}{2M}$, tj. rovinnou vlnu $|\vec{p}\rangle$. Souřadnou soustavu zvolíme tak, že částice budou dopadat ve směru osy z , tj. $\vec{p} = (0, 0, p)$. Označíme vlnový vektor dopadající částice

$$\vec{k} = \frac{1}{\hbar}\vec{p} = (0, 0, \frac{p}{\hbar}) = (0, 0, k).$$

Stavu dopadající částice $|\vec{p}\rangle \equiv |\psi_{\vec{k}}\rangle$ odpovídá v x -reprezentaci vlnová funkce

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi_{\vec{k}} \rangle = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{ikz}.$$

Zajímá nás pravděpodobnost, že v čase $t_f \rightarrow +\infty$ nalezneme rozptýlenou částici ve stavu vlastním stavu volné částice s hybností $\vec{p}' \neq \vec{p}$ (neumíme rozeznat částici rozptýlenou $\vec{p} \rightarrow \vec{p}$ od částice, která projde potenciálem beze změny), tj. ve stavu $|\vec{p}'\rangle \equiv |\psi_{\vec{k}'}\rangle$ s vlnovou funkcí

$$\psi_{\vec{k}'}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi_{\vec{k}'} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}},$$

kde $\vec{k}' = \frac{1}{\hbar}\vec{p}'$. Pro pružný rozptyl platí $p = p'$, tj. $k = k'$. Amplituda pravděpodobnosti rozptylu $\vec{p} \rightarrow \vec{p}'$ bude rovna

$$\begin{aligned} w_{\vec{p} \rightarrow \vec{p}'} &= \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t_f \rightarrow +\infty}} \langle \vec{p}' | \hat{U}_0^\dagger(t_f, 0) \hat{U}(t_f, t_0) \hat{U}_0(0, t_0) | \vec{p} \rangle \\ &= \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t_f \rightarrow +\infty}} \langle \vec{p}' | \hat{S}(t_f, t_0) | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}' | \hat{S} | \vec{p} \rangle = S_{\vec{p}', \vec{p}}, \end{aligned}$$

kde $\hat{S}(t_f, t_0)$ je evoluční operátor v Diracově obraze a $\hat{S}$ je operátor S -matice

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t_f \rightarrow +\infty}} \hat{S}(t_f, t_0).$$

Jedna z možností, jak amplitudu najít, je použít nestacionární poruchovou teorii. Tento postup je uveden v poznámkách k přednášce. Ukážeme si zde jiný postup, který je podobný řešení rozptylu na přímce (viz. zimní semestr). Díky limitám totiž není nutné řešit nestacionární úlohu. Stačí najít řešení $\phi_{\vec{k}}$ bezčasové Schrödingerovy rovnice pro úplný hamiltonián

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + V(\vec{x}),$$

se stejnou energií, jako má dopadající částice, tj.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + V(\vec{x}) \right) \phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \phi_{\vec{k}}(\vec{x}), \quad (14.1)$$

kteřou lze v asymptotické oblasti ($r = |\vec{x}| \rightarrow +\infty$) napsat jako superpozici dopadající rovinné vlny a rozptýlené sférické vlny

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) \sim \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \psi_{sc}(\vec{x}) \sim e^{ikz} + f(\vec{k}', \vec{k}) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (14.2)$$

$\phi_{\vec{k}}(\vec{x})$ je tzv. stacionární rozptylový stav. Funkce $f(\vec{k}', \vec{k})$ se nazývá amplituda rozptylu, lze ji též zapsat ve tvaru

$$f(\vec{k}', \vec{k}) \equiv f_k(\theta, \varphi),$$

kde θ a φ jsou prostorové úhly vektoru $\vec{k}'$ ($\vec{k}$ míří ve směru osy z). Amplituda $f_k(\theta, \varphi)$ obsahuje veškeré informace o rozptylu dopadající rovinné vlny na potenciálu $V(\vec{x})$ pod různými úhly. Ukážeme, že pro diferenciální účinný průřez platí

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k = |f_k(\theta, \varphi)|^2.$$

Diferenciální účinný průřez

Ze stacionárního rozptylového stavu můžeme vyjádřit tok pravděpodobnosti (za jednotku času) dopadající a rozptýlené vlny. Připomeňme, že pro vlnovou funkci $\psi(\vec{x}, t)$ se definuje tok pravděpodobnosti jako

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{i\hbar}{2M} \left(\psi \vec{\nabla} \bar{\psi} - \bar{\psi} \vec{\nabla} \psi \right),$$

a spolu s hustotou pravděpodobnosti $\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2$ splňuje rovnici kontinuity

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0,$$

která představuje zachování normy vektoru během časového vývoje uzavřeného kvantového systému. Pro stacionární stav je tok na čase nezávislý. Tok dopadající vlny $\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \sim e^{ikz}$ je

$$\vec{j}_{in} = \frac{\hbar k}{M} \vec{n}_z,$$

kde $\vec{n}_z$ je jednotkový vektor ve směru osy z . Rozptýlenou vlnu máme zapsanou ve sférických souřadnicích

$$\psi_{sc}(r, \theta, \varphi) \sim f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Pro výpočet toku tedy použijeme gradient ve sférických souřadnicích

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial r} \vec{n}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{n}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{n}_\varphi,$$

kde $\vec{n}_r$, $\vec{n}_\theta$ a $\vec{n}_\varphi$ jsou jednotkové vektory ve směrech r , θ a φ . Gradient ψ_{sc} je tedy

$$\vec{\nabla} \psi_{sc}(r, \theta, \varphi) = \left(\left(ik - \frac{1}{r} \right) f_k \vec{n}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f_k}{\partial \theta} \vec{n}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f_k}{\partial \varphi} \vec{n}_\varphi \right) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Tok rozptýlené vlny je potom

$$\vec{j}_{sc} = \frac{\hbar k}{M} \frac{1}{r^2} |f_k|^2 \vec{n}_r + \frac{i\hbar}{2M} \frac{1}{r^3} \left(f_k \frac{\partial \bar{f}_k}{\partial \theta} - \bar{f}_k \frac{\partial f_k}{\partial \theta} \right) \vec{n}_\theta + \frac{i\hbar}{2M} \frac{1}{r^3 \sin \theta} \left(f_k \frac{\partial \bar{f}_k}{\partial \varphi} - \bar{f}_k \frac{\partial f_k}{\partial \varphi} \right) \vec{n}_\varphi.$$

Pro velká r je tok ve směrech θ a φ mnohem menší než ve směru r , takže přibližně platí

$$\vec{j}_{sc} \sim \frac{\hbar k}{M} \frac{1}{r^2} |f_k|^2 \vec{n}_r,$$

tj. tok rozptýlené vlny je prakticky radiální. Diferenciální účinný průřez $d\sigma(\theta, \varphi)$ lze vyjádřit jako podíl velikosti toku pravděpodobnosti rozptýlené vlny infinitezimální plochou $dS = r^2 d\Omega$ ku velikosti toku dopadající vlny

$$d\sigma(\theta, \varphi) = \frac{|\vec{j}_{sc}| dS}{|\vec{j}_{in}|} = |f_k(\theta, \varphi)|^2 d\Omega,$$

tj. skutečně platí

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k = |f_k(\theta, \varphi)|^2.$$

Stacionární rozptylový stav, Lippmann-Schwingerova rovnice

Stacionární rozptylový stav $\phi_{\vec{k}}$ je řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice pro celkový hamiltonián (14.1). Označíme

$$U(\vec{x}) = \frac{2M}{\hbar^2} V(\vec{x}),$$

rovnici (14.1) pak upravíme do tvaru

$$(\Delta + k^2)\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = U(\vec{x})\phi_{\vec{k}}(\vec{x}).$$

Tato diferenciální rovnice je ekvivalentní integrální Lippmann-Schwingerově rovnici

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \int_{\mathbb{R}^3} G_{\vec{k}}(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3 x', \quad (14.3)$$

kde $G_{\vec{k}}(\vec{x})$ je Greenova funkce (resp. fundamentální řešení) bezčasové Schrödingerovy rovnice volné částice

$$(\Delta + k^2)G_{\vec{k}}(\vec{x}) = \delta(\vec{x}). \quad (14.4)$$

Greenovu funkci a delta funkci vyjádříme pomocí Fourierovy transformace

$$\begin{aligned} G_{\vec{k}}(\vec{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \tilde{G}_{\vec{k}}(\vec{q}) d^3 q, \\ \delta(\vec{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} d^3 q. \end{aligned}$$

Dosazením do (14.4) dostaneme algebraickou rovnici pro Fourierovu transformaci Greenovy funkce

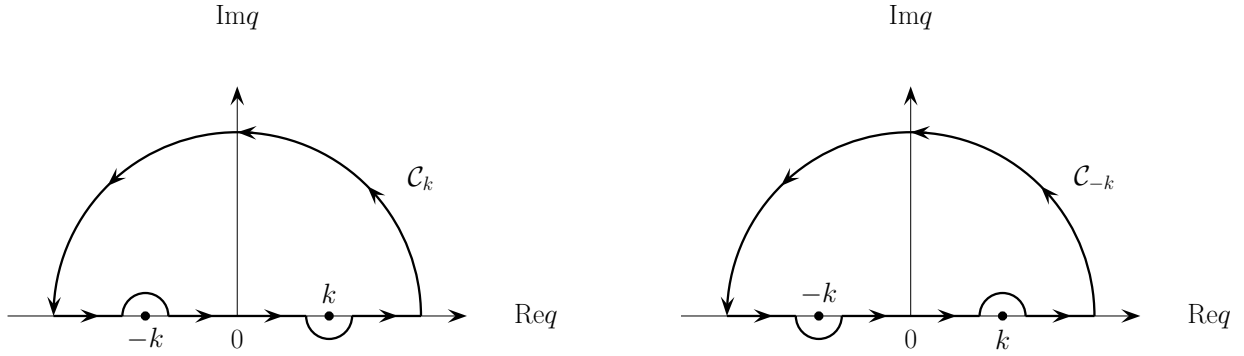
$$(-q^2 + k^2)\tilde{G}_{\vec{k}}(\vec{q}) = 1,$$

její řešení je

$$\tilde{G}_{\vec{k}}(\vec{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2}.$$

Greenova funkce $G_{\vec{k}}(\vec{x})$ je tedy dána vztahem

$$G_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \frac{1}{k^2 - q^2} d^3 q.$$



Obrázek 14.1: Křivky pro póly v $q = k$ a $q = -k$.

Integrál převedeme do sférických souřadnic (q, α, β) a vyintegrujeme přes úhly

$$\begin{aligned}
 G_{\vec{k}}(\vec{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{q^2}{k^2 - q^2} dq \int_0^\pi \sin \alpha d\alpha e^{iqr \cos \alpha} \int_0^{2\pi} d\beta = \left\{ \begin{array}{l} \cos \alpha = t \\ -\sin \alpha d\alpha = dt \end{array} \right\} \\
 &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{q^2}{k^2 - q^2} dq \int_{-1}^1 e^{iqrt} dt = \frac{1}{4\pi^2 i r} \int_0^\infty \frac{q}{k^2 - q^2} (e^{iqr} - e^{-iqr}) dq \\
 &= -\frac{1}{4\pi^2 i r} \int_{-\infty}^\infty \frac{q e^{iqr}}{q^2 - k^2} dq.
 \end{aligned}$$

Zbývající integrál převedeme do komplexní roviny a spočítáme pomocí reziduové věty. Integrand

$$g(q) = \frac{q e^{iqr}}{q^2 - k^2} = \frac{1}{2} e^{iqr} \left(\frac{1}{q - k} + \frac{1}{q + k} \right),$$

má dva póly v bodech $q = \pm k$. Pro pól v $q = k$ křivku uzavřeme jako na obrázku 14.1 vlevo, poloměr kružnice pošleme limitně do nekonečna (integrál po kružnici v limitě vymizí) a nalezneme tzv. rozbíhavou Greenovu funkci

$$G_{\vec{k}}^+(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi^2 i r} \oint_{C_k} \frac{q e^{iqr}}{q^2 - k^2} dq = -\frac{1}{4\pi^2 i r} \pi i e^{ikr} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (14.5)$$

ktehou lze interpretovat jako amplitudu vlny v bodě $\vec{x}$ vyzářené bodovým zdrojem umístěným v počátku. Pro druhý pól v $q = -k$ postupujeme analogicky (viz. obrázek 14.1 vpravo) a nalezneme sbíhavou Greenovu funkci

$$G_{\vec{k}}^-(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi^2 i r} \oint_{C_{-k}} \frac{q e^{iqr}}{q^2 - k^2} dq = -\frac{1}{4\pi^2 i r} \pi i e^{-ikr} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ikr}}{r}.$$

Pro stacionární rozptylový stav s asymptotickým chováním (14.2) musíme použít $G_k^+(\vec{x})$. Dosazením (14.5) do Lippmann-Schwingerovy rovnice (14.3) dostaneme

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) - \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} U(\vec{x}') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x'. \quad (14.6)$$

Snadno se ukáže, že Lippmann-Schwingerova rovnice automaticky zaručuje asymptotické chování rozptylového stacionárního stavu (14.2). Pro potenciál předpokládáme, že je nezanedbatelný pouze pro $|\vec{x}'| = r' < R$. Pro $|\vec{x}| = r \gg R > r'$ pak můžeme použít odhady

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\vec{x}-\vec{x}'|} &\approx \frac{1}{r}, \\ k|\vec{x}-\vec{x}'| &= k\sqrt{r^2 - 2\vec{x} \cdot \vec{x}' + r'^2} \approx kr - k\frac{\vec{x}}{r} \cdot \vec{x}' = kr - \vec{k}' \cdot \vec{x}', \end{aligned}$$

kde jsme označili $\vec{k}' = k\frac{\vec{x}}{r}$. Pro velká r tedy platí

$$G_k^+(\vec{x}-\vec{x}') \approx -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'},$$

a po dosazení do Lippmann-Schwingerovy rovnice (14.6) nalezneme

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{k}}(\vec{x}) &= \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \left(-\frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} U(\vec{x}') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x' \right) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{ikz} + \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left(-2\pi^2 \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}_{\vec{k}'}(\vec{x}) U(\vec{x}') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x' \right) \frac{e^{ikr}}{r}. \end{aligned}$$

V asymptotické oblasti má tedy $\phi_{\vec{k}}$ skutečně tvar (14.2), přičemž amplituda rozptylu je rovna

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -2\pi^2 \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}_{\vec{k}'}(\vec{x}') U(\vec{x}') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x' = -\frac{4\pi^2 M}{\hbar^2} \langle \psi_{\vec{k}'} | \hat{V} | \phi_{\vec{k}} \rangle. \quad (14.7)$$

Bornova řada

Lippmann-Schwingerovu rovnici (14.3) můžeme řešit iterativně tak, že za $\phi_{\vec{k}}(\vec{x}')$ v integrálu opakovaně dosadíme pravou stranu, tj.

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{k}}(\vec{x}) &= \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \int_{\mathbb{R}^3} G_{\vec{k}}(\vec{x}-\vec{x}') U(\vec{x}') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x' \\ &= \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G_{\vec{k}}^+(\vec{x}-\vec{x}') U(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}(\vec{x}') + \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3x'' G_{\vec{k}}^+(\vec{x}-\vec{x}') U(\vec{x}') G_{\vec{k}}^+(\vec{x}'-\vec{x}'') U(\vec{x}'') \phi_{\vec{k}}(\vec{x}'') \\ &= \dots \end{aligned}$$

Každý další člen rozvoje obsahuje o jedna vyšší mocninu potenciálu. Pokud je tedy interakce slabá, je možné členy od jistého řádu zanedbat a přibližně vyjádřit stacionární rozptylový stav pomocí známých funkcí $\psi_{\vec{k}}$ a $G_{\vec{k}}^+$. Dosazením do (14.7) dostaneme Bornovu řadu pro amplitudu rozptylu

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2 M}{\hbar^2} \langle \psi_{\vec{k}'} | \hat{V} | \phi_{\vec{k}} \rangle = f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) + f^{(2)}(\vec{k}', \vec{k}) + \dots, \quad (14.8)$$

kde

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) &= -\frac{4\pi^2 M}{\hbar^2} \langle \psi_{\vec{k}'} | \hat{V} | \psi_{\vec{k}} \rangle = -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}'} V(\vec{x}') d^3x', \\ f^{(2)}(\vec{k}', \vec{k}) &= -\frac{4\pi^2 M}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \bar{\psi}_{\vec{k}'}(\vec{x}) V(\vec{x}') \int_{\mathbb{R}^3} d^3x'' G_{\vec{k}}^+(\vec{x}' - \vec{x}'') \frac{2M}{\hbar^2} V(\vec{x}'') \psi_{\vec{k}}(\vec{x}'') \\ &= \frac{M^2}{4\pi^2\hbar^4} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3x'' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} V(\vec{x}') \frac{e^{ik|\vec{x}'-\vec{x}''|}}{|\vec{x}'-\vec{x}''|} V(\vec{x}'') e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}''}. \end{aligned} \quad (14.9)$$

Jednotlivé členy Bornovy řady můžeme interpretovat tak, že k rozptylu působením potenciálu dojde bodově jednou, dvakrát, atd. 1. Bornovu aproximaci dostaneme prostě tak, že ve vztahu pro amplitudu rozptylu (14.7) nahradíme stacionární rozptylový stav $\phi_{\vec{k}}$ rovinnou vlnou $\psi_{\vec{k}}$. V tomto přiblížení je amplituda rozptylu až na násobek rovna Fourierově transformaci potenciálu. 1. Bornovu aproximaci lze použít, pokud je interakce slabá a kinetická energie nalétávající částice dostatečně velká.

1. Bornova aproximace pro sféricky symetrické potenciály

Pro sféricky symetrický potenciál je amplituda rozptylu v 1. Bornově aproximaci rovna

$$f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}'} V(|\vec{x}'|) d^3x'.$$

Označíme přenesenou hybnost

$$\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}' - \vec{k}),$$

velikost q je potom rovna

$$q = |\vec{k}' - \vec{k}| = \sqrt{k'^2 - 2kk' \cos \theta + k^2} = \sqrt{2k^2(1 - \cos \theta)} = 2k \sin \frac{\theta}{2}.$$

Zvolíme si lokální souřadný systém (x', y', z') tak, že osa z' míří ve směru $\vec{q}$ a integrál převedeme do sférických souřadnic (r', θ', φ')

$$f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty r'^2 dr' \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' e^{-iqr' \cos \theta'} V(r').$$

Integrál přes úhly je roven

$$\int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-iqr' \cos \theta'} = 2\pi \left[\frac{e^{-iqr' \cos \theta'}}{iqr'} \right]_0^\pi = \frac{4\pi}{qr'} \sin(qr').$$

Pro amplitudu rozptylu pak dostaneme

$$f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{M}{\hbar^2 k \sin \frac{\theta}{2}} \int_0^\infty r' V(r') \sin \left(2kr' \sin \frac{\theta}{2} \right) dr' = f_k^{(1)}(\theta). \quad (14.10)$$

Amplituda tedy závisí pouze na úhlu θ , a ne na φ . Pro sféricky symetrický potenciál to platí pro všechny řády Bornova rozvoje, tj. $f(\vec{k}', \vec{k}) = f_k(\theta)$, jak lze vidět z rotační symetrie úlohy okolo osy odpovídající směru dopadajících částic (osa z).

14.1 Metoda parciálních vln

Pro sféricky symetrický potenciál lze nalézt jiný typ rozvoje amplitudy rozptylu, který nezávisí na síle interakce. Můžeme ho využít i v případech, kde poruchový rozvoj není vůbec možný (např. pro rozptyl na tvrdé kouli, kdy je potenciál nekonečný pro $r < R$, viz. cvičení 50) Využijeme toho, že celkový hamiltonián je skalár a má tedy společné vlastní vektory s momentem hybnosti. Stacionární rozptylový stav splňující asymptotické chování

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left(e^{ikz} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right), \quad (14.11)$$

můžeme rozvinout do sférických vln. V rozvoji budou hrát roli pouze stavy s $m = 0$ (pak platí $Y_{l0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$). Moment hybnosti je totiž integrál pohybu, tj. kvantová čísla l a m se zachovávají, a pro dopadající částici je $m = 0$ (je to rovinná vlna šířící se ve směru osy z). Její rozklad do sférických vln je (viz. (7.14))

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{ikz} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta),$$

kde j_l jsou sférické Besselovy funkce a P_l jsou Legendreovy polynomy. Použijeme asymptotické chování sférické Besselovy funkce

$$j_l(kr) \sim \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} = \frac{1}{2ikr} (e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})} - e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})}), \quad (14.12)$$

a vztah $i^l = e^{il\frac{\pi}{2}}$, a nalezneme, že rovinná vlna se pro velká r chová jako

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} P_l(\cos \theta) \quad (14.13)$$

$$\approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{2ik} \left[\frac{e^{ikr}}{r} - e^{il\pi} \frac{e^{-ikr}}{r} \right] P_l(\cos \theta). \quad (14.14)$$

V asymptotické oblasti je tedy rovinná vlna superpozicí rozbíhavé ($\frac{e^{ikr}}{r}$) a sbíhavé ($\frac{e^{-ikr}}{r}$) vlny. Do Legendreových polynomů rozvineme i amplitudu rozptylu (to lze udělat s každou funkcí θ ; dodatečný faktor $2l + 1$ zjednoduší následující výpočty)

$$f_k(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) F_l(k) P_l(\cos \theta), \quad (14.15)$$

kde $F_l(k)$ je amplituda rozptylu l -té parciální vlny. Rozvoje (14.15) a (14.14) dosadíme do (14.11) a nalezneme

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \frac{1}{2ik} \left[\underbrace{(1 + 2ikF_l(k))}_{S_l(k)} \frac{e^{ikr}}{r} - e^{il\pi} \frac{e^{-ikr}}{r} \right] P_l(\cos \theta). \quad (14.16)$$

Vidíme, že v asymptotické oblasti je stacionární rozptylový stav opět roven superpozici rozbíhavé a sbíhavé vlny. V porovnání s rovinnou vlnou (14.14) je v rozvoji u rozbíhavé vlny navíc faktor $S_l(k) = 1 + 2ikF_l(k)$. Komplexní číslo $S_l(k)$ má velikost rovnou jedné. Pro pružný rozptyl, kdy nedochází k absorpci částic, musí totiž být tok dopadajících částic stejný, jako tok vyletujících částic, tj. koeficienty u sbíhavé a rozbíhavé vlny v (14.16) musí mít stejnou velikost

$$|S_l(k)| = |-e^{il\pi}| = 1.$$

Zavedeme si relativní fázové posunutí l -té parciální vlny $\delta_l(k)$ vztahem

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}.$$

Stacionární rozptylový stav (14.16) pak lze vyjádřit ve tvaru

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l + 1) \frac{1}{2ik} \left[e^{2i\delta_l(k)} \frac{e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})}}{r} - \frac{e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})}}{r} \right] P_l(\cos \theta) \quad (14.17)$$

$$\approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l e^{i\delta_l(k)} (2l + 1) \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k))}{kr} P_l(\cos \theta) \quad (14.18)$$

V porovnání (14.18) s rovinnou vlnou (14.13) vidíme, že se argument sinu l -té parciální vlny posune o $\delta_l(k)$. Fázové posunutí tedy popisuje vliv potenciálu na l -tou parciální vlnu - pro $V = 0$ je $\phi_{\vec{k}} \equiv \psi_{\vec{k}}$, a tedy $S_l(k) = 1$, resp. $\delta_l(k) = 0$. Pomocí fázových posunutí můžeme vyjádřit amplitudu rozptylu l -té parciální vlny

$$F_l(k) = \frac{S_l(k) - 1}{2ik} = e^{i\delta_l(k)} \frac{\sin \delta_l(k)}{k}.$$

Celková amplituda rozptylu (14.15) je pak rovna

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \theta). \quad (14.19)$$

Diferenciální účinný průřez

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k &= |f_k(\theta)|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l(k) - \delta_{l'}(k))} \sin \delta_l(k) \sin \delta_{l'}(k) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta), \end{aligned}$$

je ovlivněn interferencí členů s různými hodnotami l . V celkovém účinném průřezu tato interference zmizí kvůli ortogonalitě Legendreových polynomů

$$\int_0^{\pi} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}. \quad (14.20)$$

Pro celkový účinný průřez pružného rozptylu na sféricky symetrickém potenciálu platí

$$\sigma(k) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(k). \quad (14.21)$$

Lze ho tedy napsat jako součet účinných průřezů pro jednotlivé parciální vlny

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = 4\pi (2l+1) |F_l(k)|^2. \quad (14.22)$$

Uvažujme nyní imaginární část amplitudy rozptylu

$$\text{Im} f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) P_l(\cos \theta).$$

Pro Legendreovy polynomy platí $P_l(1) = 1$, takže pro nulový úhel dostaneme

$$\text{Im} f_k(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = \frac{k}{4\pi} \sigma(k).$$

Tento vztah je speciální případ tzv. optického teoremu.

Amplituda rozptylu (14.19), resp. celkový účinný průřez (14.21), jsou dány nekonečnou sumou přes parciální vlny s různými hodnotami l . Pro potenciály konečného dosahu R stačí uvažovat pouze konečný počet parciálních vln, přičemž l_{max} lze odhadnout následující úvahou. Na částici s momentem hybnosti l působí ve vzdálenosti R odstředivá bariéra $\sim \frac{\hbar^2 l^2}{2MR^2}$. Pokud je energie částice mnohem menší, bariérou nepronikne a vůbec se nedostane do oblasti nenulového potenciálu. Z podmínky

$$\frac{\hbar^2 l^2}{2MR^2} \gg E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M},$$

plyne, že pro $l \gg kR$ jsou fázová posunutí velmi malá. Stačí tedy uvažovat parciální vlny s $l < l_{max} \approx kR$. Pro malé energie dopadajících částic tedy dochází k rozptylu především v s vlně ($l = 0$).

Lze ukázat, že pro přitažlivý potenciál ($V(r) \leq 0$) jsou fázová posunutí kladná. Naopak, pro odpudivý potenciál jsou záporná.

Z ortogonalit Legendreových polynomů (14.20) plyne, že amplitudu rozptylu l -té parciální vlny lze vyjádřit z celkové amplitudy vztahem

$$F_l(k) = \frac{1}{2} \int_0^\pi f_k(\theta) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (14.23)$$

Pro slabou interakci a velké energie dopadající částice pak můžeme $f_k(\theta)$ nahradit 1. Bornovou aproximací (14.10). Fázová posunutí i amplitudy jsou malé, takže přibližně platí

$$\sin \delta_l(k) \approx \delta_l(k) \approx k F_l(k).$$

Známe-li amplitudu rozptylu v 1. Bornově aproximaci, můžeme z těchto vztahů určit přibližný tvar fázových posunutí.

Přesný tvar fázových posunutí můžeme určit, pokud umíme vyřešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici pro daný sféricky symetrický potenciál $V(r)$ konečného dosahu. Stacionární rozptylový stav můžeme zapsat jako superpozici společných vlastních funkcí $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$, které můžeme zapsat ve tvaru

$$\phi_{klm}(r, \theta, \varphi) = R_{kl}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi).$$

V rozvoji budou pouze stavy s $m = 0$, pro porovnání s (14.16) ho zapíšeme ve tvaru

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta). \quad (14.24)$$

Funkce $R_{kl}(r)$ jsou řešením radiální rovnice s potenciálem $V(r)$

$$\left[\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \left(\frac{2M}{\hbar^2} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + k^2 \right] R_{kl}(r) = 0. \quad (14.25)$$

Mimo dosah potenciálu (tj. $r > R$) se tato rovnice zredukuje na radiální rovnici pro volnou částici (viz. kapitola 7)

$$\left[\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_{kl}(r) = 0.$$

Jejím řešením je lineární kombinace sférických Besselových a Neumannových funkcí

$$R_{kl}(r) = a_l j_l(kr) + b_l n_l(kr).$$

Koeficienty a_l a b_l určíme tak, abychom dostali správné asymptotické chování stacionárního rozptylového stavu (14.17) pro $r \rightarrow \infty$. Asymptotika Besselovy funkce je ve vztahu (14.12), pro Neumannovu funkci platí

$$n_l(kr) \approx -\frac{1}{kr} \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) = -\frac{1}{2kr} \left(e^{i(kr-l\frac{\pi}{2})} + e^{-i(kr-l\frac{\pi}{2})}\right).$$

Dosazením do (14.24) po úpravách dostaneme asymptotický tvar

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{1}{2ik} \left[(a_l - ib_l) \frac{e^{ikr}}{r} - (a_l + ib_l) \frac{e^{-ikr}}{r} \right] P_l(\cos \theta).$$

Porovnáním s (14.17) nalezneme vztahy

$$\begin{aligned} a_l - ib_l &= S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}, \\ a_l + ib_l &= 1. \end{aligned}$$

Jejich řešením je

$$\begin{aligned} a_l &= e^{i\delta_l(k)} \cos \delta_l(k), \\ b_l &= -e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k). \end{aligned}$$

Musíme tedy nalézt řešení radiální rovnice (14.25) pro $r < R$ (řešení musí být regulární, tj. konečné v $r = 0$), které navážeme na řešení pro $r > R$ ve tvaru

$$R_{kl}(r) = e^{i\delta_l(k)} (\cos \delta_l(k) j_l(kr) - \sin \delta_l(k) n_l(kr)). \quad (14.26)$$

Fázová posunutí $\delta_l(k)$ pak určíme z navazovacích podmínek v $r = R$.

14.2 Příklady

Cvičení 48. Uvažujte rozptyl na Yukawově potenciálu

$$V(r) = K \frac{e^{-\alpha r}}{r}, \quad \alpha > 0.$$

Určete diferenciální účinný průřez v 1. Bornově aproximaci.

Návod: Amplituda rozptylu v 1. Bornově aproximaci (14.10) je pro Yukawův potenciál

rovna

$$\begin{aligned}
 f_k^{(1)}(\theta) &= -\frac{KM}{\hbar^2 k \sin \frac{\theta}{2}} \int_0^\infty e^{-\alpha r'} \sin \left(2kr' \sin \frac{\theta}{2} \right) dr' = -\frac{2KM}{\hbar^2 q} \int_0^\infty e^{-\alpha r'} \frac{1}{2i} \left(e^{iqr'} - e^{-iqr'} \right) dr' \\
 &= -\frac{KM}{i\hbar^2 q} \int_0^\infty \left(e^{-(\alpha-iq)r'} + e^{-(\alpha+iq)r'} \right) dr' = -\frac{KM}{i\hbar^2 q} \underbrace{\left(\frac{1}{\alpha-iq} - \frac{1}{\alpha+iq} \right)}_{\frac{2iq}{\alpha^2+q^2}} \\
 &= -\frac{2KM}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}.
 \end{aligned}$$

Diferenciální účinný průřez je potom

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k(\theta) = |f_k^{(1)}(\theta)|^2 = \left(\frac{2KM}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(\alpha^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^2}.$$

V limitě $\alpha \rightarrow 0$ Yukawův potenciál přechází v Coulombický. Diferenciální účinný průřez odpovídá klasické Rutherfordově formuli

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k(\theta) = \left(\frac{2KM}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{16k^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{MK}{2} \right)^2 \frac{1}{p^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

Dostaneme správný výsledek, byť postup výpočtu pro Coulombický potenciál není korektní - klesá v nekonečno příliš pomalu, takže rozptylové stavy nemají požadovanou asymptotiku.

Cvičení 49. Uvažujte rozptyl částic na Gaussovském potenciálu

$$V(r) = V_0 e^{-\lambda r^2}, \quad V_0, \lambda > 0.$$

Určete amplitudu rozptylu, diferenciální a totální účinný průřez v 1. Bornově aproximaci. Nalezněte fázová posunutí pro s a p vlnu v této aproximaci.

Návod: Pro Gaussovský ponteciál je amplituda rozptylu v 1. Bornově aproximaci (14.10)

daná integrálem ($q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$)

$$\begin{aligned}
f_k^{(1)}(\theta) &= -\frac{2MV_0}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r e^{-\lambda r^2} \sin(qr) dr = -\frac{MV_0}{i\hbar^2 q} \left(\int_0^\infty r e^{-\lambda r^2 + iqr} dr - \int_0^\infty r e^{-\lambda r^2 - iqr} dr \right) \\
&= -\frac{MV_0}{i\hbar^2 q} e^{-\frac{q^2}{4\lambda}} \left(\int_0^\infty r e^{-\lambda(r - \frac{iq}{2\lambda})^2} dr - \int_0^\infty r e^{-\lambda(r + \frac{iq}{2\lambda})^2} dr \right) = \left\{ \begin{array}{l} x = r \mp \frac{iq}{2\lambda} \\ dx = dr \\ y = \frac{iq}{2\lambda} \end{array} \right\} \\
&= -\frac{MV_0}{i\hbar^2 q} e^{-\frac{q^2}{4\lambda}} \left(\int_{-y}^\infty (x+y) e^{-\lambda x^2} dx - \int_y^\infty (x-y) e^{-\lambda x^2} dx \right) \\
&= -\frac{MV_0}{i\hbar^2 q} e^{-\frac{q^2}{4\lambda}} \left(\underbrace{\int_{-y}^y x e^{-\lambda x^2} dx}_{=0} + y \left(\underbrace{\int_{-y}^0 e^{-\lambda x^2} dx}_{=0} - \underbrace{\int_0^y e^{-\lambda x^2} dx}_{=0} + 2 \int_0^\infty e^{-\lambda x^2} dx \right) \right) \\
&= -\frac{KM V_0}{i\hbar^2 q} e^{-\frac{q^2}{4\lambda}} y \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} e^{-\frac{q^2}{4\lambda}} = -\frac{KM V_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} e^{-\frac{k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}{\lambda}} \\
&= -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} e^{-\frac{k^2(1-\cos \theta)}{2\lambda}} \tag{14.27}
\end{aligned}$$

Diferenciální účinný průřez je pak roven

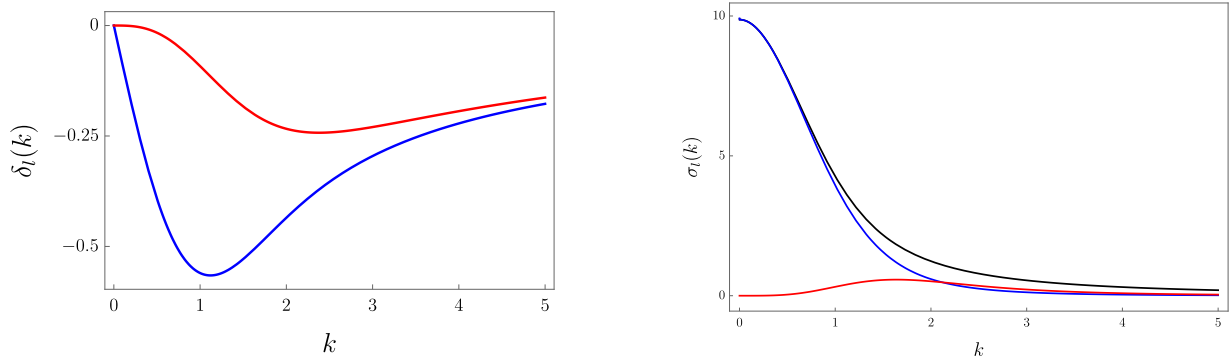
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k(\theta) = |f_k^{(1)}(\theta)|^2 = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2} \right)^2 \frac{\pi}{\lambda^3} e^{-\frac{k^2(1-\cos \theta)}{\lambda}}.$$

Celkový účinný průřez je

$$\begin{aligned}
\sigma(k) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_k(\theta) = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2} \right)^2 \frac{\pi}{\lambda^3} 2\pi \int_0^\pi e^{-\frac{k^2(1-\cos \theta)}{\lambda}} \sin \theta d\theta \\
&= \left\{ \begin{array}{l} 1 - \cos \theta = x \\ \sin \theta d\theta = dx \end{array} \right\} = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2} \right)^2 \frac{2\pi^2}{\lambda^3} \int_0^2 e^{-\frac{k^2}{\lambda} x} dx = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2} \right)^2 \frac{2\pi^2}{\lambda^3} \frac{\lambda}{k^2} \left(1 - e^{-\frac{2k^2}{\lambda}} \right) \\
&= \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2} \right)^2 \frac{2\pi^2}{\lambda^2 k^2} \left(1 - e^{-\frac{2k^2}{\lambda}} \right). \tag{14.28}
\end{aligned}$$

Amplitudy parciálních vln v 1. Bornově přiblížení určíme ze vztahu (14.23). Pro $l = 0$ je $P_0(t) = 1$, takže platí

$$F_0(k) = -\frac{MV_0}{4\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} \int_0^\pi e^{-\frac{k^2(1-\cos \theta)}{2\lambda}} \sin \theta d\theta = -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \frac{1}{k^2} \left(1 - e^{-\frac{k^2}{\lambda}} \right).$$



Obrázek 14.2: Vlevo jsou fázová posunutí pro s (modře) a p (červeně) vlnu. Vpravo jsou parciální účinné průřezy pro s a p vlny a celkový účinný průřez (černě). Všechny parametry jsou rovny jedné, tj. $M = \hbar = V_0 = \lambda = 1$.

Fázové posunutí a parciální účinný průřez s -vlny jsou rovny

$$\delta_0(k) = kF_0(k) = -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \frac{1}{k} \left(1 - e^{-\frac{k^2}{\lambda}}\right), \quad (14.29)$$

$$\sigma_0(k) = 4\pi|F_0(k)|^2 = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2}\right)^2 \frac{4\pi^2}{\lambda k^4} \left(1 - e^{-\frac{k^2}{\lambda}}\right)^2. \quad (14.30)$$

Podobně pro p -vlnu dostaneme parciální amplitudu ($P_1(t) = t$)

$$\begin{aligned} F_1(k) &= -\frac{MV_0}{4\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} \int_0^\pi e^{-\frac{k^2(1-\cos\theta)}{2\lambda}} \cos\theta \sin\theta d\theta = -\frac{MV_0}{4\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} \int_0^2 e^{-\frac{k^2}{2\lambda}x} (1-x) dx \\ &= -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \frac{1}{k^2} \left(1 - \frac{2\lambda}{k^2} + e^{-\frac{k^2}{\lambda}} \left(1 + \frac{2\lambda}{k^2}\right)\right). \end{aligned}$$

Fázové posunutí a parciální účinný průřez tedy jsou

$$\delta_1(k) = kF_1(k) = -\frac{MV_0}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \frac{1}{k} \left(1 - \frac{2\lambda}{k^2} + e^{-\frac{k^2}{\lambda}} \left(1 + \frac{2\lambda}{k^2}\right)\right), \quad (14.31)$$

$$\sigma_1(k) = 12\pi|F_1(k)|^2 = \left(\frac{MV_0}{2\hbar^2}\right)^2 \frac{12\pi^2}{\lambda k^4} \left(1 - \frac{2\lambda}{k^2} + e^{-\frac{k^2}{\lambda}} \left(1 + \frac{2\lambda}{k^2}\right)\right)^2. \quad (14.32)$$

Pro ilustraci jsou na obrázku 14.2 zobrazeny fázová posunutí (14.29), (14.31), parciální účinné průřezy (14.30), (14.32) a celkový účinný průřez v 1. Bornově aproximaci (14.28). Vidíme, že pro malé energie výrazně dominuje rozptyl v s -vlně.

Cvičení 50. Uvažujte rozptyl na tvrdé kouli, tj. potenciálu

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

Nalezněte fázová posunutí a účinný průřez pro l -tou parciální vlnu. Určete jejich explicitní tvar pro s -vlnu. Odhadněte celkový účinný průřez v limitě pro malé, resp. velké energie.

Návod:

Radiální funkce $R_{kl}(r)$ je identicky rovna nule pro $r < R$, pro $r > R$ platí (14.26). Řešení spojitě navážeme v $r = R$, tj.

$$e^{i\delta_l(k)} (\cos \delta_l(k) j_l(kR) - \sin \delta_l(k) n_l(kR)) = 0.$$

Touto podmínkou jsou určena fázová posunutí

$$\tan \delta_l(k) = \frac{j_l(kR)}{n_l(kR)}. \quad (14.33)$$

Pro celkový účinný průřez l -té parciální vlny pak platí

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{\tan^2 \delta_l(k)}{1 + \tan^2 \delta_l(k)} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{j_l^2(kR)}{j_l^2(kR) + n_l^2(kR)}. \quad (14.34)$$

Sférické funkce pro $l = 0$ mají tvar

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z}, \quad n_0(z) = -\frac{\cos z}{z},$$

takže pro s -vlnu platí

$$\delta_0(k) = -kR, \quad \sigma_0(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(kR).$$

Pro malé energie ($kR \ll 1$), kdy v rozptylu dominuje s -vlna, je celkový účinný průřez roven

$$\sigma \approx \sigma_0 \approx \frac{4\pi}{k^2} k^2 R^2 = 4\pi R^2.$$

Pro velké energie ($kR \gg 1$) lze ukázat, že platí

$$\sigma(k) \approx 2\pi R^2.$$

Sumu (14.21) rozdělíme na dvě části

$$\sigma(k) = \sum_{l=0}^{l_{max}} \sigma_l(k) + \sum_{l=l_{max}+1}^{\infty} \sigma_l(k),$$

kde $l_{max} \approx kR$. Pro $l > l_{max}$ aproximujeme sférické funkce pomocí jejich chování blízko nuly

$$j_l(z) \approx \frac{z^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(z) \approx -\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}}. \quad (14.35)$$

Pro tangens fázového posunutí pak přibližně platí

$$\tan \delta_l(k) \approx -\frac{(kR)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \approx \underbrace{\left(\frac{kR}{2l}\right)^2}_{\ll 1} \tan \delta_{l-1}(k).$$

Příspěvek členů s $l > l_{max}$ tedy klesá rychle k nule a můžeme ho zanedbat. Pro $l < l_{max}$ naopak použijeme asymptotické chování sférických funkcí

$$j_l(kR) \approx \frac{\sin(kR - l\frac{\pi}{2})}{kR}, \quad n j_l(kR) \approx -\frac{\cos(kR - l\frac{\pi}{2})}{kR}.$$

Tangens fázového posunutí je pak přibližně roven

$$\tan \delta_l(k) \approx -\tan(kR - l\frac{\pi}{2}).$$

Fázová posunutí $\delta_l(k)$ a $\delta_{l+1}(k)$ se tedy liší o $\frac{\pi}{2}$. Součet totálních účinných průřezů pro l -tou a $l+1$ -ní parciální vlnu lze nahradit

$$\sigma_l(k) + \sigma_{l+1}(k) \approx \frac{4\pi}{k^2} [(2l+1) \sin^2 \delta_l(k) + (2l+3) \cos^2 \delta_l(k)] \approx \frac{4\pi}{k^2} (2l+2).$$

Pro $l < l_{max}$ tedy bude přibližně platit

$$\sigma_l(k) \approx \frac{\sigma_l(k) + \sigma_{l+1}(k)}{2} \approx \frac{4\pi}{k^2} (l+1).$$

Pro celkový účinný průřez pak nalezneme odhad

$$\sigma(k) \approx \sum_{l=0}^{l_{max}} \sigma_l(k) \approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{max}} (l+1) \approx \frac{4\pi}{k^2} \frac{(kR)^2}{2} = 2\pi R^2.$$

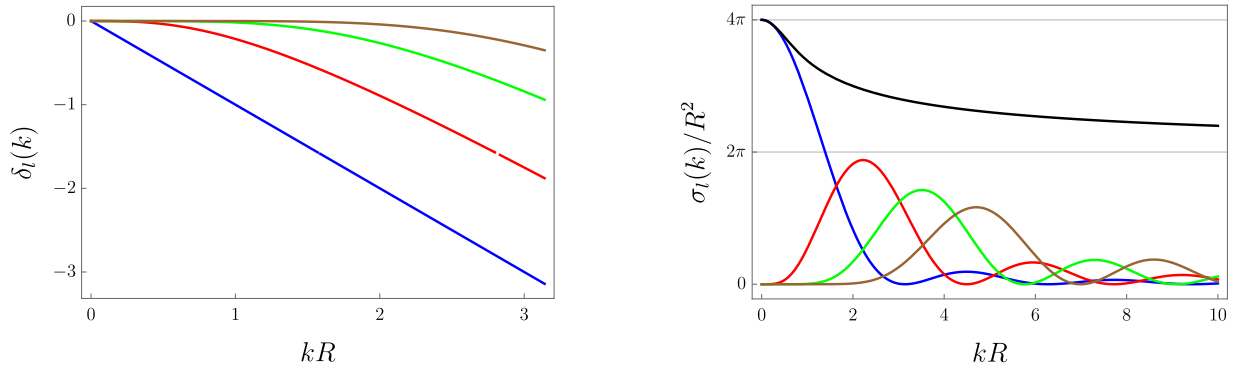
Pro ilustraci jsou na obrázku 14.3 znázorněna fázová posunutí a účinné průřezy pro parciální vlny s $l = 0, 1, 2, 3$. Vpravo je černou čarou vykreslen totální účinný průřez. Z grafu je vidět, že pro malé energie v rozptylu dominuje s -vlna, a pro $k \rightarrow 0$ platí $\sigma \rightarrow 4\pi R^2$. Pro velké energie se totální účinný průřez blíží hodnotě $2\pi R^2$.

Cvičení 51. Uvažujte rozptyl částice na sférické dutině obalené δ -funkcí, tj. potenciálu

$$V(r) = \frac{\alpha}{R} \delta(r - R).$$

Určete fázová posunutí a účinný průřez pro l -tou parciální vlnu.

Návod: Nejprve musíme nalézt radiální vlnovou funkci $R_{kl}(r)$. Mimo bod $r = R$ je potenciál nulový, takže se jedná o volnou částici. Pro $r > R$ má tedy řešení tvar (14.26). Uvnitř



Obrázek 14.3: Fázová posunutí $\delta_l(k)$ (vlevo) a účinný průřez $\sigma_l(k)$ (vpravo) pro l -tou parciální vlnu jako funkce kR . Modře je s -vlna ($l = 0$), červeně p -vlna ($l = 1$), zeleně d -vlna ($l = 2$) a hnědě f -vlna ($l = 3$). Vpravo je černě vykreslen celkový účinný průřez $\sigma(k)$.

slupky je řešením pouze násobek sférické Besselovy funkce (musí být v nule konečné, a sférické Neumannovy funkce divergují v nule), tj.

$$R_{kl}(r) = A_l(k)j_l(kr), \quad r < R.$$

Řešení spojitě navážeme v $r = R$, tj. platí

$$A_l(k)j_l(kR) = e^{i\delta_l(k)} [\cos \delta_l(k)j_l(kR) - \sin \delta_l(k)n_l(kR)]. \quad (14.36)$$

Druhou navazovací podmínku dostaneme z první derivace. Ta není v $r = R$ spojitá, ale má skok daný silou δ -funkce (viz. kapitola ??)

$$R'_{kl}(R^+) - R'_{kl}(R^-) = \frac{2M\alpha}{\hbar^2 R} R_{kl}(R).$$

V našem případě dostaneme (označili jsme $q = \frac{2M\alpha}{\hbar^2}$)

$$ke^{i\delta_l(k)} [\cos \delta_l(k)j'_l(kR) - \sin \delta_l(k)n'_l(kR)] - kA_l(k)j'_l(kR) = \frac{q}{R} A_l(k)j_l(kR).$$

Za pravou stranu dosadíme z (14.36), vynásobíme $j_l(kR)$ a opět dosadíme za $A_l(k)j_l(kR)$ na levé straně z (14.36), po algebraických úpravách nalezneme

$$-\sin \delta_l(k) \underbrace{[j_l(kR)n'_l(kR) - j'_l(kR)n_l(kR)]}_{W_l(kR)} = \frac{q}{kR} j_l(kR) [\cos \delta_l(k)j_l(kR) - \sin \delta_l(k)n_l(kR)]. \quad (14.37)$$

Na levé straně je tzv. Wronskián

$$W_l(z) = \det \begin{pmatrix} j_l(z) & n_l(z) \\ j'_l(z) & n'_l(z) \end{pmatrix} = j_l(z)n'_l(z) - j'_l(z)n_l(z).$$

Ukážeme, že $W_l(z) = \frac{1}{z^2}$. Funkce j_l a n_l splňují sférickou Besselovu rovnici (7.10)

$$\begin{aligned} j_l'' + \frac{2}{z}j_l' + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2}\right)j_l &= 0, \\ n_l'' + \frac{2}{z}n_l' + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2}\right)n_l &= 0. \end{aligned}$$

První rovnici vynásobíme n_l , druhou j_l a odečteme je od sebe - tím dostaneme diferenciální rovnici pro Wronskián

$$\underbrace{j_l''n_l - j_l n_l''}_{W_l'} + \frac{2}{z} \underbrace{(j_l' n_l - j_l n_l')}_{-W_l} = 0 \implies W_l' - \frac{2}{z}W_l = 0.$$

Řešením je $W_l(z) = \frac{c}{z^2}$. Zbývá určit konstantu c . Tu můžeme nalézt např. z chování funkcí $j_l(z)$ a $n_l(z)$ pro malé z (14.35). Pro $l \neq 0$ dostaneme

$$\begin{aligned} W_l(z) &= \frac{z^l}{(2l+1)!!} \frac{d}{dz} \left(-\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \right) - \left(-\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \right) \frac{d}{dz} \frac{z^l}{(2l+1)!!} \\ &= \frac{l+1}{2l+1} \frac{1}{z^2} + \frac{l}{2l+1} \frac{1}{z^2} = \frac{1}{z^2}. \end{aligned}$$

Pro $l = 0$ platí

$$W_0(z) = 1 \frac{d}{dz} \left(-\frac{1}{z} \right) - \left(-\frac{1}{z} \right) \frac{d}{dz} 1 = \frac{1}{z^2}.$$

V obou případech je tedy $c = 1$. Po dosazení za Wronskián má rovnice (14.37) tvar

$$-\frac{1}{(kR)^2} \sin \delta_l(k) = \frac{q}{kR} j_l^2(kR) \cos \delta_l(k) - \frac{q}{kR} j_l(kR) n_l(kR) \sin \delta_l(k),$$

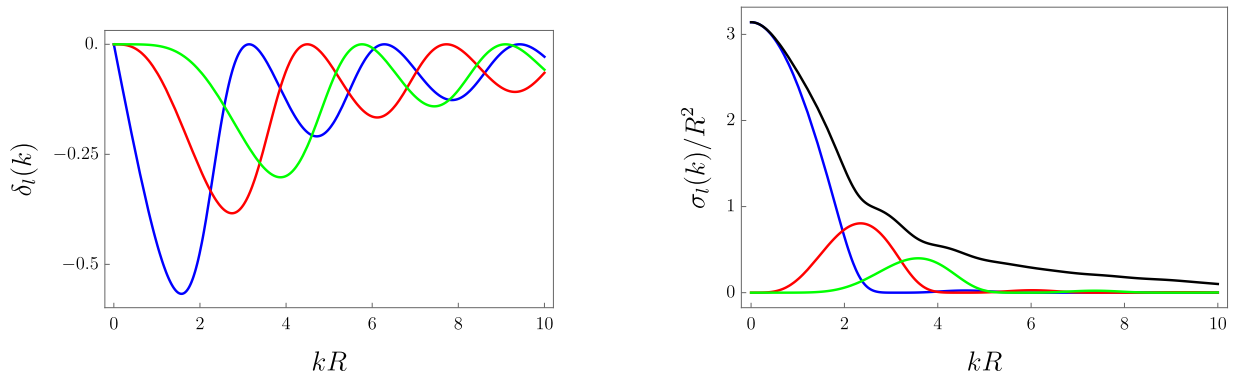
ze kterého vyjádříme tangens fázového posunutí

$$\tan \delta_l(k) = \frac{q j_l^2(kR)}{q j_l(kR) n_l(kR) - \frac{1}{kR}}. \quad (14.38)$$

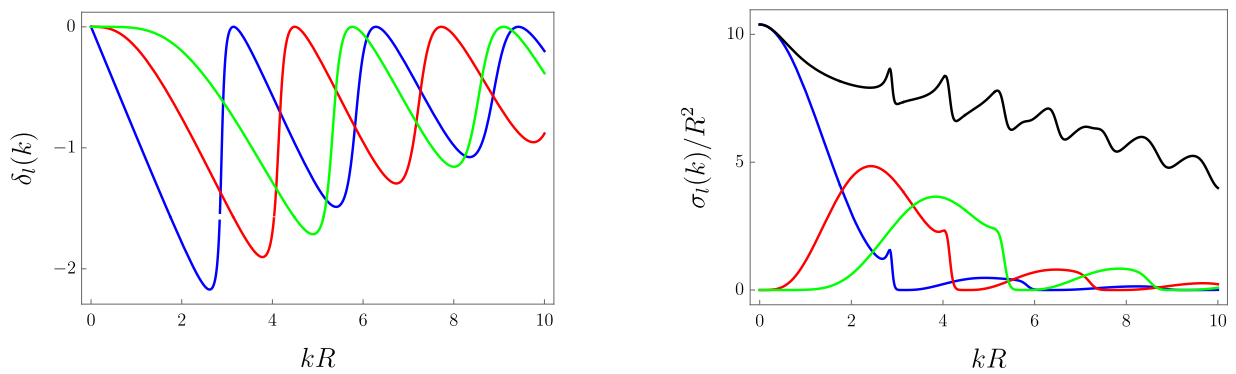
Pro účinný průřez l -té parciální vlny pak platí

$$\begin{aligned} \sigma_l(k) &= \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{\tan^2 \delta_l(k)}{1 + \tan^2 \delta_l(k)} \\ &= \frac{q^2 j_l^4(kR)}{q^2 j_l^4(kR) + (q j_l(kR) n_l(kR) - \frac{1}{kR})^2}. \end{aligned} \quad (14.39)$$

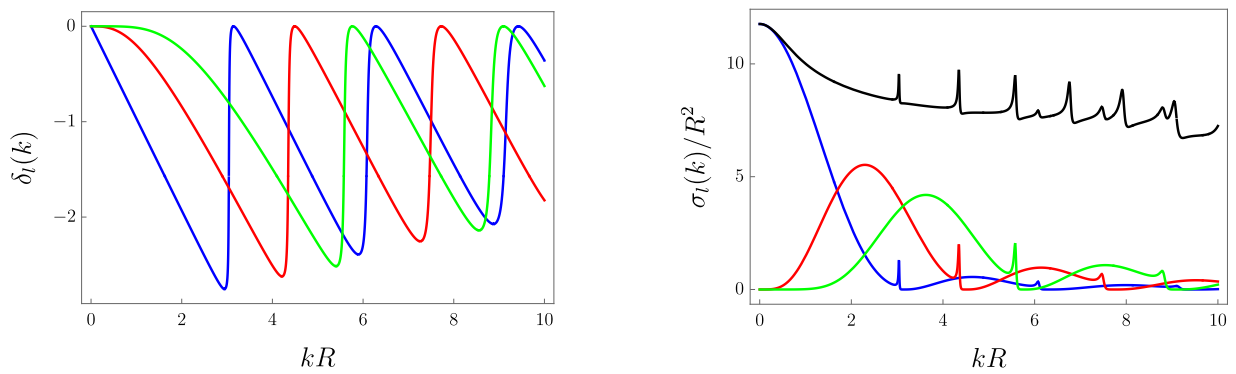
Na obrázcích 14.4, 14.5 a 14.6 jsou fázová posunutí a účinné průřezy pro různé parciální vlny jako funkce kR pro různou sílu interakce ($q = 1, 10, 30$). Modrá čára odpovídá s -vlně ($l = 0$), červená p -vlně ($l = 1$) a zelená d -vlně ($l = 2$). Vpravo je černou čarou vyznačen celkový účinný průřez.



Obrázek 14.4: Fázová posunutí a účinné průřezy pro $q = 1$.



Obrázek 14.5: Fázová posunutí a účinné průřezy pro $q = 10$.



Obrázek 14.6: Fázová posunutí a účinné průřezy pro $q = 30$.

S rostoucím q jsou na parciálních účinných průřezích i celkovém patrné ostré píky. Ty odpovídají rezonancím, tj. kvazivázaným stavům. V limitě pro $q \rightarrow \infty$ (resp. $\alpha \rightarrow \infty$) vede

Hladina	1s	1p	1d	2s	1f	2p	1g
Hodnota $k_{nl}R$	π	4.49	5.76	2π	6.98	7.73	8.18

Tabulka 14.1: Numerické hodnoty kořenů sférických Besselových funkcí pro $k_{nl}R < 9$. Je použito spektroskopické značení hladin nl , tj. $s \leftrightarrow l = 0$, $p \leftrightarrow l = 1$, $d \leftrightarrow l = 2$, $f \leftrightarrow l = 3$, $g \leftrightarrow l = 4$.

sférická slupka s δ -funkcí na neprostupnou kouli, tj. k potenciálu

$$V_{\alpha \rightarrow \infty}(R) = \begin{cases} 0 & r < R \\ \infty & r > R \end{cases}$$

Hamiltonián má pak diskrétní spektrum. Radiální rovnice (14.25) je pro tento potenciál

$$\left[\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k_{nl}^2 \right] R_{nl}(r) = 0, \quad k_{nl}^2 = \frac{2M}{\hbar^2} E_{nl}$$

s okrajovou podmínkou

$$R_{nl}(R) = 0. \quad (14.40)$$

Regulární řešení je

$$R_{nl}(r) = j_l(k_{nl}r).$$

Energie vázaných stavů částice v neprostupné kouli jsou určeny okrajovou podmínkou (14.40), tj.

$$j_l(k_{nl}R) = 0.$$

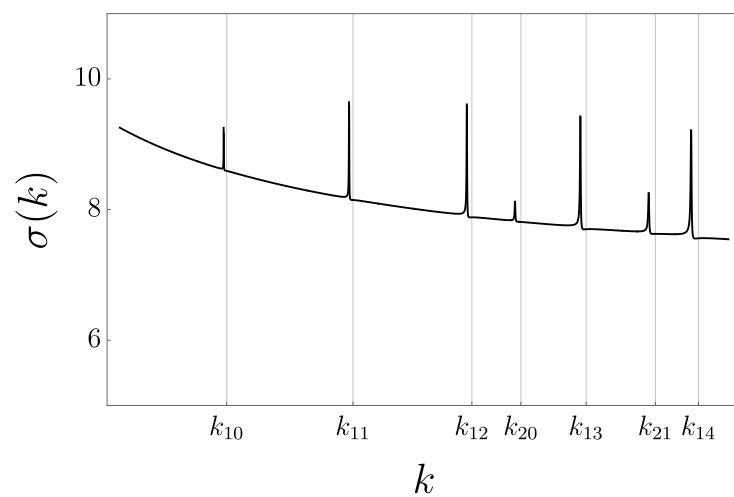
Pro s -stavy ($l = 0$) je $j_0(z) = \frac{\sin z}{z}$, takže musí platit

$$k_{n0}R = n\pi.$$

Z této podmínky dostaneme

$$E_{n0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2MR^2}$$

To souhlasí s energií částice v nekonečné jámě šířky R . Energie stavů s $l \neq 0$ (resp. k_{nl}) se musí určit numerickým nalezením kořenů sférických Besselových funkcí. Hodnoty kořenů pro $k_{nl}R < 9$ jsou uvedeny v tabulce 14.1. Pro ilustraci je na obrázku 14.7 celkový účinný průřez pro $q = 100$ a $R = 1$. Píky jsou velmi blízko hodnotám k_{nl} odpovídající rezonancím uvedeným v tabulce 14.1.



Obrázek 14.7: Celkový účinný průřez pro $q = 100$ a $R = 1$. Píky odpovídají rezonancím, tj. kvazivázaným stavům částice uvnitř dutiny. Energie jsou blízké hodnotám pro vázané stavy částice v neprostupné kouli uvedené v tabulce 14.1

Kapitola 15

Nerozlišitelné částice

Identické částice, které nelze odlišit podle nedynamických parametrů, jsou v kvantové mechanice nerozlišitelné. Jejich očíslování nemá žádný fyzikální význam a předpovědi teorie na něm nesmí záviset. Ze zimního semestru víme, že tento požadavek je splněn, pokud jsou stavy identických částic buď plně symetrické, nebo plně antisymetrické, vůči záměně libovolné dvojice částic. V prvním případě se jedná o bosony (částice s celočíselným spinem), ve druhém případě fermiony (částice s polocelým spinem). Je-li $\mathcal{H}$ Hilbertův prostor jedné částice, pak prostor možných stavů N bosonů je podprostor symetrických stavů $\mathcal{H}_S^{(N)} \subset \mathcal{H}^{\otimes N}$, a prostor možných stavů N fermionů tvoří podprostor antisymetrických stavů $\mathcal{H}_A^{(N)} \subset \mathcal{H}^{\otimes N}$.

Ukážeme si, jak se dá symetrizace a antisymetrizace stavu realizovat pomocí operátorů transpozice, resp. permutací, a sestrojíme projektory na $\mathcal{H}_S^{(N)}$ a $\mathcal{H}_A^{(N)}$. Zavedeme si obsazovací čísla, která jsou užitečná k popisu stavu nerozlišitelných částic. Pro práci se systémy s proměnným počtem částic si definujeme tzv. Fockův prostor a představíme si formalismus kreačních a anihilačních operátorů.

15.1 Symetrizační a antisymetrizační projektory

Nechť $\mathcal{H}$ je Hilbertův prostor jedné částice, zvolíme si v něm nějakou ON bázi $\{|\phi_k\rangle\}$

$$\langle\phi_k|\phi_l\rangle = \delta_{kl}, \quad \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \hat{I},$$

kde ϕ_k reprezentuje sadu kvantových čísel určujících hodnoty nějaké úplné množiny pozorovatelných. Typicky je jednou z pozorovatelných hamiltonián jedné částice $\hat{H}_1$.

Uvažujme nejprve dvě nerozlišitelné částice. Definujeme operátor transpozice částic $\hat{P}_{(1,2)}$ jeho působením na bazické vektory $|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}\rangle \equiv |\phi_{k_1}\rangle \otimes |\phi_{k_2}\rangle$ v tenzorovém součinu $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$

$$\hat{P}_{(1,2)}|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}\rangle = |\phi_{k_2}, \phi_{k_1}\rangle.$$

Operátor transpozice je zjevně hermitovský, jeho kvadrátem je identita, takže je i unitární

$$\hat{P}_{(1,2)}^\dagger = \hat{P}_{(1,2)}, \quad \hat{P}_{(1,2)}^2 = \hat{I} \implies \hat{P}_{(1,2)} = \hat{P}_{(1,2)}^{-1} = \hat{P}_{(1,2)}^\dagger.$$

Jeho vlastní čísla jsou ± 1 , vlastní podprostory jsou $\mathcal{H}_S^{(2)}$ a $\mathcal{H}_A^{(2)}$, tj.

$$\begin{aligned}\forall |\psi_S\rangle \in \mathcal{H}_S^{(2)}, \quad \hat{P}_{(1,2)}|\psi_S\rangle &= |\psi_S\rangle, \\ \forall |\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A^{(2)}, \quad \hat{P}_{(1,2)}|\psi_A\rangle &= -|\psi_A\rangle.\end{aligned}$$

Každý stav dvou nerozlišitelných částic je tedy vlastním vektorem operátoru transpozice $\hat{P}_{(1,2)}$. Definujme operátory

$$\hat{S} = \frac{1}{2} \left(\hat{I} + \hat{P}_{(1,2)} \right), \quad \hat{A} = \frac{1}{2} \left(\hat{I} - \hat{P}_{(1,2)} \right). \quad (15.1)$$

Ukážeme, že se jedná o ortogonální projektory na podprostory $\mathcal{H}_S^{(2)}$ a $\mathcal{H}_A^{(2)}$. Zjevně to jsou hermitovské operátory, spočítáme jejich kvadráty

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 &= \frac{1}{4} \left(\hat{I} + 2\hat{P}_{(1,2)} + \underbrace{\hat{P}_{(1,2)}^2}_{\hat{I}} \right) = \frac{1}{2} \left(\hat{I} + \hat{P}_{(1,2)} \right) = \hat{S}, \\ \hat{A}^2 &= \frac{1}{4} \left(\hat{I} - 2\hat{P}_{(1,2)} + \underbrace{\hat{P}_{(1,2)}^2}_{\hat{I}} \right) = \frac{1}{2} \left(\hat{I} - \hat{P}_{(1,2)} \right) = \hat{A}.\end{aligned}$$

Jsou to tedy projektory. Dále platí

$$\begin{aligned}\hat{P}_{(1,2)}\hat{S} &= \frac{1}{2} \left(\hat{P}_{(1,2)} + \hat{P}_{(1,2)}^2 \right) = \hat{S}, \\ \hat{P}_{(1,2)}\hat{A} &= \frac{1}{2} \left(\hat{P}_{(1,2)} - \hat{P}_{(1,2)}^2 \right) = -\hat{A},\end{aligned}$$

takže $\hat{S}$ je ortogonální projektor na podprostor $\mathcal{H}_S^{(2)}$ a $\hat{A}$ je ortogonální projektor na podprostor $\mathcal{H}_A^{(2)}$

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \quad \hat{S}|\psi\rangle \in \mathcal{H}_S^{(2)}, \quad \hat{A}|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A^{(2)}.$$

Rovněž vidíme, že platí

$$\hat{A}\hat{S} = \hat{S}\hat{A} = \frac{1}{4} \left(\hat{I} - \hat{P}_{(1,2)}^2 \right) = 0,$$

tj. podprostory $\mathcal{H}_S^{(2)}$ a $\mathcal{H}_A^{(2)}$ jsou ortogonální. Pro dvě částice navíc platí

$$\hat{S} + \hat{A} = \hat{I},$$

a odsud plyne rozklad

$$\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} = \mathcal{H}_S^{(2)} \oplus \mathcal{H}_A^{(2)}.$$

Snadno se ukáže, že všechny pozorovatelné dvou nerozlišitelných částic musí komutovat s operátorem transpozice. Nechť pro dvoučásticovou pozorovatelnou $\hat{B}$ platí

$$\hat{B}|b\rangle = b|b\rangle. \quad (15.2)$$

Ket $|b\rangle$ je nějaký stav dvou nerozlišitelných částic, takže pro něj musí platit

$$\hat{P}_{(1,2)}|b\rangle = \pm|b\rangle.$$

Na tuto rovnici zapůsobíme operátorem $\hat{B}$, na (15.2) pustíme operátor $\hat{P}_{(1,2)}$, a rovnice od sebe odečteme

$$\left(\hat{B}\hat{P}_{(1,2)} - \hat{P}_{(1,2)}\hat{B}\right)|b\rangle = \pm b|b\rangle - (\pm b|b\rangle) = 0.$$

Tento vztah platí pro všechny vlastní stavy $\hat{B}$, takže $\hat{B}$ musí komutovat s operátorem transpozice

$$[\hat{B}, \hat{P}_{(1,2)}] = 0.$$

Pozorovatelné tedy musí být symetrické vůči záměně částic. Protože každá pozorovatelná komutuje s jednotkou, komutuje $\hat{B}$ i s projektory $\hat{S}$ a $\hat{A}$

$$[\hat{B}, \hat{S}] = 0, \quad [\hat{B}, \hat{A}] = 0.$$

Tyto vztahy vyjadřují to, že pozorovatelné pro nerozlišitelné částice musí působit uvnitř příslušného podprostoru, tj. zobrazit stav z $\mathcal{H}_{S/A}^{(2)}$ na stav z $\mathcal{H}_{S/A}^{(2)}$. Analogicky se ukáže, že $\hat{P}_{(1,2)}$, resp. $\hat{S}$ a $\hat{A}$, komutují se všemi unitárními operátory, které reprezentují symetrie, resp. obecněji prostoročasové transformace.

Přejdeme nyní k systému N nerozlišitelných částic. Definujeme operátor transpozice částice m a n $\hat{P}_{(m,n)}$ předpisem

$$\hat{P}_{(m,n)}|\phi_{k_1}, \dots, \phi_{k_m}, \dots, \phi_{k_n}, \dots, \phi_{k_N}\rangle = |\phi_{k_1}, \dots, \phi_{k_n}, \dots, \phi_{k_m}, \dots, \phi_{k_N}\rangle.$$

Opět platí, že $\hat{P}_{(m,n)}$ je hermitovský a unitární, takže má vlastní čísla ± 1 , a příslušné vlastní podprostory jsou $\mathcal{H}_S^{(N)}$ a $\mathcal{H}_A^{(N)}$

$$\begin{aligned} \forall |\psi_S\rangle \in \mathcal{H}_S^{(N)}, \quad & \hat{P}_{(m,n)}|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle, \\ \forall |\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A^{(N)}, \quad & \hat{P}_{(m,n)}|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle. \end{aligned}$$

K dané permutaci N prvků π

$$\pi : \{1, \dots, N\} \rightarrow \{\pi_1, \dots, \pi_N\},$$

přiřadíme operátor $\hat{P}_\pi$ definovaný vztahem

$$\hat{P}_\pi|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}\rangle = |\phi_{k_{\pi_1}}, \phi_{k_{\pi_2}}, \dots, \phi_{k_{\pi_N}}\rangle$$

Každou permutaci lze rozložit na transpozice, takže $\hat{P}_\pi$ lze také rozložit na součin $\hat{P}_{(m,n)}$ (rozklad není jednoznačný, ale vždy obsahuje buď sudý, nebo lichý počet transpozic). Pro operátory permutací pak platí

$$\begin{aligned} \forall |\psi_S\rangle \in \mathcal{H}_S^{(N)}, \quad & \hat{P}_\pi|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle, \\ \forall |\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A^{(N)}, \quad & \hat{P}_\pi|\psi_A\rangle = \sigma_\pi|\psi_A\rangle, \end{aligned}$$

kde σ_π je znaménko permutace π (tj. $\sigma_\pi = 1$, pokud π je sudá permutace, a $\sigma_\pi = -1$, pokud je to lichá permutace). Definujeme symetrizační a antisymetrizační operátory

$$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi} \hat{P}_\pi, \quad \hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi} \sigma_\pi \hat{P}_\pi. \quad (15.3)$$

Ukážeme, že jsou to ortogonální projektory na podprostory $\mathcal{H}_S^{(N)}$ a $\mathcal{H}_A^{(N)}$. Využijeme toho, že permutace tvoří symetrickou grupu S_N , která má $N!$ prvků. Pokud pro složení permutací platí

$$\beta \cdot \alpha = \gamma, \quad \sigma_\beta \sigma_\alpha = \sigma_\gamma,$$

pak

$$\hat{P}_\beta \hat{P}_\alpha = \hat{P}_\gamma,$$

tj. $\hat{P}_\pi$ představují reprezentaci grupy permutací S_N na $\mathcal{H}^{\otimes N}$. Odsud pak plyne

$$\begin{aligned} \hat{P}_\beta \hat{S} &= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \hat{P}_\beta \hat{P}_\alpha = \frac{1}{N!} \sum_{\gamma} \hat{P}_\gamma = \hat{S}, \\ \hat{P}_\beta \hat{A} &= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \sigma_\alpha \hat{P}_\beta \hat{P}_\alpha = \sigma_\beta \frac{1}{N!} \sum_{\gamma} \sigma_\gamma \hat{P}_\gamma = \sigma_\beta \hat{A}, \end{aligned} \quad (15.4)$$

kde ve druhém řádku jsme využili

$$\sigma_\beta \sigma_\gamma = \sigma_\beta (\sigma_\beta \sigma_\alpha) = \sigma_\alpha.$$

Z těchto vztahů už se snadno ukáže, že $\hat{S}$ a $\hat{A}$ jsou projektory

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 &= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \hat{P}_\alpha \hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \hat{S} = \hat{S}, \\ \hat{A}^2 &= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \sigma_\alpha \hat{P}_\alpha \hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \underbrace{\sigma_\alpha^2}_1 \hat{A} = \hat{A}. \end{aligned}$$

Ze vztahů (15.4) je navíc zřejmé, že $\hat{S}$ je projektor na $\mathcal{H}_S^{(N)}$ a $\hat{A}$ je projektor na $\mathcal{H}_A^{(N)}$. Tyto podprostory jsou ortogonální, protože platí

$$\hat{A} \hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \sigma_\alpha \hat{P}_\alpha \hat{S} = \hat{S} \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \sigma_\alpha = 0,$$

kde poslední rovnost plyne z toho, že polovina permutací je sudých a polovina lichých. Poznamenejme, že pro dvě částice jsou vztahy pro projektory (15.1) a (15.3) identické, protože grupa permutací S_2 má pouze dva prvky - identickou permutaci a transpozici $1 \rightarrow 2$. Pro víc než dvě částice ale součet projektorů není roven jednotkovému operátoru

$$N \geq 3 \implies \hat{S} + \hat{A} \neq \hat{I},$$

takže

$$\mathcal{H}_S^{(N)} \oplus \mathcal{H}_A^{(N)} \neq \mathcal{H}^{\otimes N} \quad \text{pro } N \neq 2.$$

Pozorovatelná $\hat{B}$ souboru N nerozlišitelných částic musí být symetrická vůči záměně libovolné dvojice částic, tj. musí komutovat se všemi operátory transpozic. Musí tedy komutovat i s projektory $\hat{S}$ a $\hat{A}$

$$[\hat{B}, \hat{S}] = 0, \quad [\hat{B}, \hat{A}] = 0,$$

tj. pozorovatelné nerozlišitelných částic musí působit uvnitř příslušného podprostoru $\mathcal{H}_{S/A}^{(N)}$.

15.2 Obsazovací čísla

Sestrojíme nyní ON báze v podprostorech $\mathcal{H}_S^{(N)}$ a $\mathcal{H}_A^{(N)}$ z jednočásticových bazických stavů $|\phi_k\rangle$ (módů). Uvažujme nejprve N bosonů v módech s kvantovými čísly $\phi_{k_1}, \dots, \phi_{k_N}$, kde jsou indexy uspořádané $k_1 \leq k_2 \leq \dots \leq k_N$ (abychom dostali různé stavy). Normalizovaný bazický stav N bosonů pak označíme jako

$$|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}; S\rangle = \mathcal{N}_S \hat{S} |\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}\rangle.$$

Analogicky pro N fermionů označíme normalizovaný bazický stav jako

$$|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}; A\rangle = \mathcal{N}_A \hat{A} |\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}\rangle,$$

kde kvůli Pauliho principu musíme požadovat $k_1 < k_2 < \dots < k_N$. $\mathcal{N}_S$ a $\mathcal{N}_A$ jsou normalizační faktory, které nyní určíme. Začneme s fermiony, kde je výpočet jednodušší. Vektor $\hat{A}|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}\rangle$ je superpozicí $N!$ ortonormálních vektorů, v projektoru $\hat{A}$ je navíc faktor $\frac{1}{N!}$. Kvadrát normy tohoto vektoru je tedy $\frac{1}{N!^2} N! = \frac{1}{N!}$. Normovaný vektor tedy dostaneme pro volbu $\mathcal{N}_A = \sqrt{N!}$, tj.

$$|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}; A\rangle = \sqrt{N!} \hat{A} |\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi} \sigma_{\pi} |\phi_{k_{\pi_1}}, \phi_{k_{\pi_2}}, \dots, \phi_{k_{\pi_N}}\rangle.$$

Pro bosony je určení normalizačního faktoru složitější, protože mohou být ve stejném kvantovém stavu, a v takovém případě nejsou všechny stavy v superpozici $\hat{S}|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}\rangle$ různé. Zavedeme si proto obsazovací čísla n_k , které značí počet částic v módu $|\phi_k\rangle$. Pro danou sadu obsazovacích čísel $\{n_i\}$, kde $\sum_i n_i = N$, je v superpozici $\frac{N!}{\prod_j n_j!}$ různých ortonormálních stavů. Každý z těchto stavů je zastoupen s vahou $\left(\prod_j n_j!\right)$. Kvadrát normy vektoru lze tedy napsat ve tvaru

$$(\mathcal{N}_S)^2 \frac{1}{N!^2} \frac{N!}{\prod_j n_j!} \left(\prod_k n_k! \right)^2 = (\mathcal{N}_S)^2 \frac{(\prod_k n_k!)}{N!} \stackrel{!}{=} 1$$

Normalizační faktor pak musí být

$$\mathcal{N}_S = \sqrt{\frac{N!}{\prod_k n_k!}}.$$

Pro N bosonů tak dostaneme bazické stavy

$$\begin{aligned} |\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}; S\rangle &= \sqrt{\frac{N!}{\prod_k n_k!}} \hat{S} |\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \dots, \phi_{k_N}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_k n_k!}} \sum_{\pi} |\phi_{k_{\pi_1}}, \phi_{k_{\pi_2}}, \dots, \phi_{k_{\pi_N}}\rangle. \end{aligned}$$

Obsazovací čísla můžeme analogicky zavést i pro fermiony, kvůli Pauliho principu v tomto případě mohou nabývat pouze hodnot $n_i = 0, 1$. K popisu bazických stavů N bosonů nebo fermionů pak místo explicitního výpisu jednočásticových stavů použijeme obsazovací čísla (normalizační faktor můžeme zapsat pro fermiony stejně jako pro bosony, protože pro $n_i = 0, 1$ je $n_i! = 1$)

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; S/A\rangle = \sqrt{\frac{N!}{\prod_k n_k!}} \hat{S}/\hat{A} (|\phi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes |\phi_2\rangle^{\otimes n_2} \otimes \dots \otimes |\phi_k\rangle^{\otimes n_k} \otimes \dots).$$

Tento stav popisuje situaci, kdy máme n_k částic v módu $|\phi_k\rangle$. ON bázi prostoru N bosonů $\mathcal{H}_S^{(N)}$ tvoří stavy

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; S\rangle, \quad \sum_i n_i = N, \quad n_i = 0, 1, 2, \dots, \quad (15.5)$$

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; S | n'_1, n'_2, \dots, n'_k, \dots; S \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_k n'_k}.$$

a v případě prostoru N fermionů $\mathcal{H}_A^{(N)}$ je tvořena stavy

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; A\rangle, \quad \sum_i n_i = N, \quad n_i = 0, 1, \quad (15.6)$$

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; A | n'_1, n'_2, \dots, n'_k, \dots; A \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_k n'_k}.$$

Těmto vektorům se často říká Fockovy stavy.

15.3 Fockův prostor

Zatím jsme pracovali s fixním počtem N identických částic. Často ale potřebujeme uvažovat proměnný počet částic, např. v kvantové teorii pole. Stavový prostor pro takový systém se nazývá Fockův prostor a konstruuje se jako direktní součet prostorů pro různé počty částic N , tj. pro bosony

$$\mathcal{F}_B(\mathcal{H}) = \mathcal{H}_S^{(0)} \oplus \mathcal{H}_S^{(1)} \oplus \mathcal{H}_S^{(2)} \oplus \dots = \bigoplus_{k=0}^{\infty} \mathcal{H}_S^{(k)},$$

a pro fermiony

$$\mathcal{F}_F(\mathcal{H}) = \mathcal{H}_A^{(0)} \oplus \mathcal{H}_A^{(1)} \oplus \mathcal{H}_A^{(2)} \oplus \dots = \bigoplus_{k=0}^{\infty} \mathcal{H}_A^{(k)}.$$

Ve vztazích jsme dodefinovali

$$\mathcal{H}_S^{(0)} = \mathcal{H}_A^{(0)} = \mathbb{C}, \quad \mathcal{H}_S^{(1)} = \mathcal{H}_A^{(1)} = \mathcal{H}.$$

Fockův prostor je opět Hilbertův prostor. Skalární součin pro vektory z podprostoru se stejným počtem částic N je definovaný v $\mathcal{H}_{S/A}^{(N)}$, pro vektory z různých podprostorů ho dodefinujeme nulou

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{S/A}^{(N_1)}, \quad |\phi\rangle \in \mathcal{H}_{S/A}^{(N_2)}, \quad N_1 \neq N_2 \implies \langle\psi|\phi\rangle = 0,$$

a na celý Fockův prostor ho rozšíříme tak, aby to byla sesquilineární forma.

Báze v podprostorech $\mathcal{H}_{S/A}^{(N)}$ tvoří vektory (15.5), (15.6), kde $\sum_i n_i = N$. Pro $N = 0$ má $\mathcal{H}_{S/A}^{(0)}$ dimenzi jedna, odpovídající bazický stav $|0\rangle$ popisuje situaci, kdy v systému není žádná částice - je to tzv. vakuový stav.

V dalším si zavedeme kreační a anihilační operátory jednočásticových stavů, pomocí kterých lze Fockovy stavy (15.5), (15.6) generovat z vakuového stavu $|0\rangle$. Kreační operátory zobrazují vektory z $\mathcal{H}_{S/A}^{(N)}$ na vektory z $\mathcal{H}_{S/A}^{(N+1)}$, tj. přidávají jednu částici v nějakém módu. Podobně, anihilační operátory zobrazují vektory z $\mathcal{H}_{S/A}^{(N)}$ na vektory z $\mathcal{H}_{S/A}^{(N-1)}$, tj. ubírají jednu částici (resp. anihilují vakuový stav na 0). Zda jsou částice bosony nebo fermiony se projeví v komutačních nebo antikomutačních relacích pro příslušné operátory. Pro lepší pochopení nejprve připomeňme formalismus kreačních a anihilačních operátorů pro LHO. Vlastní stavy hamiltoniánu LHO $|n\rangle$ splňují rovnice

$$\hat{H}|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega |n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Pro hamiltonián LHO můžeme nalézt posunovací operátory $\hat{a} \equiv \hat{a}_-$ a $\hat{a}^\dagger \equiv \hat{a}_+$, které splňují

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega \hat{a}, \quad [\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega \hat{a}^\dagger, \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I}.$$

Posunovací operátory působí na bazické stavy $|n\rangle$ podle předpisu

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

n -tý bazický stav tak můžeme napsat pomocí působení kreačního operátoru na základní stav

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle.$$

Hamiltonián LHO můžeme zapsat ve tvaru

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega = \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega.$$

Operátor $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ působí na bazické stavy následovně

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle.$$

LHO můžeme interpretovat např. jako jeden mód kvantovaného elektromagnetického pole v dutině, jehož kvanta (fotony) mají energii $\hbar\omega$. Vybraný mód odpovídá jednomu jednočásticovému stavu, tj. jednočásticový Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ má dimenzi 1 (částici se myslí foton, nikoli LHO). Fotony jsou bosony a může jich být v módu (tj. stejném jednočásticovém stavu) libovolný počet. $|0\rangle$ představuje vakuový stav, kdy v módu nejsou žádné fotony. Kreační operátor přidá do módu jeden foton, anihilační jeden ubere. Stav $|n\rangle$ odpovídá situaci, kdy je v módu n fotonů. Operátor $\hat{N}$ lze interpretovat jako operátor počtu fotonů v tomto módu.

15.4 Bosonové kreační a anihilační operátory

Pro bosony zavedeme kreační a anihilační operátory módů $|\phi_k\rangle$ analogicky jako pro LHO (kde máme jen jeden jednočásticový stav). Kreační operátor $\hat{a}_k^\dagger$ přidá jednu částici ve stavu $|\phi_k\rangle$, působí tedy na bazické stavy (15.5) následovně

$$\hat{a}_k^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; S\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_1, n_2, \dots, n_k + 1, \dots; S\rangle. \quad (15.7)$$

Anihilační operátor $\hat{a}_k$ ubere jednu částici ve stavu $|\phi_k\rangle$, tj. jeho akce na bazické stavy (15.5) je

$$\hat{a}_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; S\rangle = \sqrt{n_k} |n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots; S\rangle. \quad (15.8)$$

Vidíme, že takto definované operátory jsou k sobě opravdu hermitovsky sdružené

$$\underbrace{\langle n'_1, \dots, n'_k, \dots; S | \hat{a}_k | n_1, \dots, n_k, \dots; S \rangle}_{\sqrt{n_k} \delta_{n'_1 n_1} \dots \delta_{n'_k n_k - 1} \dots} = \underbrace{\langle n_1, \dots, n_k, \dots; S | \hat{a}_k^\dagger | n'_1, \dots, n'_k, \dots; S \rangle^*}_{\sqrt{n'_k + 1} \delta_{n_1 n'_1} \dots \delta_{n_k n'_k + 1} \dots}.$$

Evidentně platí komutační relace

$$[\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger] = [\hat{a}_k, \hat{a}_l] = 0, \quad (15.9)$$

protože pro všechny bazické vektory platí

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger] |n_1, \dots, n_k, \dots, n_l, \dots; S\rangle &= \sqrt{(n_k + 1)(n_l + 1)} |n_1, \dots, n_k + 1, \dots, n_l + 1, \dots; S\rangle \\ &\quad - \sqrt{(n_k + 1)(n_l + 1)} |n_1, \dots, n_k + 1, \dots, n_l + 1, \dots; S\rangle \\ &= 0, \end{aligned}$$

a druhá identita je jen hermitovské sdružení první. Odmocniny na pravých stranách (15.7) a (15.8) jsou zvoleny tak, že platí komutační relace

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger] = \delta_{kl}. \quad (15.10)$$

Pro $k \neq l$ dostaneme

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger \right] |n_1, \dots, n_k, \dots, n_l, \dots; S\rangle &= \sqrt{n_k(n_l+1)} |n_1, \dots, n_k-1, \dots, n_l+1, \dots; S\rangle \\ &\quad - \sqrt{n_k(n_l+1)} |n_1, \dots, n_k-1, \dots, n_l+1, \dots; S\rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

Pro $k = l$ nalezneme

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger \right] |n_1, \dots, n_k, \dots; S\rangle &= \sqrt{(n_k+1)^2} |n_1, \dots, n_k, \dots; S\rangle \\ &\quad - \sqrt{n_k^2} |n_1, \dots, n_k, \dots; S\rangle \\ &= |n_1, \dots, n_k, \dots; S\rangle, \end{aligned}$$

a protože rovnost platí pro všechny bazické stavy, platí komutační relace (15.10).

Vakuový stav splňuje pro všechny anihilační operátory vztah

$$\hat{a}_k |0\rangle = 0.$$

Fockovské stavy (15.5) můžeme z vakuového stavu generovat pomocí kreačních operátorů

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; S\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \hat{a}_1^{\dagger n_1} \hat{a}_2^{\dagger n_2} \dots |0\rangle.$$

Fockův prostor bosonů lze tedy zapsat jako

$$\mathcal{F}_B(\mathcal{H}) = \left[\left(\prod_k \frac{\hat{a}_k^{\dagger n_k}}{\sqrt{n_k!}} \right) |0\rangle \middle| \sum_k n_k < \infty \right]_\lambda.$$

Operátor

$$\hat{N}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$$

určuje počet částic ve stavu $|\phi_k\rangle$

$$\hat{N}_k |n_1, \dots, n_k, \dots; S\rangle = \sqrt{n_k^2} |n_1, \dots, n_k, \dots; S\rangle = n_k |n_1, \dots, n_k, \dots; S\rangle.$$

Zjevně jsou $\hat{a}_k$ a $\hat{a}_k^\dagger$ posunovacími operátory k $\hat{N}_k$

$$\begin{aligned} \left[\hat{N}_k, \hat{a}_l \right] &= \hat{a}_k^\dagger \underbrace{[\hat{a}_k, \hat{a}_l]}_0 + \underbrace{[\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l]}_{-\delta_{kl}} \hat{a}_k = -\hat{a}_l \delta_{kl}, \\ \left[\hat{N}_k, \hat{a}_l^\dagger \right] &= \hat{a}_k^\dagger \underbrace{[\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger]}_{\delta_{kl}} + \underbrace{[\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger]}_0 \hat{a}_k = \hat{a}_l^\dagger \delta_{kl}. \end{aligned}$$

Operátor celkového počtu částic pak definujeme pomocí

$$\hat{N} = \sum_k \hat{N}_k = \sum_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k.$$

Fermionové kreační a anihilační operátory

Pro fermiony definujeme kreační operátor $\hat{b}_k^\dagger$ tak, že přidá částici ve stavu $|\phi_k\rangle$ nalevo od již existujících stavů, tj. (pro $\sum_i n_i = N$) platí

$$\begin{aligned}\hat{b}_k^\dagger |n_1, \dots, 0_k, \dots; A\rangle &= \sqrt{N!} |\phi_k\rangle \otimes \hat{A} (|\phi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes |\phi_2\rangle^{\otimes n_2} \otimes \dots) \\ &= \sqrt{(N+1)!} \hat{A} (|\phi_k\rangle \otimes |\phi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes |\phi_2\rangle^{\otimes n_2} \otimes \dots) \\ &= (-1)^{\sum_{j=1}^k n_j} \sqrt{(N+1)!} \hat{A} (|\phi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes |\phi_2\rangle^{\otimes n_2} \otimes \dots \otimes |\phi_k\rangle \otimes \dots) \\ &= (-1)^{\sum_{j=1}^{k-1} n_j} |n_1, \dots, 1_k, \dots; A\rangle.\end{aligned}$$

Suma počítá, kolik módů před $|\phi_k\rangle$ je obsazených. Pro případ $n_k = 1$ definujeme

$$\hat{b}_k^\dagger |n_1, \dots, 1_k, \dots; A\rangle = 0.$$

Anihilační operátor definujeme přes hermitovské sdružení vztahem

$$\hat{b}_k |n_1, \dots, n_k, \dots; A\rangle = \begin{cases} 0, & n_k = 0 \\ (-1)^{\sum_{j=1}^{k-1} n_j} |n_1, \dots, n_k - 1, \dots; A\rangle, & n_k = 1. \end{cases}$$

Snadno ukážeme, že fermionové operátory splňují antikomutační relace

$$\{\hat{b}_j^\dagger, \hat{b}_k^\dagger\} = \{\hat{b}_j, \hat{b}_k\} = 0. \quad (15.11)$$

Pro případ $j = k$ je $\{\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_k^\dagger\} = 2\hat{b}_k^{\dagger 2}$, a vztah plyne přímo z definic

$$\{\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_k^\dagger\} |n_1, \dots, n_k, \dots; A\rangle = \begin{cases} 0, & n_k = 1 \\ 2\hat{b}_k^\dagger |n_1, \dots, 1_k, \dots; A\rangle = 0, & n_k = 0 \end{cases}.$$

Pro $j \neq k$ uvažujme bez újmy na obecnosti $j < k$. Pak platí (stačí vzít stav s $n_j = n_k = 0$, jinak dostaneme automaticky nulu)

$$\begin{aligned}\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k^\dagger |n_1, \dots, 0_j, \dots, 0_k, \dots; A\rangle &= (-1)^{\sum_{l=1}^{j-1} n_l} (-1)^{\sum_{i=1}^{k-1} n_i} |n_1, \dots, 1_j, \dots, 1_k, \dots; A\rangle \\ &= (-1)^{\sum_{i=j}^{k-1} n_i} |n_1, \dots, 1_j, \dots, 1_k, \dots; A\rangle.\end{aligned}$$

V opačném pořadí platí

$$\begin{aligned}\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_j^\dagger |n_1, \dots, 0_j, \dots, 0_k, \dots; A\rangle &= (-1)^{\left(\sum_{l=1}^{k-1} n_l\right)+1} (-1)^{\sum_{i=1}^{j-1} n_i} |n_1, \dots, 1_j, \dots, 1_k, \dots; A\rangle \\ &= -(-1)^{\sum_{i=j}^{k-1} n_i} |n_1, \dots, 1_j, \dots, 1_k, \dots; A\rangle.\end{aligned}$$

Ve všech případech můžeme zapsat rovnost

$$\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k^\dagger |n_1, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots; A\rangle = -\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_j^\dagger |n_1, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots; A\rangle,$$

ze které plynou antikomutační relace (15.11). Analogickým postupem se ukáže, že platí

$$\{\hat{b}_j, \hat{b}_k^\dagger\} = \delta_{jk}. \quad (15.12)$$

Antisymetrizace stavů pro fermiony tedy implikuje antikomutační relace pro kreační a anihilační operátory. Pauliho princip je schován v identitě

$$\{\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_k^\dagger\} = 2\hat{b}_k^{\dagger 2} = 0 \implies \hat{b}_k^{\dagger 2} = 0.$$

Pro vakuový stav fermionů platí stejně jako pro bosony rovnosti

$$\hat{b}_k |0\rangle = 0.$$

Fockovské stavy (15.6) vytvoříme z vakua pomocí kreačních operátorů

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; A\rangle = \hat{b}_1^{\dagger n_1} \hat{b}_2^{\dagger n_2} \dots |0\rangle,$$

na rozdíl od bosonů zde závisí na pořadí kreačních operátorů. Fockův prostor fermionů lze zapsat jako

$$\mathcal{F}_F(\mathcal{H}) = \left[\left(\prod_k \hat{b}_k^{\dagger n_k} \right) |0\rangle \left| \sum_k n_k < \infty, n_k = 0, 1 \right. \right]_\lambda.$$

Operátor počtu částic ve stavu $|\phi_k\rangle$ je roven

$$\hat{N}_k = \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k,$$

$\hat{b}_k$ a $\hat{b}_k^\dagger$ jsou k němu posunovací operátory (využijeme identitu $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\{\hat{B}, \hat{C}\} - \{\hat{C}, \hat{A}\}\hat{B}$)

$$\begin{aligned} [\hat{N}_k, \hat{b}_l] &= \hat{b}_k^\dagger \underbrace{\{\hat{b}_k, \hat{b}_l\}}_0 - \underbrace{\{\hat{b}_l, \hat{b}_k^\dagger\}}_{\delta_{kl}} \hat{b}_k = -\hat{b}_l \delta_{kl}, \\ [\hat{N}_k, \hat{b}_l^\dagger] &= \hat{b}_k^\dagger \underbrace{\{\hat{b}_k, \hat{b}_l^\dagger\}}_{\delta_{kl}} - \underbrace{\{\hat{b}_l^\dagger, \hat{b}_k^\dagger\}}_0 \hat{b}_k = \hat{b}_l^\dagger \delta_{kl}. \end{aligned}$$

V případě fermionů je $\hat{N}_k$ projektor

$$\hat{N}_k^2 = \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k = \hat{b}_k^\dagger \left(\underbrace{\{\hat{b}_k, \hat{b}_k^\dagger\}}_1 - \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \right) \hat{b}_k = \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k - \underbrace{\hat{b}_k^{\dagger 2}}_0 \hat{b}_k = \hat{N}_k,$$

tj. jeho vlastní čísla jsou 0 a 1 v souladu s Pauliho principem. Operátor celkového počtu částic pak definujeme pomocí

$$\hat{N} = \sum_k \hat{N}_k = \sum_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k.$$

15.5 Pozorovatelné ve Fockově prostoru

Pozorovatelné ve Fockově prostoru lze rovněž zapsat pomocí kreačních a anihilačních operátorů. Postup je stejný pro bosony i fermiony, označíme souhrnně jejich kreační a anihilační operátory jako $\hat{c}_k^\dagger$ a $\hat{c}_k$. Začneme s jednočásticovými operátory. Nechť $\hat{T}$ je nějaká pozorovatelná jedné částice, tj. operátor na $\mathcal{H}$. V bázi jednočásticových stavů $\{|\phi_k\rangle\}$ ho můžeme rozepsat ve tvaru

$$\hat{T} = \sum_{k,k'} \langle \phi_k | \hat{T} | \phi_{k'} \rangle |\phi_k\rangle \langle \phi_{k'}|. \quad (15.13)$$

Pro N identických částic pozorovatelnou rozšíříme předpisem

$$\hat{T}^{(1)} = \sum_{l=1}^N \hat{I}_1 \otimes \dots \otimes \hat{I}_{l-1} \otimes \hat{T} \otimes \hat{I}_{l+1} \otimes \dots \otimes \hat{I}_N.$$

Pokud máme částice v jednočásticových stavech $|\phi_{k_1}\rangle, \dots, |\phi_{k_N}\rangle$, pak na ně tento operátor působí následovně ($\hat{P} = \hat{S}, \hat{A}$ pro bosony, resp. fermiony)

$$\hat{T}^{(1)} \hat{P} |\phi_{k_1}, \dots, \phi_{k_i}, \dots, \phi_{k_N}\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{l_i} \langle \phi_{l_i} | \hat{T} | \phi_{k_i} \rangle \hat{P} |\phi_{k_1}, \dots, \phi_{l_i}, \dots, \phi_{k_N}\rangle. \quad (15.14)$$

Ukážeme, že tento operátor lze na Fockově prostoru definovat pomocí kreačních a anihilačních operátorů ve tvaru

$$\hat{T}^{(1)} = \sum_{k,k'} \langle \phi_k | \hat{T} | \phi_{k'} \rangle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'}. \quad (15.15)$$

Přepíšeme nejprve stav identických částic pomocí kreačních operátorů

$$\hat{P} |\phi_{k_1}, \dots, \phi_{k_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{c}_{k_1}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle,$$

dosadíme ho spolu s (15.15) do (15.14). Operátor $\hat{T}^{(1)}$ budeme postupně komutovat skrz kreační operátory

$$\begin{aligned} \hat{T}^{(1)} \hat{c}_{k_1}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle &= \left[\hat{T}^{(1)}, \hat{c}_{k_1}^\dagger \right] \hat{c}_{k_2}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle + \hat{c}_{k_1}^\dagger \hat{T}^{(1)} \hat{c}_{k_2}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle = \dots \\ &= \left[\hat{T}^{(1)}, \hat{c}_{k_1}^\dagger \right] \hat{c}_{k_2}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle + \hat{c}_{k_1}^\dagger \left[\hat{T}^{(1)}, \hat{c}_{k_2}^\dagger \right] \hat{c}_{k_3}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle + \dots + \\ &\quad \hat{c}_{k_1}^\dagger \dots \hat{c}_{k_{N-1}}^\dagger \left[\hat{T}^{(1)}, \hat{c}_{k_N}^\dagger \right] |0\rangle + \hat{c}_{k_1}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N}^\dagger \hat{T}^{(1)} |0\rangle. \end{aligned} \quad (15.16)$$

Poslední člen, kde je $\hat{T}^{(1)}$ úplně vpravo, dá na vakuový stav nulu (v $\hat{T}^{(1)}$ je vpravo anihilační operátor). U předchozích členů určíme z tvaru (15.15) komutátor (platí pro bosony i fermiony)

$$\left[\hat{T}^{(1)}, \hat{c}_i^\dagger \right] = \sum_{k,k'} \langle \phi_k | \hat{T} | \phi_{k'} \rangle \underbrace{\left[\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'}, \hat{c}_i^\dagger \right]}_{\hat{c}_k^\dagger \delta_{k'i}} = \sum_k \langle \phi_k | \hat{T} | \phi_i \rangle \hat{c}_k^\dagger.$$

Dosažením do (15.16) dostaneme

$$\begin{aligned}\hat{T}^{(1)}\hat{c}_{k_1}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle &= \sum_{l_1} \langle \phi_{l_1} | \hat{T} | \phi_{k_1} \rangle \hat{c}_{l_1}^\dagger \hat{c}_{k_2}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle + \sum_{l_2} \langle \phi_{l_2} | \hat{T} | \phi_{k_2} \rangle \hat{c}_{k_1}^\dagger \hat{c}_{l_2}^\dagger \hat{c}_{k_3}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle + \dots \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{l_i} \langle \phi_{l_i} | \hat{T} | \phi_{k_i} \rangle \hat{c}_{k_1}^\dagger \dots \hat{c}_{l_i}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle,\end{aligned}$$

takže operátor (15.15) skutečně splňuje rovnici (15.14). Ve Fockově prostoru mají tedy jednočásticové operátory tvar (15.15). Porovnáním (15.15) a (15.13) vidíme, že operátor ve Fockově prostoru dostaneme formálně záměnou

$$|\phi_k\rangle \rightarrow \hat{c}_k^\dagger, \quad \langle \phi_{k'} | \rightarrow \hat{c}_{k'}.$$

Operátor počtu částic v módu $|\phi_k\rangle$ $\hat{N}_k = \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$ lze chápat jako jednočásticový operátor, kde $\hat{T}$ je projektor na stav $|\phi_k\rangle$. Pro operátor celkového počtu částic $\hat{N} = \sum_k \hat{N}_k$ je $\hat{T} = \hat{I}$.

Obdobným způsobem lze převést do Fockova prostoru i vícečásticové operátory, které zachovávají počet částic. Uvažujme např. operátor $\hat{V}$ definovaný v dvoučásticovém prostoru $\mathcal{H}_{S/A}^{(2)}$

$$\hat{V} = \frac{1}{2!} \sum_{k,k'} \sum_{l,l'} \langle \phi_k, \phi_l | \hat{V} | \phi_{k'}, \phi_{l'} \rangle |\phi_k, \phi_l\rangle \langle \phi_{k'}, \phi_{l'}|.$$

Symetrie vůči záměně částic pro maticové elementy implikuje

$$\langle \phi_k, \phi_l | \hat{V} | \phi_{k'}, \phi_{l'} \rangle = \langle \phi_l, \phi_k | \hat{V} | \phi_{l'}, \phi_{k'} \rangle.$$

Ve Fockově prostoru pak dvoučásticový operátor bude mít tvar

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2!} \sum_{k,k'} \sum_{l,l'} \langle \phi_k, \phi_l | \hat{V} | \phi_{k'}, \phi_{l'} \rangle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l'} \hat{c}_{k'}. \quad (15.17)$$

V dalším považujeme módy $|\phi_k\rangle$ za vlastní stavy jednočásticového volného hamiltoniánu (bez vnějšího pole)

$$\hat{H}_0 |\phi_k\rangle = E_k |\phi_k\rangle, \quad \hat{H}_0 = \sum_k E_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k|.$$

Pokud částice mezi sebou neinteragují, pak má hamiltonián ve Fockově prostoru tvar

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k = \sum_k E_k \hat{N}_k.$$

Pro bosony i fermiony jsou $\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_i$ posunovací operátory k hamiltoniánu $\hat{H}$

$$\begin{aligned}[\hat{H}, \hat{c}_i^\dagger] &= \sum_k E_k \underbrace{[\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k, \hat{c}_i^\dagger]}_{\hat{c}_k^\dagger \delta_{ki}} = E_i \hat{c}_i^\dagger, \\ [\hat{H}, \hat{c}_i] &= \sum_k E_k \underbrace{[\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k, \hat{c}_i]}_{-\hat{c}_k \delta_{ki}} = -E_i \hat{c}_i.\end{aligned}$$

Vliv nějakého vnějšího pole U je popsáný jednočásticovým operátorem

$$\hat{U}^{(1)} = \sum_{k,k'} \langle \phi_k | \hat{U} | \phi_{k'} \rangle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'},$$

kde $\hat{U}$ má typicky nenulové nediagonální maticové elementy. V časovém vývoji takový operátor způsobuje přechod částice mezi hladinami volného hamiltoniánu. Interakce dvou částic je popsána nějakým dvoučásticovým operátorem tvaru (15.17). Obecně lze hamiltonián nerozlišitelných částic ve vnějším poli, zahrnující dvoučásticové interakce, zapsat ve Fockově prostoru následovně

$$\hat{H} = \sum_{k,k'} \varepsilon_{kk'} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'} + \frac{1}{2!} \sum_{k,k'} \sum_{l,l'} v_{kl,k'l'} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_{l'} \hat{c}_{k'}.$$

Analogicky lze zahrnout i vícečásticové interakce.

15.6 Spojité stupně volnosti

Místo spočetné báze $\{|\phi_k\rangle\}$ v jednočásticovém prostoru $\mathcal{H}$ lze uvažovat spojitou bázi. Typicky se volí zobecněné vlastní vektory hybnosti a projekce spinu $\{|\vec{p}, \xi\rangle\}$ normalizované k delta funkci

$$\langle \vec{p}, \xi | \vec{p}', \xi' \rangle = \delta_{\xi, \xi'} \delta(\vec{p} - \vec{p}').$$

Příslušné kreační a anihilační operátory označíme jako $\hat{a}_{\vec{p}, \xi}^\dagger, \hat{a}_{\vec{p}, \xi}$ pro bosony a $\hat{b}_{\vec{p}, \xi}^\dagger, \hat{b}_{\vec{p}, \xi}$ pro fermiony, např. operátor $\hat{a}_{\vec{p}, \xi}^\dagger$ vytvoří z vakua boson s hybností $\vec{p}$ a projekcí spinu ξ (χ_ξ popisuje spinový stav)

$$\langle \vec{x} | \hat{a}_{\vec{p}, \xi}^\dagger | 0 \rangle = \psi_{\vec{p}, \xi}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar^{\frac{3}{2}})} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \chi_\xi.$$

V komutačních relacích pro bosony (15.9), (15.10), resp. antikomutačních relacích pro fermiony (15.11), (15.12), se Kroneckerovo δ nahradí Diracovou δ -funkcí

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}_{\vec{p}, \xi}^\dagger, \hat{a}_{\vec{p}', \xi'}^\dagger \right] &= \left[\hat{a}_{\vec{p}, \xi}, \hat{a}_{\vec{p}', \xi'}^\dagger \right] = 0, & \left[\hat{a}_{\vec{p}, \xi}, \hat{a}_{\vec{p}', \xi'} \right] &= \delta_{\xi, \xi'} \delta(\vec{p} - \vec{p}'), \\ \left\{ \hat{b}_{\vec{p}, \xi}^\dagger, \hat{b}_{\vec{p}', \xi'}^\dagger \right\} &= \left\{ \hat{b}_{\vec{p}, \xi}, \hat{b}_{\vec{p}', \xi'}^\dagger \right\} = 0, & \left\{ \hat{b}_{\vec{p}, \xi}, \hat{b}_{\vec{p}', \xi'} \right\} &= \delta_{\xi, \xi'} \delta(\vec{p} - \vec{p}'). \end{aligned} \quad (15.18)$$

Operátor počtu částic s hybností $\vec{p}$ a projekcí spinu ξ je (pro bosony i fermiony, $\hat{c}_{\vec{p}, \xi} \equiv \hat{a}_{\vec{p}, \xi}, \hat{b}_{\vec{p}, \xi}$)

$$\hat{N}_{\vec{p}, \xi} = \hat{c}_{\vec{p}, \xi}^\dagger \hat{c}_{\vec{p}, \xi}$$

Operátor celkového počtu částic dostaneme integrací přes hybnosti a sumací přes spinové stavy

$$\hat{N} = \sum_{\xi} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{c}_{\vec{p}, \xi}^\dagger \hat{c}_{\vec{p}, \xi} d^3 p.$$

Pro volné částice je jednočasticový hamiltonián

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2M}.$$

Pokud částice navíc neinteragují, pak celkový hamiltonián na Fockově prostoru je

$$\hat{H} = \sum_{\xi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{p^2}{2M} \hat{c}_{\vec{p},\xi}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{p},\xi} d^3p.$$

15.7 Fockův prostor pro různé částice

Fockův prostor pro různé druhy částic sestavíme tenzorovým součinem jednotlivých Fockových prostorů

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_B(\mathcal{H}_1) \otimes \dots \otimes \mathcal{F}_B(\mathcal{H}_{N_B}) \otimes \mathcal{F}_F(\tilde{\mathcal{H}}_1) \otimes \dots \otimes \mathcal{F}_F(\tilde{\mathcal{H}}_{N_F}),$$

kde N_B je počet druhů bosonů a N_F je počet druhů fermionů, $\mathcal{H}_i$ a $\tilde{\mathcal{H}}_i$ jsou příslušné jednočasticové prostory. Označíme kreační a anihilační operátory bosonu λ jako $\hat{a}_{\lambda,k}^{\dagger}$, $\hat{a}_{\lambda,k}$, pro fermion σ analogicky $\hat{b}_{\sigma,k}^{\dagger}$, $\hat{b}_{\sigma,k}$. Komutační a antikomutační relace pak mají tvar

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}_{\lambda,k}^{\dagger}, \hat{a}_{\lambda',k'}^{\dagger} \right] &= \left[\hat{a}_{\lambda,k}, \hat{a}_{\lambda',k'} \right] = 0, & \left[\hat{a}_{\lambda,k}, \hat{a}_{\lambda',k'}^{\dagger} \right] &= \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{kk'}, \\ \left\{ \hat{b}_{\sigma,k}^{\dagger}, \hat{b}_{\sigma',k'}^{\dagger} \right\} &= \left\{ \hat{b}_{\sigma,k}, \hat{b}_{\sigma',k'} \right\} = 0, & \left\{ \hat{b}_{\sigma,k}, \hat{b}_{\sigma',k'}^{\dagger} \right\} &= \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'}, \end{aligned}$$

přičemž všechny bosonové a fermionové operátory navzájem komutují

$$\left[\hat{a}_{\lambda,k}^{\dagger}, \hat{b}_{\sigma',k'}^{\dagger} \right] = \left[\hat{a}_{\lambda,k}, \hat{b}_{\sigma',k'}^{\dagger} \right] = \left[\hat{a}_{\lambda,k}^{\dagger}, \hat{b}_{\sigma',k'} \right] = \left[\hat{a}_{\lambda,k}, \hat{b}_{\sigma',k'} \right] = 0.$$

Hamiltonián takového systému může obsahovat, kromě členů popisujících jednotlivé druhy částic samostatně, i členy popisující interakci různých druhů částic, např.

$$\hat{a}_k^{\dagger} \hat{b}_k + \hat{a}_k \hat{b}_k^{\dagger}$$

popisuje anihilaci fermionu za kreaace bosonu a opačný proces; člen

$$\hat{a}_{1,k}^{\dagger} \hat{a}_{2,k} \hat{a}_{3,k} + \hat{a}_{1,k} \hat{a}_{2,k}^{\dagger} \hat{a}_{3,k}^{\dagger}$$

popisuje anihilaci bosonů 2 a 3 a kreaci bosonu 1 + opačný proces, atd.

15.8 Příklady

Cvičení 52. Fermionový systém o dvou jednočásticových stavech $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ lze popsat hamiltoniánem

$$\hat{H} = E_1 \hat{b}_1^\dagger \hat{b}_1 + E_2 \hat{b}_2^\dagger \hat{b}_2 + J(\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_2 + \hat{b}_2^\dagger \hat{b}_1). \quad (15.19)$$

Můžeme na něj též pohlížet jako na systém složený ze dvou interagujících podsystémů, spojených s hladinami 1 a 2, z nichž každý může být ve stavu „obsazeno“ nebo „neobsazeno“. Uvažujte $E_1 = 0$, $E_2 = \frac{3}{2}J$. Nalezněte energie systému. Určete časový vývoj počátečního stavu

$$|\psi(0)\rangle = \hat{b}_1^\dagger |0\rangle = |1, 0\rangle. \quad (15.20)$$

Návod: V tomto případě má Fockův prostor dimenzi 4, jeho bázi tvoří stavy $\{|0, 0\rangle, |0, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, 1\rangle\}$. V této bázi je hamiltonián $\hat{H}$ popsán maticí

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & J & 0 \\ 0 & J & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_1 + E_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J & 0 \\ 0 & J & \frac{3}{2}J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{3}{2}J \end{pmatrix}.$$

Energie systému fermionů jsou vlastní čísla této matice

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{2}J, 0, \frac{3}{2}J, 2J.$$

Jednočásticový podprostor $[|0, 1\rangle, |1, 0\rangle]_\lambda$ je zřejmě invariantní, zúžení hamiltoniánu na tento podprostor je dáno maticí

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & J \\ J & \frac{3}{2}J \end{pmatrix}.$$

Časovým vývojem se počáteční stav (15.20) z invariantního podprostoru nedostane. V každém čase $t > 0$ tak bude ve stavu superpozice

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|1, 0\rangle + \beta(t)|0, 1\rangle,$$

kde koeficienty se řídí Schrödingerovou rovnicí s hamiltoniánem H'

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = H' \psi(t), \quad \psi(t) = \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}, \quad (15.21)$$

s počáteční podmínkou $\alpha(0) = 1$, $\beta(0) = 0$. Vlastní čísla a vlastní vektory matice H' jsou

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, & \mathcal{E}_1 &= 2J, \\ \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}, & \mathcal{E}_2 &= -\frac{1}{2}J. \end{aligned}$$

Řešením (15.21) je

$$\psi(t) = (\psi_1, \psi(0)) \psi_1 e^{-\frac{2i}{\hbar} Jt} + (\psi_2, \psi(0)) \psi_2 e^{\frac{i}{2\hbar} Jt} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} e^{-\frac{2i}{\hbar} Jt} + 4e^{\frac{i}{2\hbar} Jt} \\ 2e^{-\frac{2i}{\hbar} Jt} - 2e^{\frac{i}{2\hbar} Jt} \end{pmatrix},$$

což můžeme přepsat jako

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{5} \left(e^{-\frac{2i}{\hbar} Jt} + 4e^{\frac{i}{2\hbar} Jt} \right) |1, 0\rangle + \frac{2}{5} \left(e^{-\frac{2i}{\hbar} Jt} - e^{\frac{i}{2\hbar} Jt} \right) |0, 1\rangle.$$

Cvičení 53. Uvažujte bosonový systém se třemi typy částic (a, b, c), každá má pouze jeden mód. Hamiltonián systému je

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{b} \hat{c} + \hat{a} \hat{b}^\dagger \hat{c}^\dagger), \quad (15.22)$$

Nastává tedy rozpad částice a na částice b a c a jejich rekombinace. Uvažujte časový vývoj systému z počátečního stavu

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^{\dagger 2} |0\rangle = |2, 0, 0\rangle.$$

Ukažte, že stav zůstává v nějakém konečněrozměrném podprostoru Fockova prostoru, určete matici hamiltoniánu v tomto invariantním podprostoru a nalezněte $|\psi(t)\rangle$.

Návod: Invariantní prostor nalezneme opakovanou aplikací $\hat{H}$ na počáteční stav

$$\begin{aligned} \hat{H}|2, 0, 0\rangle &= \sqrt{2}|1, 1, 1\rangle, \\ \hat{H}|1, 1, 1\rangle &= \sqrt{2}|2, 0, 0\rangle + 2|0, 2, 2\rangle, \\ \hat{H}|0, 2, 2\rangle &= 2|1, 1, 1\rangle. \end{aligned} \quad (15.23)$$

Odsud je zřejmé, že lineární obal $S = [|2, 0, 0\rangle, |1, 1, 1\rangle, |0, 2, 2\rangle]_\lambda$ je invariantní vůči $\hat{H}$. Označíme H' matici zúžení hamiltoniánu na invariantní podprostor, její tvar odvodíme z rovnic (15.23)

$$H' \equiv \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (15.24)$$

Vlastní čísla a vlastní vektory matice jsou

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, & E_1 &= 0, \\ \psi_2 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, & E_2 &= \sqrt{6}\hbar\omega, \\ \psi_3 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, & E_3 &= -\sqrt{6}\hbar\omega. \end{aligned}$$

Časový vývoj počátečního stavu je pak $(\psi(0) = (1, 0, 0)^T)$

$$\begin{aligned}\psi(t) &= (\psi_1, \psi(0)) \psi_1 + (\psi_2, \psi(0)) \psi_2 e^{-i\sqrt{6}\omega t} + (\psi_3, \psi(0)) \psi_3 e^{i\sqrt{6}\omega t} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{2}{3} + \frac{1}{6} (e^{-i\sqrt{6}\omega t} + e^{i\sqrt{6}\omega t}) \\ \frac{1}{2\sqrt{3}} (e^{-i\sqrt{6}\omega t} - e^{i\sqrt{6}\omega t}) \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} + \frac{1}{3\sqrt{2}} (e^{-i\sqrt{6}\omega t} + e^{i\sqrt{6}\omega t}) \end{pmatrix},\end{aligned}$$

což lze po úpravách přepsat do tvaru

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{3} \left(2 + \cos(\sqrt{6}\omega t) \right) |2, 0, 0\rangle - \frac{i}{\sqrt{3}} \sin(\sqrt{6}\omega t) |1, 1, 1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3} \left(\cos(\sqrt{6}\omega t) - 1 \right) |0, 2, 2\rangle.$$

Cvičení 54. Uvažujte systém bosonů (a) a fermionů (b), každý s jedním módem. Najděte spektrum hamiltoniánu

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{b} + \hat{a} \hat{b}^\dagger \right). \quad (15.25)$$

Návod: Nejprve ukážeme, že $\hat{H}$ rozděluje Fockův prostor na dvourozměrné invariantní podprostory (a jeden jednorozměrný), a lze ho tedy reprezentovat blokově diagonální nekonečněrozměrnou maticí. Vyjdeme z akce $\hat{H}$ na stav s obsazovacími čísly $n_a = n \in \mathbb{N}_0, n_b \in \{0, 1\}$:

$$\begin{aligned}\hat{H}|n, 0\rangle &= \hbar\omega\sqrt{n}|n-1, 1\rangle, \\ \hat{H}|n, 1\rangle &= \hbar\omega\sqrt{n+1}|n+1, 0\rangle.\end{aligned}$$

Vidíme, že stavy $|n, 0\rangle$ a $|n-1, 1\rangle$ se zobrazují na sebe navzájem a na jejich lineárním obalu tak $\hat{H}$ působí jako matice 2×2

$$H_n = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{n} \\ \sqrt{n} & 0 \end{pmatrix}.$$

Spektrum této matice je $\sigma(H_n) = \{\pm\hbar\omega\sqrt{n}\}$. Dvojicemi $|n, 0\rangle$ a $|n-1, 1\rangle$ pokryjeme celou bázi Fockova prostoru až na zvláštní případ $|0, 0\rangle$. Ten je vlastním vektorem s vlastním číslem 0 a sám tak tvoří jeden další jednorozměrný invariantní prostor. Celé spektrum Hamiltoniánu (15.25) je tedy

$$\sigma(\hat{H}) = \{0\} \cup \{\pm\sqrt{n}\hbar\omega | n \in \mathbb{N}\}.$$

Kapitola 16

Kanonické kvantování polí

16.1 Přehled klasické teorie pole

Začneme stručným zopakováním základů klasické teorie pole v Lagrangeově formalismu. Prostorčasové souřadnice označíme jako x^μ , $\mu = 0, 1, 2, 3$. Uvažujme s polí (funkcí x^μ) φ^i , $i = 1, \dots, s$, symbolem $\varphi^i_{,\mu}$ budeme značit derivace pole i podle x^μ

$$\varphi^i_{,\mu} = \frac{\partial \varphi^i}{\partial x^\mu}.$$

Hustota Lagrangiánu $\mathcal{L}(\varphi^i, \varphi^i_{,\mu}, x^\mu)$ je nějaká funkce polí, jejich prvních derivací a souřadnic. Langrangián se z hustoty určí integrací přes prostorové souřadnice

$$L = \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{L}(\varphi^i, \varphi^i_{,\mu}, x^\mu) d^3x,$$

akce je daná integrálem přes všechny prostorčasové souřadnice

$$S = \int_{t_0}^{t_f} \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{L}(\varphi^i, \varphi^i_{,\mu}, x^\mu) d^4x.$$

Pohybové rovnice pro pole se určí z variačního principu $\delta S = 0$, který vede na soustavu Euler-Lagrangeových rovnic

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi^i_{,\mu}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi^i} = 0, \quad i = 1, \dots, s.$$

K přechodu ke kvantové teorii budeme potřebovat hustotu hamiltoniánu $\mathcal{H}$, kterou zavedeme jako složku 00 kanonického tenzoru energie a hybnosti

$$\mathcal{T}^{\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi^i_{,\mu}} \varphi^i_{,\nu} - g^{\mu\nu} \mathcal{L}, \quad g^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1).$$

Hustota hamiltoniánu je tedy

$$\mathcal{H} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_{,0}^i} \varphi_{,0}^i - \mathcal{L} = \pi_i \dot{\varphi}^i - \mathcal{L},$$

kde jsme označili obecnou hybnost příslušnou k poli φ^i

$$\pi_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_{,0}^i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}^i}. \quad (16.1)$$

Z hamiltonovské hustoty dostaneme hamiltonián integrací přes prostorové souřadnice

$$H = \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{H} d^3x.$$

16.2 Kvantování Klein-Gordonova pole

Postup kanonického kvantování nejprve ukážeme na reálném skalárním Klein-Gordonově poli φ . Budeme pracovat v jednotkách $c = \hbar = 1$. Hustota lagrangiánu je v tomto případě

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \varphi \partial^\mu \varphi - \frac{1}{2} m^2 \varphi^2 = \frac{1}{2} g^{\mu\nu} \varphi_{,\mu} \varphi_{,\nu} - \frac{1}{2} m^2 \varphi^2,$$

Euler-Lagrangeova rovnice pro pole φ je Klein-Gordonova rovnice

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_{,\mu}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} = \partial_\mu (g^{\mu\nu} \varphi_{,\nu}) + m^2 \varphi = \square \varphi + m^2 \varphi = 0, \quad (16.2)$$

kde $\square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$ je d'Alembertův operátor. Rovnice (16.2) má nekonečně mnoho řešení tvaru rovinné vlny

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)},$$

kde $\omega(\vec{k})$ splňuje podmínku

$$\omega(\vec{k})^2 = \vec{k}^2 + m^2.$$

Obecné reálné řešení Klein-Gordonovy rovnice je tedy

$$\varphi(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3k N(\vec{k}) \left(a_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} + \bar{a}_{\vec{k}} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right), \quad (16.3)$$

kde $N(\vec{k})$ je nějaký normalizační faktor, který později vhodně zvolíme. Obecná hybnost pro Klein-Gordonovo pole je

$$\pi(\vec{x}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_{,0}} = g^{0\nu} \varphi_{,\nu} = \dot{\varphi} = -i \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \omega(\vec{k}) N(\vec{k}) \left(a_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} - \bar{a}_{\vec{k}} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right).$$

Hustotu hamiltoniánu pro Klein-Gordonovo pole můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\mathcal{H} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} \dot{\varphi} - \mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\pi^2 + (\vec{\nabla} \varphi) \cdot (\vec{\nabla} \varphi) + m^2 \varphi^2 \right). \quad (16.4)$$

Kanonické kvantování Klein-Gordonova pole spočívá v tom, že z $\varphi(\vec{x}, t)$, $\pi(\vec{x}, t)$, $a_{\vec{k}}$ a $\bar{a}_{\vec{k}}$ uděláme operátory

$$\varphi(\vec{x}, t) \rightarrow \hat{\varphi}(\vec{x}, t), \quad \pi(\vec{x}, t) \rightarrow \hat{\pi}(\vec{x}, t), \quad a_{\vec{k}} \rightarrow \hat{a}_{\vec{k}}, \quad \bar{a}_{\vec{k}} \rightarrow \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger,$$

postulujeme existenci a jednoznačnost vakuového stavu $|0\rangle$ a kanonické komutační relace ve stejném čase

$$[\hat{\varphi}(\vec{x}, t), \hat{\pi}(\vec{x}', t)] = i\delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad [\hat{\varphi}(\vec{x}, t), \hat{\varphi}(\vec{x}', t)] = 0, \quad [\hat{\pi}(\vec{x}, t), \hat{\pi}(\vec{x}', t)] = 0. \quad (16.5)$$

Dále vyjádříme operátory $\hat{a}_{\vec{k}}$, $\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger$ pomocí $\hat{\varphi}(\vec{x}, t)$, $\hat{\pi}(\vec{x}', t)$, a ukážeme, že pro vhodnou volbu normalizace $N(\vec{k})$ budou splňovat komutační relace pro bosonové anihilační a kreační operátory se spojitými stupni volnosti (15.18). Fockův prostor pro Klein-Gordonovo pole pak zkonstruujeme podle postupu z kapitoly 15. Excitace Klein-Gordonova pole, tj. částice, které vytvoříme kreačními operátory z vakua, jsou bosony s nulovým spinem a bez náboje (pro komplexní Klein-Gordonovo pole bychom dostali nabitě bosony se spinem nula a jejich antičástice s opačným nábojem).

Spočítáme nejprve následující integrál (označíme ve zkratce $\omega = \omega(\vec{k})$, $\omega' = \omega(\vec{k}')$; využijeme toho, že ω je sudá funkce)

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \hat{\varphi}(\vec{x}, t) &= \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k' \, N(\vec{k}') \left(\hat{a}_{\vec{k}'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} + \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} \right) \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3k' \, N(\vec{k}') \left(\hat{a}_{\vec{k}'} e^{it(\omega - \omega')} \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{i\vec{x} \cdot (\vec{k}' - \vec{k})}}_{\delta(\vec{k} - \vec{k}')} + \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger e^{it(\omega + \omega')} \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{-i\vec{x} \cdot (\vec{k}' + \vec{k})}}_{\delta(\vec{k} + \vec{k}')} \right) \\ &= N(\vec{k}) \hat{a}_{\vec{k}} + N(-\vec{k}) \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger e^{2i\omega(\vec{k})t}, \end{aligned}$$

a analogickým postupem

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \hat{\pi}(\vec{x}, t) &= \\ &= -\frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k' \, N(\vec{k}') \omega' \left(\hat{a}_{\vec{k}'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} - \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} \right) \\ &= -iN(\vec{k})\omega(\vec{k})\hat{a}_{\vec{k}} + iN(-\vec{k})\omega(\vec{k})\hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger e^{2i\omega(\vec{k})t}. \end{aligned}$$

Odsud dostaneme

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\vec{k}} &= \frac{1}{2(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \frac{1}{N(\vec{k})} \left(\hat{\varphi}(\vec{x}, t) + \frac{i}{\omega(\vec{k})} \hat{\pi}(\vec{x}, t) \right), \\ \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger &= \frac{1}{2(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \frac{1}{N(\vec{k})} \left(\hat{\varphi}(\vec{x}, t) - \frac{i}{\omega(\vec{k})} \hat{\pi}(\vec{x}, t) \right).\end{aligned}$$

Tyto vztahy dosadíme do komutátoru a použijeme kanonické komutační relace (16.5)

$$\begin{aligned}\left[\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger \right] &= \frac{1}{4(2\pi)^6} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3y \, e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{y} - \omega' t)} \frac{1}{N(\vec{k})N(\vec{k}')} \times \\ &\quad \times \underbrace{\left[\hat{\varphi}(\vec{x}, t) + \frac{i}{\omega} \hat{\pi}(\vec{x}, t), \hat{\varphi}(\vec{y}, t) - \frac{i}{\omega'} \hat{\pi}(\vec{y}, t) \right]}_{\left(\frac{1}{\omega'} + \frac{1}{\omega} \right) \delta(\vec{x} - \vec{y})} \\ &= \frac{1}{4(2\pi)^6} \overbrace{\left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{i\vec{x} \cdot (\vec{k}' - \vec{k})} \right)}^{(2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}')} e^{it(\omega - \omega')} \left(\frac{1}{\omega'} + \frac{1}{\omega} \right) \frac{1}{N(\vec{k})N(\vec{k}')} \\ &= \frac{1}{2(2\pi)^3} \frac{1}{\omega(\vec{k})} \frac{1}{N(\vec{k})^2} \delta(\vec{k} - \vec{k}') \stackrel{!}{=} \delta(\vec{k} - \vec{k}').\end{aligned}$$

Bosonové komutační relace tedy dostaneme pro volbu normalizace

$$N(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2(2\pi)^3 \omega(\vec{k})}}. \quad (16.6)$$

Celkem tedy pro operátory platí

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\vec{k}} &= \frac{1}{\sqrt{2(2\pi)^3 \omega(\vec{k})}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \left(\omega(\vec{k}) \hat{\varphi}(\vec{x}, t) + i \hat{\pi}(\vec{x}, t) \right), \\ \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2(2\pi)^3 \omega(\vec{k})}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \left(\omega(\vec{k}) \hat{\varphi}(\vec{x}, t) - i \hat{\pi}(\vec{x}, t) \right), \\ \hat{\varphi}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2(2\pi)^3}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \, \frac{1}{\sqrt{\omega(\vec{k})}} \left(\hat{a}_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} + \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right), \quad (16.7)\end{aligned}$$

$$\hat{\pi}(\vec{x}, t) = -\frac{i}{\sqrt{2(2\pi)^3}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \, \sqrt{\omega(\vec{k})} \left(\hat{a}_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} - \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right). \quad (16.8)$$

Hamiltonián vyjádříme z hustoty (16.4), kam místo φ a π dosadíme operátory

$$\hat{H} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \mathcal{H} = \underbrace{\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{\pi}^2 d^3x}_{I_1} + \underbrace{\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} (\vec{\nabla} \hat{\varphi}) \cdot (\vec{\nabla} \hat{\varphi}) d^3x}_{I_2} + \underbrace{\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} m^2 \hat{\varphi}^2 d^3x}_{I_3}.$$

Za operátory $\hat{\phi}$ a $\hat{\pi}$ dosadíme z (16.7) a (16.8) a postupně vyjádříme jednotlivé členy

$$\begin{aligned} I_1 &= -\frac{1}{4(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \int_{\mathbb{R}^3} d^3k' \sqrt{\omega\omega'} \left(\hat{a}_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} - \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right) \times \\ &\quad \times \left(\hat{a}_{\vec{k}'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} - \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} \right) \\ &= -\frac{1}{4(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \int_{\mathbb{R}^3} d^3k' \sqrt{\omega\omega'} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \left(\hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}'} e^{i\vec{x} \cdot (\vec{k} + \vec{k}')} e^{-it(\omega + \omega')} - \right. \\ &\quad \left. - \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger e^{i\vec{x} \cdot (\vec{k} - \vec{k}')} e^{it(\omega' - \omega)} - \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'} e^{i\vec{x} \cdot (\vec{k}' - \vec{k})} e^{it(\omega - \omega')} + \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger e^{-i\vec{x} \cdot (\vec{k} + \vec{k}')} e^{it(\omega + \omega')} \right) \\ &= -\frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \omega \left(\hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{-\vec{k}} e^{-2i\omega t} - \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger - \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger e^{2i\omega t} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_2 &= -\frac{1}{4(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \int_{\mathbb{R}^3} d^3k' \frac{\vec{k} \cdot \vec{k}'}{\sqrt{\omega\omega'}} \left(\hat{a}_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} - \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right) \times \\ &\quad \times \left(\hat{a}_{\vec{k}'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} - \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} \right) \\ &= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{k^2}{\omega} \left(\hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{-\vec{k}} e^{-2i\omega t} + \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger + \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger e^{2i\omega t} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_3 &= \frac{m^2}{4(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \int_{\mathbb{R}^3} d^3k' \frac{1}{\sqrt{\omega\omega'}} \left(\hat{a}_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right) \times \\ &\quad \times \left(\hat{a}_{\vec{k}'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} + \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} \right) \\ &= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{m^2}{\omega} \left(\hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{-\vec{k}} e^{-2i\omega t} + \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger + \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger e^{2i\omega t} \right). \end{aligned}$$

V součtu bude u členů, kde jsou dva anihilační nebo dva kreační operátory výraz $\frac{1}{\omega}(-\omega^2 + k^2 + m^2) = 0$, naopak u smíšených členů bude $\frac{1}{\omega}(\omega^2 + k^2 + m^2) = 2\omega$. Hamiltonián Klein-Gordonova pole tedy dostaneme ve tvaru

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \omega(\vec{k}) \left(\hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger + \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \right).$$

Pro další úpravy nejprve uvažujme Klein-Gordonovo pole v krychli o délce hrany L , tj. konečném objemu $V = L^3$. V takovém případě musíme pro Klein-Gordonovu rovnici (16.2) vzít v úvahu periodické okrajové podmínky na stěnách krychle. Důsledkem je diskretizace módů, resp. vlnových vektorů $\vec{k}$, jejichž složky musí splňovat

$$k_j = \frac{2\pi}{L}n_j, \quad n_j \in \mathbb{Z}.$$

Veškerá odvození jsou stejná jako v případě pole v $\mathbb{R}^3$, jen je potřeba nahradit integrál sumou a v normalizačním faktoru (16.6) bude místo $(2\pi)^3$ objem krychle V , tj.

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}},$$

Z kanonických komutačních relací ve stejném čase (16.5) dostaneme bosonové komutační relace pro diskrétní módy

$$[\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}.$$

Hamiltonián Klein-Gordonova pole pak s použitím komutačních relací upravíme do tvaru

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \left(\hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger + \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \right) = \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \left(\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \right). \quad (16.9)$$

Pro takovýto hamiltonián by i vakuový stav měl nekonečnou energii, protože

$$\hat{H}|0\rangle = \left(\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \right) |0\rangle,$$

a řada je divergentní. Tento problém se vyřeší procedurou zvanou renormalizace - v našem případě v sumě (16.9) zahodíme člen $\frac{1}{2}$. Intuitivně lze argumentovat tak, že energie částic, které naměříme, jsou rozdíl energií nějakého Fockovského stavu a vakuového stavu, a tento rozdíl je konečný. Hamiltonián Klein-Gordonova pole pak dostaneme v tzv. normálním uspořádání (anihilační operátory jsou vpravo, značí se dvojtečkami okolo operátoru)

$$\hat{H} \longrightarrow :\hat{H}: = \sum_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}}.$$

V nekonečném objemu pak hamiltonián přejde v

$$:\hat{H}: = \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \, \omega(\vec{k}) \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}}$$

16.3 Kvantování elektromagnetického pole

Podobným postupem provedeme kvantování volného elektromagnetického pole, které je popsáno čtyřpotenciálem $A_\mu = (\frac{\varphi}{c}, -\vec{A})$ (pracujeme v SI jednotkách) a Lagrangeovskou hustotou

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu},$$

kde $F_{\mu\nu}$ je tenzor elektromagnetického pole

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu.$$

Komplikaci představuje kalibrační invariance, ze které plyne, že ne všechny složky čtyřpotenciálu jsou nezávislé. My zvolíme fixní Coulombovu kalibraci, ve které je postup nejjednodušší. Tato volba není vhodná pro relativistickou kvantovou elektrodynamiku, protože Coulombova kalibrace není Lorentzovsky invariantní. Pro náš cíl, kterým je kvantový popis interakce atomů s elektromagnetickým zářením, je ale dostačující.

Euler-Lagrangeovy rovnice pro pole A_μ jsou

$$\partial_\mu \partial^\mu A_\nu - \partial_\nu (\partial^\mu A_\mu) = 0.$$

Pro Coulombovu kalibraci

$$\varphi = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0,$$

se zjednoduší na

$$\square A_\nu = 0, \quad \text{resp.} \quad \square \vec{A} = 0. \quad (16.10)$$

Rovnice má nekonečně mnoho řešení tvaru polarizovaných rovinných vln

$$\vec{A}_{\vec{k}, \vec{\varepsilon}}(\vec{x}, t) = \vec{\varepsilon} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)},$$

kde frekvence je rovna

$$\omega(\vec{k}) = kc, \quad k = |\vec{k}|.$$

Z kalibrační podmínky pro vektor polarizace $\vec{\varepsilon}$ plyne

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \implies \vec{k} \cdot \vec{\varepsilon} = 0.$$

Vektor polarizace tedy musí být kolmý na směr šíření vlny, tj. pro každý vlnový vektor můžeme zvolit dvě ortogonální polarizace $\vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda)$, $\lambda = 1, 2$ splňující

$$\vec{k} \cdot \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) = 0, \quad \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda') = \delta_{\lambda\lambda'}.$$

Obecné (reálné) řešení v podobě kombinace rovinných vln se dvěma možnými polarizacemi, včetně správného normalizačního faktoru, má tvar

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{\lambda=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \left(a_{\vec{k}, \lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} + \overline{a_{\vec{k}, \lambda}} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right). \quad (16.11)$$

Obecné hybnosti jsou až na konstantní faktor složky elektrické intenzity (využili jsme vztahu $\frac{1}{\mu_0 \varepsilon_0} = c^2$)

$$\pi_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_{j,t}} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_{j,0}} = \frac{1}{c\mu_0} (A_{j,0} - \underbrace{A_{0,j}}_0) = -\frac{1}{\mu_0 c^2} \frac{\partial A^j}{\partial t} = \varepsilon_0 E^j.$$

Po dosazení z (16.11) nalezneme

$$\vec{\pi}(\vec{x}, t) = i \sum_{\lambda=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{\hbar \varepsilon_0 \omega(\vec{k})}{2}} \vec{\varepsilon}'(\vec{k}, \lambda) \left(\overline{a_{\vec{k}, \lambda}} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} - a_{\vec{k}, \lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right). \quad (16.12)$$

Hustota hamiltoniánu elektromagnetického pole je ($B_k = \varepsilon_{kij} A_{i,j}$)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_{j,0}} A_{j,0} - \mathcal{L} = c\pi_j A_{j,0} - \frac{1}{4\mu_0} (A_{\nu,\mu} - A_{\mu,\nu})(A^{\nu,\mu} - A^{\mu,\nu}) \\ &= \frac{1}{\varepsilon_0} \pi^2 - \frac{1}{2\mu_0} A_{i,0} A_{i,0} + \frac{1}{4\mu_0} (A_{i,j} - A_{j,i})(A_{i,j} - A_{j,i}) \\ &= \frac{1}{2\varepsilon_0} \pi^2 + \frac{1}{2\mu_0} (A_{i,j} A_{i,j} - A_{i,j} A_{j,i}) = \frac{\varepsilon_0}{2} E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2. \end{aligned}$$

Spočítejme nejprve hamiltonián klasického pole, ten dostaneme integrací hustoty přes prostorové souřadnice

$$H = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \mathcal{H} = \underbrace{\frac{1}{2\varepsilon_0} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \pi^2}_{I_1} + \underbrace{\frac{1}{2\mu_0} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x (A_{i,j} A_{i,j} - A_{i,j} A_{j,i})}_{I_2}.$$

Dosadíme za $\vec{A}$ a $\vec{\pi}$ ze vztahů (16.11), (16.12) a postupně upravíme jednotlivé členy (pro zkrácení zápisu označíme $\omega = \omega(\vec{k})$, $\omega' = \omega(\vec{k}')$, $\vec{\varepsilon} = \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda)$, $\vec{\varepsilon}' = \vec{\varepsilon}(\vec{k}', \lambda')$)

$$\begin{aligned} I_1 &= -\frac{\hbar}{4} \sum_{\lambda, \lambda'=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\omega \omega'} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{\varepsilon}' \left(\overline{a_{\vec{k}, \lambda}} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} - a_{\vec{k}, \lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right) \\ &\quad \times \left(\overline{a_{\vec{k}', \lambda'}} e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} - a_{\vec{k}', \lambda'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{x} - \omega' t)} \right) \\ &= -\frac{\hbar}{4} \sum_{\lambda, \lambda'=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\omega \omega'} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{\varepsilon}' \left(\overline{a_{\vec{k}, \lambda}} \overline{a_{\vec{k}', \lambda'}} e^{-i\vec{x} \cdot (\vec{k} + \vec{k}')} e^{it(\omega + \omega')} - \right. \\ &\quad \left. - \overline{a_{\vec{k}, \lambda}} a_{\vec{k}', \lambda'} e^{-i\vec{x} \cdot (\vec{k} - \vec{k}')} e^{it(\omega - \omega')} - a_{\vec{k}, \lambda} \overline{a_{\vec{k}', \lambda'}} e^{i\vec{x} \cdot (\vec{k} - \vec{k}')} e^{-it(\omega - \omega')} + a_{\vec{k}, \lambda} a_{\vec{k}', \lambda'} e^{i\vec{x} \cdot (\vec{k} + \vec{k}')} e^{-it(\omega + \omega')} \right) \\ &= -\frac{\hbar}{4} \sum_{\lambda=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 k \omega \left(\overline{a_{\vec{k}, \lambda}} \overline{a_{-\vec{k}, \lambda}} e^{2i\omega t} - \overline{a_{\vec{k}, \lambda}} a_{\vec{k}, \lambda} - a_{\vec{k}, \lambda} \overline{a_{\vec{k}, \lambda}} + a_{\vec{k}, \lambda} a_{-\vec{k}, \lambda} e^{-2i\omega t} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_2 &= -\frac{\hbar}{4\mu_0\epsilon_0} \sum_{\lambda,\lambda'=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k'}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{\sqrt{\omega\omega'}} \left(\vec{\epsilon}' \cdot \vec{\epsilon}' \vec{k} \cdot \vec{k}' - \vec{\epsilon}' \cdot \vec{k}' \vec{k} \cdot \vec{\epsilon}' \right) \times \\
&\quad \times \left(a_{\vec{k},\lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} - \overline{a_{\vec{k},\lambda}} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right) \left(a_{\vec{k}',\lambda'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{x}' - \omega' t)} - \overline{a_{\vec{k}',\lambda'}} e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{x}' - \omega' t)} \right) \\
&= \frac{\hbar}{4} \sum_{\lambda,\lambda'=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{k^2 c^2}{\omega} \left(a_{\vec{k},\lambda} a_{-\vec{k},\lambda} e^{-2i\omega t} + a_{\vec{k},\lambda} \overline{a_{\vec{k},\lambda}} + \overline{a_{\vec{k},\lambda}} a_{\vec{k},\lambda} + \overline{a_{\vec{k},\lambda}} \overline{a_{-\vec{k},\lambda}} e^{2i\omega t} \right).
\end{aligned}$$

V součtu bude u členů s $a_{\vec{k},\lambda} a_{-\vec{k},\lambda}$ nebo $\overline{a_{\vec{k},\lambda}} \overline{a_{-\vec{k},\lambda}}$ výraz $\frac{1}{\omega}(\omega^2 - k^2 c^2) = 0$, u smíšených členů pak $\frac{1}{\omega}(\omega^2 + k^2 c^2) = 2\omega$. Hamiltonián klasického elektromagnetického pole tak vyjádříme ve tvaru

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \hbar\omega(\vec{k}) \left(a_{\vec{k},\lambda} \overline{a_{\vec{k},\lambda}} + \overline{a_{\vec{k},\lambda}} a_{\vec{k},\lambda} \right).$$

Jak uvidíme, komutační relace pro operátory pole $\hat{A}(\vec{x}, t)$ a hybností $\hat{\pi}(\vec{x}', t)$ ve stejném čase budou mít složitější podobu než pro Klein-Gordonovo pole (16.5). Kvantování elektromagnetického pole tak provedeme přímo přechodem ke kreačním a anihilačním operátorům

$$a_{\vec{k},\lambda} \rightarrow \hat{a}_{\vec{k},\lambda}, \quad \overline{a_{\vec{k},\lambda}} \rightarrow \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger,$$

a postulujeme pro ně bosonové komutační relace

$$\left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda}, \hat{a}_{\vec{k}',\lambda'}^\dagger \right] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\vec{k} - \vec{k}'), \quad \left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda}, \hat{a}_{\vec{k}',\lambda'} \right] = \left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger, \hat{a}_{\vec{k}',\lambda'}^\dagger \right] = 0. \quad (16.13)$$

Dále postulujeme existenci a jednoznačnost vakuového stavu $|0\rangle$. Kreačním operátorem $\hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger$ z vakuového stavu vytvoříme foton s vlnovým vektorem $\vec{k}$ a polarizací λ . Hamiltonián kvantovaného elektromagnetického pole v dutině zavedeme v normálním uspořádání

$$:\hat{H}: = \sum_{\lambda=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \hbar\omega(\vec{k}) \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k},\lambda}. \quad (16.14)$$

Spočítejme nyní komutátor polí a hybností ve stejném čase. Ve vztazích (16.11) a (16.12) nahradíme $a_{\vec{k},\lambda}$ a $\overline{a_{\vec{k},\lambda}}$ operátory a s použitím komutačních relací (16.13) dostaneme

$$\begin{aligned}
\left[\hat{A}_i(\vec{x}, t), \hat{\pi}_j(\vec{x}', t) \right] &= -i\frac{\hbar}{2} \sum_{\lambda,\lambda'=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k'}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{\omega'}{\omega}} \varepsilon_i \varepsilon'_j \times \\
&\quad \times \left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}, \hat{a}_{\vec{k}',\lambda'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{x}' - \omega' t)} + \hat{a}_{\vec{k}',\lambda'}^\dagger e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{x}' - \omega' t)} \right] \\
&= i\frac{\hbar}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \underbrace{\sum_{\lambda=1}^2 \varepsilon_i(\vec{k}, \lambda) \varepsilon_j(\vec{k}, \lambda)}_{P_{ij}(\vec{k})} \left(e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \right). \quad (16.15)
\end{aligned}$$

Výraz $\varepsilon_i(\vec{k}, \lambda)\varepsilon_j(\vec{k}, \lambda)$ představuje (i, j) -tý prvek matice ortogonálního projektoru na vektor $\vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda)$. Pokud dva jednotkové vektory určující polarizaci doplníme třetím jednotkovým vektorem ve směru $\vec{k}$

$$\vec{\varepsilon}(\vec{k}, 3) = \frac{\vec{k}}{k},$$

pak tyto tři vektory tvoří ON bázi $\mathbb{R}^3$ a platí

$$\sum_{\lambda=1}^3 \varepsilon_i(\vec{k}, \lambda)\varepsilon_j(\vec{k}, \lambda) = \delta_{ij}.$$

Pro $P_{ij}(\vec{k})$ pak dostaneme

$$P_{ij}(\vec{k}) = \delta_{ij} - \varepsilon_i(\vec{k}, 3)\varepsilon_j(\vec{k}, 3) = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}.$$

Je to sudá funkce, takže integrál v (16.15) můžeme přepsat do tvaru

$$\left[\hat{A}_i(\vec{x}, t), \hat{\pi}_j(\vec{x}', t) \right] = i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} P_{ij}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} = i\hbar \delta_{ij}^T(\vec{x} - \vec{x}')$$

kde $\delta_{ij}^T(\vec{x} - \vec{x}')$ značí transverzální δ -funkci

$$\delta_{ij}^T(\vec{x} - \vec{x}') = \delta_{ij}\delta(\vec{x} - \vec{x}') + \frac{1}{4\pi} \partial_i \partial_j \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|}.$$

Na závěr ještě uvedeme výsledky pro kvantování elektromagnetického pole v konečné krychli o hraně délky L . Pro vlnovou rovnici (16.10) musíme uvažovat periodické okrajové podmínky, jejich důsledkem je diskretizace módů, tj.

$$k_j = \frac{2\pi}{L} n_j, \quad n_j \in \mathbb{Z}.$$

Ve vztazích (16.11) a (16.14) musíme nahradit integrál přes vlnový vektor sumou přes diskrétní módy a v normalizačním faktoru bude místo $(2\pi)^3$ objem krychle V . Operátor vektorového potenciálu kvantovaného elektromagnetického pole v krychli je tedy

$$\hat{\vec{A}}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \left(\hat{a}_{\vec{k}, \lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} + \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right). \quad (16.16)$$

Hamiltonián pole je roven

$$:\hat{H}: = \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\vec{k}} \hbar \omega(\vec{k}) \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}, \quad (16.17)$$

a pro kreační a anihilační operátory platí komutační relace

$$\left[\hat{a}_{\vec{k}, \lambda}, \hat{a}_{\vec{k}', \lambda'}^\dagger \right] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}, \quad \left[\hat{a}_{\vec{k}, \lambda}, \hat{a}_{\vec{k}', \lambda'} \right] = \left[\hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger, \hat{a}_{\vec{k}', \lambda'}^\dagger \right] = 0.$$

Kapitola 17

Kvantová teorie interakce hmoty a záření

V této kapitole si probereme interakci kvantovaného elektromagnetického pole s elektronem v atomu. Budou nás zajímat pravděpodobnosti přeskoků mezi vázanými stavy elektronu v atomu. V 1. řádu nestacionární poruchové teorie odvodíme vztahy pro rychlosti emise a absorpce. V dalším se omezíme na dipólovou aproximaci, a odvodíme, k jakým přechodům může v tomto přiblížení docházet. Na závěr se zaměříme na spontánní emisi a ukážeme si explicitní výpočet pro přechod $2p \rightarrow 1s$ pro elektron v atomu vodíku.

17.1 Hamiltonián pole a částice

Uvažujme elektron v atomu s hamiltoniánem

$$\hat{H}_e = \frac{\hat{P}^2}{2m_e} + V_0(\vec{x}),$$

který má vázané stavy $|\psi_j\rangle$ s energií E_j

$$\hat{H}_e|\psi_j\rangle = E_j|\psi_j\rangle. \quad (17.1)$$

Atom bude v krychli o objemu V a v ní uvažujme kvantované elektromagnetické pole s hamiltoniánem tvaru (16.17) (pracujeme v Coulombově kalibraci)

$$\hat{H}_p = \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\vec{k}} \hbar\omega(\vec{k}) \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k},\lambda}.$$

Vlastní stavy hamiltoniánu volného pole jsou Fockovské stavy

$$|n_{\vec{k}_1,\lambda_1}, n_{\vec{k}_2,\lambda_2}, \dots\rangle = \prod_l \frac{\hat{a}_{\vec{k}_l,\lambda_l}^{\dagger n_{\vec{k}_l,\lambda_l}}}{\sqrt{n_{\vec{k}_l,\lambda_l}!}} |0\rangle, \quad (17.2)$$

pro které platí

$$\hat{H}_p |n_{\vec{k}_1, \lambda_1}, n_{\vec{k}_2, \lambda_2}, \dots\rangle = \sum_l \hbar \omega(\vec{k}_l) n_{\vec{k}_l, \lambda_l}.$$

Započítáním interakce pole a atomu dostaneme celkový hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\vec{P}} + e\hat{\vec{A}}(t) \right)^2 + V_0(\vec{x}) + \hat{H}_p = \hat{H}_e + \hat{H}_p + \frac{e}{m_e} \hat{\vec{A}}(t) \cdot \hat{\vec{P}} + \frac{e^2}{2m_e} \hat{A}^2(t),$$

kde $\hat{\vec{A}}$ je operátor vektorového potenciálu kvantovaného pole (16.16) (využili jsme Coulombovy kalibrace, kde $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, takže operátory $\hat{\vec{P}}$ a $\hat{\vec{A}}$ komutují). Člen úměrný $\hat{A}^2$ zanedbáme a celkový hamiltonián zapíšeme ve tvaru

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

kde $\hat{H}_0$ je součet hamiltoniánů elektronu v atomu a volného pole

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_e + \hat{H}_p,$$

a $\hat{V}(t)$ představuje interakční člen

$$\hat{V}(t) = \frac{e}{m_e} \hat{\vec{A}}(t) \cdot \hat{\vec{P}}. \quad (17.3)$$

17.2 Rychlosti emise a absorpce v 1. řádu poruchové teorie

Zaměřme se nyní na pravděpodobnosti přechodu za čas T mezi vlastními stavy hamiltoniánu $\hat{H}_0$

$$|\Psi_i\rangle = |\psi_i\rangle|\phi_i\rangle, \quad |\Psi_f\rangle = |\psi_f\rangle|\phi_f\rangle,$$

kde $|\psi_{i,f}\rangle$ jsou počáteční a finální stav elektronu v atomu s energiemi E_i a E_f (17.1) a $|\phi_{i,f}\rangle$ jsou počáteční a finální Fockovské stavy pole tvaru (17.2). Budeme pracovat v 1. řádu nestacionární poruchové teorie, kde poruchu představuje interakční člen (17.3). Po dosazení za $\hat{\vec{A}}(t)$ z (16.16) vidíme, že $\hat{V}(t)$ má tvar lineární kombinace harmonických poruch

$$\begin{aligned} \hat{V}(t) &= \frac{e}{m_e} \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{P}} \left(\hat{a}_{\vec{k}, \lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} + \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(\vec{k})t)} \right) \\ &= \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\vec{k}} \left(\hat{v}_{\vec{k}, \lambda} e^{-i\omega(\vec{k})t} + \hat{v}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger e^{i\omega(\vec{k})t} \right), \end{aligned} \quad (17.4)$$

kde jsme označili

$$\hat{v}_{\vec{k}, \lambda} = \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{P}} \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}, \quad \hat{v}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger = \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{P}} \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger.$$

Z kapitoly 12 víme, že vlivem harmonické poruchy dochází dominantně ke dvěma procesům - člen $\hat{v}_{\vec{k},\lambda}$ způsobuje absorpci fotonu z módu $(\vec{k}, \lambda)$ a přeskok elektronu z hladiny E_i na hladinu $E_f = E_i + \hbar\omega(\vec{k})$; naopak člen $\hat{v}_{\vec{k},\lambda}^\dagger$ způsobuje emisi fotonu do tohoto módu a přeskok elektronu z hladiny E_i na hladinu $E_f = E_i - \hbar\omega(\vec{k})$. Pro dostatečně dlouhé interakční časy jsou pravděpodobnosti emise a absorpce za jednotku času konstantní a pro rychlosti (12.28) platí

$$\begin{aligned}\Gamma_{\vec{k},\lambda}^{emi} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_f | \hat{v}_{\vec{k},\lambda}^\dagger | \Psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega(\vec{k})), \\ \Gamma_{\vec{k},\lambda}^{abs} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_f | \hat{v}_{\vec{k},\lambda} | \Psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega(\vec{k})).\end{aligned}\quad (17.5)$$

Spočítáme maticové elementy $\hat{v}_{\vec{k},\lambda}^\dagger$ a $\hat{v}_{\vec{k},\lambda}$ pro počáteční stav pole, kde v módu $(\vec{k}, \lambda)$ máme $n_{\vec{k},\lambda}$ fotonů

$$|\phi_i\rangle = |\dots, n_{\vec{k},\lambda}, \dots\rangle,$$

Počty fotonů v ostatních módech nejsou důležité. V případě absorpce musí být ve finálním stavu v tomto módu o jeden foton méně (samozřejmě musí být $n_{\vec{k},\lambda} \geq 1$, jinak není co absorbovat)

$$|\phi_f\rangle = |\dots, n_{\vec{k},\lambda} - 1, \dots\rangle,$$

jinak je maticový element nulový. Pro tuto volbu finálního stavu pole dostaneme

$$\begin{aligned}\langle \Psi_f | \hat{v}_{\vec{k},\lambda} | \Psi_i \rangle &= \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} \overbrace{\langle \phi_f | \hat{a}_{\vec{k},\lambda} | \phi_i \rangle}^{\sqrt{n_{\vec{k},\lambda}}} \langle \psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{P}} | \psi_i \rangle \\ &= \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} \sqrt{n_{\vec{k},\lambda}} \langle \psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{P}} | \psi_i \rangle.\end{aligned}\quad (17.6)$$

V případě emise musí být ve finálním stavu pole o jeden foton víc

$$|\phi_f\rangle = |\dots, n_{\vec{k},\lambda} + 1, \dots\rangle.$$

a pro maticový element platí

$$\begin{aligned}\langle \Psi_f | \hat{v}_{\vec{k},\lambda}^\dagger | \Psi_i \rangle &= \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} \overbrace{\langle \phi_f | \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger | \phi_i \rangle}^{\sqrt{n_{\vec{k},\lambda}+1}} \langle \psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{P}} | \psi_i \rangle \\ &= \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\omega(\vec{k})\varepsilon_0}} \sqrt{n_{\vec{k},\lambda} + 1} \langle \psi_f | e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{P}} | \psi_i \rangle.\end{aligned}\quad (17.7)$$

Rychlosti emise a absorpce jsou tedy (porovnejte s výsledkem pro interakci atomu s klasickou elektromagnetickou vlnou odvozeným v kapitole 12, vztah (12.32))

$$\begin{aligned}\Gamma_{\vec{k},\lambda}^{emi} &= \frac{\pi e^2}{m_e^2 V \omega(\vec{k}) \varepsilon_0} (n_{\vec{k},\lambda} + 1) \left| \langle \psi_f | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{P} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar \omega(\vec{k})), \\ \Gamma_{\vec{k},\lambda}^{abs} &= \frac{\pi e^2}{m_e^2 V \omega(\vec{k}) \varepsilon_0} n_{\vec{k},\lambda} \left| \langle \psi_f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{P} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar \omega(\vec{k})).\end{aligned}\quad (17.8)$$

Vidíme, že rychlost absorpce je úměrná počtu fotonů $n_{\vec{k},\lambda}$ v daném módu, v rychlosti emise je ale faktor $n_{\vec{k},\lambda} + 1$ - k emisi tedy může dojít i pokud v módu nejsou žádné fotony. Tento ryze kvantový jev se nazývá spontánní emise.

17.3 Elektrická dipólová aproximace

Pro další postup se omezíme na aproximaci elektrického dipólu (tzv. E1 aproximace). Elektromagnetické záření, které je absorbováno nebo emitováno při přeskokách elektronu mezi hladinami, je typicky v rozsahu infračerveného až UV záření. Jeho vlnová délka ($\sim 10^{-6} - 10^{-8}$ m) je tedy mnohem větší, než jsou rozměry atomu $\sim 10^{-10}$ m. Na rozměrech atomu se vektorový potenciál v podstatě nezmění a můžeme jeho závislost na $\vec{x}$ zanedbat. Ve vztazích pro rychlosti emise a absorpce (17.8) pak nahradíme $e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{x}} \simeq 1$ a nalezneme

$$\begin{aligned}\Gamma_{\vec{k},\lambda}^{emi} &= \frac{\pi e^2}{m_e^2 V \omega(\vec{k}) \varepsilon_0} (n_{\vec{k},\lambda} + 1) \left| \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \langle \psi_f | \hat{P} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar \omega(\vec{k})), \\ \Gamma_{\vec{k},\lambda}^{abs} &= \frac{\pi e^2}{m_e^2 V \omega(\vec{k}) \varepsilon_0} n_{\vec{k},\lambda} \left| \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \langle \psi_f | \hat{P} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar \omega(\vec{k})).\end{aligned}$$

Maticové elementy operátoru hybnosti lze upravit pomocí rovnosti

$$\hat{P}_j = \frac{m_e}{i\hbar} [\hat{X}_j, \hat{H}_e]$$

do tvaru

$$\langle \psi_f | \hat{P}_j | \psi_i \rangle = \frac{m_e}{i\hbar} \langle \psi_f | \hat{X}_j \hat{H}_e - \hat{H}_e \hat{X}_j | \psi_i \rangle = \frac{m_e}{i\hbar} (E_i - E_f) \langle \psi_f | \hat{X}_j | \psi_i \rangle.$$

Označíme si operátor dipólového momentu elektronu jako

$$\hat{\vec{D}} = e\hat{\vec{X}}.$$

Rychlosti emise a absorpce pak zapíšeme ve tvaru (díky δ -funkcím je $\left| \frac{E_i - E_f}{\hbar} \right|^2$ rovno $\omega(\vec{k})^2$)

$$\begin{aligned}\Gamma_{\vec{k},\lambda}^{emi} &= \frac{\pi \omega(\vec{k})}{V \varepsilon_0} (n_{\vec{k},\lambda} + 1) \left| \langle \psi_f | \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{D}} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar \omega(\vec{k})), \\ \Gamma_{\vec{k},\lambda}^{abs} &= \frac{\pi \omega(\vec{k})}{V \varepsilon_0} n_{\vec{k},\lambda} \left| \langle \psi_f | \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{D}} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar \omega(\vec{k})).\end{aligned}\quad (17.9)$$

17.4 Dipólová výběrová pravidla

Uvažujme nyní případ, kdy potenciál V_0 je sféricky symetrický a hamiltonián elektronu v atomu $\hat{H}_e$ je kompatibilní s orbitálním momentem hybnosti elektronu. Vázané stavy elektronu v atomu jsou pak společné vlastní vektory $\hat{H}_e$, $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$, tj. jsou určeny trojicí kvantových čísel N, l, m

$$|\psi_j\rangle \equiv |N_j, l_j, m_j\rangle.$$

Určíme, jaké přechody jsou možné v dipólové aproximaci, tj. pro které maticové elementy platí

$$\langle N_f, l_f, m_f | \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{D}} | N_i, l_i, m_i \rangle \neq 0.$$

Operátor dipólového momentu je násobek operátoru polohy, a jeho maticové elementy jsme určili ve cvičení 22. Ze složek operátoru polohy jsme sestavili ITO 1. řádu $\hat{X}^{(1)}$ se složkami

$$\begin{aligned} \hat{X}(1, 1) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + ix_2), \\ \hat{X}(1, 0) &= x_3, \\ \hat{X}(1, -1) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - ix_2). \end{aligned} \quad (17.10)$$

Pro maticové elementy $\hat{X}(1, q)$ pak platí (4.30)

$$\langle N_f, l_f, m_f | \hat{X}(1, q) | N_i, l_i, m_i \rangle = \sqrt{\frac{2l_i + 1}{2l_f + 1}} (1, l_i, 0, 0 | l_f, 0) (1, l_i, q, m_i | l_f, m_f) \langle N_f, l_f | r | N_i, l_i \rangle, \quad (17.11)$$

kde jsme označili

$$\langle N_f, l_f | r | N_i, l_i \rangle = \int_0^\infty r^3 \bar{R}_{N_f l_f}(r) R_{N_i l_i}(r) dr. \quad (17.12)$$

Zde $R_{Nl}(r)$ představuje radiální část vlnové funkce stavu $|N, l, m\rangle$, tj.

$$\psi_{N,l,m}(r, \theta, \varphi) = \langle r, \theta, \varphi | N, l, m \rangle = R_{Nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Z výběrových pravidel pro CG koeficienty pak vyplynulo, že maticový element (17.11) je nenulový jen pro

$$\begin{aligned} \Delta m &= m_f - m_i = 1, 0, -1, \\ \Delta l &= l_f - l_i = 1, -1. \end{aligned}$$

Vidíme tedy, že v 1. řádu poruchové teorie v dipólové aproximaci jsou možné jen takové přechody, kdy se orbitální kvantové číslo změní o 1, a magnetické kvantové číslo se buď nezmění, nebo se změní o 1. Pro ostatní přechody (např. $3p \rightarrow 2p$) platí

$$\langle N_f, l_f, m_f | \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{D}} | N_i, l_i, m_i \rangle = 0,$$

a jsou zakázané. K některým ale může dojít, pokud budeme uvažovat vyšší členy rozvoje $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{x}}$, tj. v kvadrupólové (E2), oktapólové (E3) nebo vyšší aproximaci. Přechody, pro které je přesný maticový element v rychlostech přechodu (17.8) nulový

$$\langle N_f, l_f, m_f | e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{x}} \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{P}} | N_i, l_i, m_i \rangle = 0,$$

jsou tzv. silně zakázané, a může k nim dojít pouze ve druhém nebo vyšším řádu nestacionární poruchové teorie (tj. musí dojít k emisi nebo absorpci dvou nebo více fotonů). Příkladem silně zakázaného přechodu je $2s \rightarrow 1s$ v atomu vodíku.

17.5 Spontánní emise, přechod $2p \rightarrow 1s$ pro vodík

Uvažujme nyní pole ve vakuovém stavu a atom v nějakém excitovaném stavu $|\psi_i\rangle$. Určíme celkovou rychlost spontánní emise $\Gamma_{i \rightarrow f}^{emi}$ při přechodu do stavu $|\psi_f\rangle$. Musíme sečíst rychlosti spontánní emise do všech módů, pro které je $\hbar\omega(\vec{k}) = E_i - E_f = \hbar\omega_{if}$, tj.

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{emi} = \sum_{\vec{k}, \lambda} \Gamma_{\vec{k}, \lambda}^{emi}.$$

V limitě velkého objemu můžeme přejít ke spojitým vlnovým vektorům a sumu nahradit integrálem

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k.$$

Pro celkovou rychlost spontánní emise pak platí

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{emi} = \sum_{\lambda} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{\omega(\vec{k})}{8\pi^2\varepsilon_0} \left| \langle \psi_f | \vec{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\vec{D}} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega(\vec{k})).$$

Frekvence fotonu s vlnovým vektorem $\vec{k}$ je $\omega(\vec{k}) = kc$. Integrál převedeme do sférických souřadnic $k, \theta_\gamma, \varphi_\gamma$ a od k ještě přejdeme k ω , tj.

$$d^3k = k^2 dk d\Omega_\gamma = \frac{\omega^2}{c^3} d\omega d\Omega_\gamma.$$

Integrací přes ω s δ -funkcí

$$\delta(\hbar(\omega - \omega_{if})) = \frac{1}{\hbar} \delta(\omega - \omega_{if})$$

pro celkovou rychlost spontánní emise dostaneme

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{emi} = \frac{\omega_{if}^3}{8\pi^2\varepsilon_0\hbar c^3} \int_{\Omega_\gamma} d\Omega_\gamma \sum_{\lambda} \left| \langle \psi_f | \vec{\varepsilon}(\Omega_\gamma, \lambda) \cdot \hat{\vec{D}} | \psi_i \rangle \right|^2. \quad (17.13)$$

Bazické vektory polarizace (musí být ortonormální a také kolmé na vlnový vektor $\vec{k} = k(\sin \theta_\gamma \cos \varphi_\gamma, \sin \theta_\gamma \sin \varphi_\gamma, \cos \theta_\gamma)$) zvolíme jako

$$\begin{aligned}\vec{\varepsilon}(1) &= (\cos \theta_\gamma \cos \varphi_\gamma, \cos \theta_\gamma \sin \varphi_\gamma, -\sin \theta_\gamma), \\ \vec{\varepsilon}(2) &= (-\sin \varphi_\gamma, \cos \varphi_\gamma, 0).\end{aligned}$$

Označme ve zkratce maticový element dipólového momentu

$$\vec{D}^{(if)} = \langle \psi_f | \hat{\vec{D}} | \psi_i \rangle.$$

Integrand v (17.13) upravíme do tvaru

$$\begin{aligned}\sum_\lambda \left| \vec{\varepsilon}(\lambda) \cdot \vec{D}^{(if)} \right|^2 &= |D_x^{(if)}|^2 (\varepsilon_x^2(1) + \varepsilon_x^2(2)) + |D_y^{(if)}|^2 (\varepsilon_y^2(1) + \varepsilon_y^2(2)) + |D_z^{(if)}|^2 (\varepsilon_z^2(1) + \varepsilon_z^2(2)) \\ &\quad + (D_x^{(if)} \overline{D}_y^{(if)} + \overline{D}_x^{(if)} D_y^{(if)}) (\varepsilon_x(1) \varepsilon_y(1) + \varepsilon_x(2) \varepsilon_y(2)) + \\ &\quad + (D_x^{(if)} \overline{D}_z^{(if)} + \overline{D}_x^{(if)} D_z^{(if)}) (\varepsilon_x(1) \varepsilon_z(1) + \varepsilon_x(2) \varepsilon_z(2)) + \\ &\quad + (D_y^{(if)} \overline{D}_z^{(if)} + \overline{D}_y^{(if)} D_z^{(if)}) (\varepsilon_y(1) \varepsilon_z(1) + \varepsilon_y(2) \varepsilon_z(2)) \\ &= |D_x^{(if)}|^2 (\cos^2 \theta_\gamma \cos^2 \varphi_\gamma + \sin^2 \varphi_\gamma) + |D_y^{(if)}|^2 (\cos^2 \theta_\gamma \sin^2 \varphi_\gamma + \cos^2 \varphi_\gamma) + \\ &\quad + |D_z^{(if)}|^2 \sin^2 \theta_\gamma - (D_x^{(if)} \overline{D}_y^{(if)} + \overline{D}_x^{(if)} D_y^{(if)}) \sin^2 \theta_\gamma \cos \varphi_\gamma \sin \varphi_\gamma - \\ &\quad - (D_x^{(if)} \overline{D}_z^{(if)} + \overline{D}_x^{(if)} D_z^{(if)}) \cos \theta_\gamma \sin \theta_\gamma \cos \varphi_\gamma + \\ &\quad - (D_y^{(if)} \overline{D}_z^{(if)} + \overline{D}_y^{(if)} D_z^{(if)}) \cos \theta_\gamma \sin \theta_\gamma \sin \varphi_\gamma.\end{aligned}$$

V integraci přes prostorové úhly $\theta_\gamma, \varphi_\gamma$, dají poslední tři členy nulu a dostaneme

$$\int_{\Omega_\gamma} d\Omega_\gamma \sum_\lambda \left| \vec{\varepsilon}(\lambda) \cdot \vec{D}^{(if)} \right|^2 = \frac{8\pi}{3} (|D_x^{(if)}|^2 + |D_y^{(if)}|^2 + |D_z^{(if)}|^2).$$

Celková rychlost spontánní emise je potom rovna

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{emi} = \frac{\omega_{if}^3}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} (|D_x^{(if)}|^2 + |D_y^{(if)}|^2 + |D_z^{(if)}|^2). \quad (17.14)$$

Ukážeme si nyní explicitní výpočet pro přechod $2p \rightarrow 1s$ pro elektron v atomu vodíku. Počáteční a finální stavy elektronu jsou tedy

$$|\psi_i\rangle = |2, 1, m\rangle, \quad |\psi_f\rangle = |1, 0, 0\rangle,$$

kde $m = 1, 0, -1$ (jak uvidíme, na konkrétní hodnotě nebude záviset). Musíme spočítat maticové elementy

$$D_j^{(if)} = e \langle 1, 0, 0 | \hat{X}_j | 2, 1, m \rangle.$$

Složky operátoru polohy přepíšeme pomocí ITO $\hat{X}^{(1)}$ (17.10)

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

Dipólové maticové elementy pak s použitím (17.11) a CG koeficientů z dodatku A upravíme do tvaru

$$\begin{aligned} D_x^{(if)} &= e\sqrt{3}\langle 1, 0|r|2, 1\rangle \overbrace{(1, 1, 0, 0|0, 0)}^{-\frac{1}{\sqrt{3}}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\underbrace{(1, 1, -1, m|0, 0)}_{\frac{1}{\sqrt{3}}\delta_{m,1}} - \underbrace{(1, 1, 1, m|0, 0)}_{\frac{1}{\sqrt{3}}\delta_{m,-1}} \right) \\ &= \frac{e}{\sqrt{6}}\langle 1, 0|r|2, 1\rangle (\delta_{m,-1} - \delta_{m,1}), \\ D_y^{(if)} &= e\sqrt{3}\langle 1, 0|r|2, 1\rangle (1, 1, 0, 0|0, 0) \frac{i}{\sqrt{2}} ((1, 1, -1, m|0, 0) + (1, 1, 1, m|0, 0)) \\ &= -i\frac{e}{\sqrt{6}}\langle 1, 0|r|2, 1\rangle (\delta_{m,-1} + \delta_{m,1}), \\ D_z^{(if)} &= e\sqrt{3}\langle 1, 0|r|2, 1\rangle (1, 1, 0, 0|0, 0) \underbrace{(1, 1, 0, m|0, 0)}_{-\frac{1}{\sqrt{3}}\delta_{m,0}} = \frac{e}{\sqrt{3}}\langle 1, 0|r|2, 1\rangle \delta_{m,0}. \end{aligned}$$

Zbývá určit radiální maticový element $\langle 1, 0|r|2, 1\rangle$. Radiální části příslušných vlnových funkcí (obecně viz. (4.18)) jsou

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{1}{a_0^{\frac{5}{2}}} r e^{-\frac{r}{2a_0}}, \quad R_{1,0}(r) = 2 \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{a_0}},$$

kde $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ je Bohrov poloměr. Maticový element radiální části je pak roven

$$\langle 1, 0|r|2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{1}{a_0^4} \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_0}} dr = 4\sqrt{6} \left(\frac{2}{3}\right)^5 a_0.$$

Celkem pro kvadrát dipólového maticového elementu dostaneme (nezávisle na m)

$$|D_x^{(if)}|^2 + |D_y^{(if)}|^2 + |D_z^{(if)}|^2 = 32 \left(\frac{2}{3}\right)^{10} a_0^2 e^2 \underbrace{(\delta_{m,-1} + \delta_{m,0} + \delta_{m,1})}_1.$$

Rychlost spontánní emise (17.14) pro přechod $2p \rightarrow 1s$ je potom

$$\Gamma_{2p \rightarrow 1s}^{emi} = \frac{16a_0^2 e^2 \omega_{if}^3}{\pi \epsilon_0 \hbar c^3} \left(\frac{2}{3}\right)^{11}. \quad (17.15)$$

Frekvence fotonu vyzářeného při přechodu $2p \rightarrow 1s$ je

$$\omega_{if} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3R}{4\hbar} = \frac{3}{8\hbar} m_e c^2 \alpha^2 \simeq 1.55 \cdot 10^{16} \text{ rad/s},$$

což odpovídá vlnové délce

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega_{if}} \simeq 1.215 \cdot 10^{-7} \text{ m.}$$

α je konstanta jemné struktury

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \simeq \frac{1}{137}.$$

Bohrův poloměr lze pomocí α vyjádřit jako

$$a_0 = \frac{\hbar}{m_e c \alpha}.$$

Po algebraických úpravách pak můžeme vztah (17.15) přepsat do tvaru

$$\Gamma_{2p \rightarrow 1s}^{emi} = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \frac{c\alpha^4}{a_0} \simeq 6.27 \cdot 10^8 \text{ Hz.}$$

Rychlost přechodu lze interpretovat jako rozpadovou konstantu. Pravděpodobnost nalezení elektronu na počáteční hladině s časem klesá exponenciálně

$$p_i(t) = \exp(-\Gamma_{2p \rightarrow 1s}^{emi} t).$$

Střední doba života hladiny $2p$ je definovaná jako čas τ , po kterém pravděpodobnost poklesne na $\frac{1}{e}$, tj.

$$\tau = \frac{1}{\Gamma_{2p \rightarrow 1s}^{emi}} \simeq 1.6 \cdot 10^{-9} \text{ s.}$$

Příloha A

Tabulky CG koeficientů

CG koeficienty $(j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m)$ jsou rovny nule pokud nejsou splněna výběrová pravidla

$$m_1 + m_2 = m, \quad |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2.$$

V tabulkách jsou uvedené CG koeficienty pro $m > 0$. Ostatní je snadné dopočítat díky symetrii vůči záměně $j_1 \leftrightarrow j_2$, $m_1 \leftrightarrow m_2$, resp. znamének m_i a m

$$\begin{aligned} (j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m) &= (-1)^{j_1+j_2-j} (j_2, j_1, m_2, m_1 | j, m) \\ &= (-1)^{j_1+j_2-j} (j_1, j_2, -m_1, -m_2 | j, -m) \\ &= (j_2, j_1, -m_2, -m_1 | j, -m). \end{aligned}$$

$$m = j_1 + j_2:$$

$$(j_1, j_2, j_1, j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2) = 1.$$

$$j_2 = 0:$$

$$(j_1, 0, m_1, 0 | j, m) = \delta_{j,j_1} \delta_{m,m_1}.$$

$$j = 0:$$

$$(j_1, j_2, m_1, m_2 | 0, 0) = \frac{(-1)^{j_1+m_1}}{\sqrt{2j_1+1}} \delta_{j_1,j_2} \delta_{m_1,-m_2}.$$

$m = 0$		
$m_1, m_2 \backslash j$	1	0
$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}:$$

$j_1 = 1, j_2 = \frac{1}{2}$:

$m = 1/2$		
$m_1, m_2 \backslash j$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$
$1, -\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$
$0, \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$

$j_1 = 1, j_2 = 1$:

$m = 1$		
$m_1, m_2 \backslash j$	2	1
$1, 0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$0, 1$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$

$m = 0$			
$m_1, m_2 \backslash j$	2	1	0
$1, -1$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
$0, 0$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$
$-1, 1$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$

$j_1 = l, j_2 = \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned} \left(l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l \pm \frac{1}{2}, m \right) &= \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}, \\ \left(l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l \pm \frac{1}{2}, m \right) &= \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \end{aligned}$$

$j_2 = 1, m_2 = 0$:

$$\begin{aligned} (j_1, 1, m, 0 | j_1 + 1, m) &= \sqrt{\frac{(j_1 - m + 1)(j_1 + m + 1)}{(2j_1 + 1)(j_1 + 1)}}, \\ (j_1, 1, m, 0 | j_1, m) &= \frac{m}{\sqrt{j_1(j_1 + 1)}}, \\ (j_1, 1, m, 0 | j_1 - 1, m) &= -\sqrt{\frac{(j_1 - m)(j_1 + m)}{j_1(2j_1 + 1)}} \end{aligned}$$