Kapitola 20

Nerozlišitelné částice

Přehled teorie

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.

Symetrizační a antisymetrizační projektory

Nechť $\mathcal{H}$ je Hilbertův prostor jedné částice, zvolíme si v něm nějakou ON bázi $\{|\phi_k\rangle\}$

$$\langle\phi_k|\phi_l\rangle = \delta_{kl}, \quad \sum_n |\phi_k\rangle\langle\phi_k| = \hat{I},$$

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

$$\hat{P}^{\dagger}_{(1,2)} = \hat{P}_{(1,2)}, \quad \hat{P}^2_{(1,2)} = \hat{I} \Longrightarrow \hat{P}_{(1,2)} = \hat{P}^{-1}_{(1,2)} = \hat{P}^{\dagger}_{(1,2)}.$$

Jeho vlastní čísla jsou ± 1, vlastní podprostory jsou $\mathcal{H}^{(2)}_S$ a $\mathcal{H}^{(2)}_A$, tj.

$$\begin{aligned} \forall|\psi_S\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}_S, \qquad & \hat{P}_{(1,2)}|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle, \\ \forall|\psi_A\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}_A, \qquad & \hat{P}_{(1,2)}|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle. \end{aligned}$$

Každý stav dvou nerozlišitelných částic je tedy vlastním vektorem operátoru transpozice $\hat{P}_{(1,2)}$. Definujme operátory

$$\hat{S} = \frac{1}{2}\left(\hat{I} + \hat{P}_{(1,2)}\right), \quad \hat{A} = \frac{1}{2}\left(\hat{I} - \hat{P}_{(1,2)}\right). \tag{20.1}$$

Ukážeme, že se jedná o ortogonální projektory na podprostory $\mathcal{H}^{(2)}_S$ a $\mathcal{H}^{(2)}_A$. Zjevně to jsou hermitovské operátory, spočítáme jejich kvadráty

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 &= \frac{1}{4}\left(\hat{I} + 2\hat{P}_{(1,2)} + \underbrace{\hat{P}^2_{(1,2)}}_{\hat{I}}\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{I} + \hat{P}_{(1,2)}\right) = \hat{S}, \\ \hat{A}^2 &= \frac{1}{4}\left(\hat{I} - 2\hat{P}_{(1,2)} + \underbrace{\hat{P}^2_{(1,2)}}_{\hat{I}}\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{I} - \hat{P}_{(1,2)}\right) = \hat{A}. \end{aligned}$$

Jsou to tedy projektory. Dále platí

$$\begin{aligned} \hat{P}_{(1,2)}\hat{S} &= \frac{1}{2}\left(\hat{P}_{(1,2)} + \hat{P}^2_{(1,2)}\right) = \hat{S}, \\ \hat{P}_{(1,2)}\hat{A} &= \frac{1}{2}\left(\hat{P}_{(1,2)} - \hat{P}^2_{(1,2)}\right) = -\hat{A}, \end{aligned}$$

takže $\hat{S}$ je ortogonální projektor na podprostor $\mathcal{H}^{(2)}_S$ a $\hat{A}$ je ortogonální projektor na podprostor $\mathcal{H}^{(2)}_A$

$$\forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}\otimes\mathcal{H} \quad \hat{S}|\psi\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}_S, \quad \hat{A}|\psi\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}_A.$$

Rovněž vidíme, že platí

$$\hat{A}\hat{S} = \hat{S}\hat{A} = \frac{1}{4}\left(\hat{I} - \hat{P}^2_{(1,2)}\right) = 0,$$

tj. podprostory $\mathcal{H}^{(2)}_S$ a $\mathcal{H}^{(2)}_A$ jsou ortogonální. Pro dvě částice navíc platí

$$\hat{S} + \hat{A} = \hat{I},$$

a odsud plyne rozklad

$$\mathcal{H}\otimes\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(2)}_S \oplus \mathcal{H}^{(2)}_A.$$

Snadno se ukáže, že všechny pozorovatelné dvou nerozlišitelných částic musí komutovat s operátorem transpozice. Nechť pro dvoučásticovou pozorovatelnou $\hat{B}$ platí

$$\hat{B}|b\rangle = b|b\rangle. \tag{20.2}$$

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 (20.2) 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

$$\left[\hat{B}, \hat{P}_{(1,2)}\right] = 0.$$

Pozorovatelné tedy musí být symetrické vůči záměně částic. Protože každá pozorovatelná komutuje s jednotkou, komutuje $\hat{B}$ i s projektory $\hat{S}$ a $\hat{A}$

$$\left[\hat{B}, \hat{S}\right] = 0, \quad \left[\hat{B}, \hat{A}\right] = 0.$$

Tyto vztahy vyjadřují to, že pozorovatelné pro nerozlišitelné částice musí působit uvnitř příslušného podprostoru, tj. zobrazit stav z $\mathcal{H}^{(2)}_{S/A}$ na stav z $\mathcal{H}^{(2)}_{S/A}$. 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.

Přejděme nyní k systému N nerozlišitelných částic. Definujeme operátor transpozice částice m a n $\hat{P}_{(m,n)}$ předpisem

$$\hat{P}_{(m,n)}|\phi_{k_1}, \ldots, \phi_{k_m}, \ldots, \phi_{k_n}, \ldots \phi_{k_N}\rangle = |\phi_{k_1}, \ldots, \phi_{k_n}, \ldots, \phi_{k_m}, \ldots \phi_{k_N}\rangle.$$

Opět platí, že $\hat{P}_{(m,n)}$ je hermitovský a unitární, takže má vlastní čísla ± 1, a příslušné vlastní podprostory jsou $\mathcal{H}^{(N)}_S$ a $\mathcal{H}^{(N)}_A$

$$\begin{aligned} \forall|\psi_S\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}_S, &\qquad \hat{P}_{(m,n)}|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle, \\ \forall|\psi_A\rangle \in \mathcal{H}^{(N)}_A, &\qquad \hat{P}_{(m,n)}|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle. \end{aligned}$$

K dané permutaci N prvků π

$$\pi : \{1, \ldots, N\} \to \{\pi_1, \ldots, \pi_N\},$$

přiřadíme operátor $\hat{P}_\pi$ definovaný vztahem

$$\hat{P}_\pi|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \ldots, \phi_{k_N}\rangle = |\phi_{k_{\pi_1}}, \phi_{k_{\pi_2}}, \ldots, \phi_{k_{\pi_N}}\rangle$$

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

$$\begin{aligned} \forall|\psi_S\rangle \in \mathcal{H}_S^{(N)}, &\qquad \hat{P}_\pi|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle, \\ \forall|\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A^{(N)}, &\qquad \hat{P}_\pi|\psi_A\rangle = \sigma_\pi|\psi_A\rangle, \end{aligned}$$

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

$$\hat{S} = \frac{1}{N!}\sum_\pi \hat{P}_\pi, \quad \hat{A} = \frac{1}{N!}\sum_\pi \sigma_\pi \hat{P}_\pi. \tag{20.3}$$

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

$$\begin{aligned} \hat{P}_\beta\hat{S} &= \frac{1}{N!}\sum_\alpha \hat{P}_\beta\hat{P}_\alpha = \frac{1}{N!}\sum_\gamma \hat{P}_\gamma = \hat{S}, \\ \hat{P}_\beta\hat{A} &= \frac{1}{N!}\sum_\alpha \sigma_\alpha\hat{P}_\beta\hat{P}_\alpha = \sigma_\beta\frac{1}{N!}\sum_\gamma \sigma_\gamma\hat{P}_\gamma = \sigma_\beta\hat{A}, \end{aligned} \tag{20.4}$$

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 (20.4) 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 (20.1) a (20.3) identické, protože grupa permutací S_2 má pouze dva prvky - identickou permutaci a transpozici $1 \to 2$. Pro víc než dvě částice ale součet projektorů není roven jednotkovému operátoru

$$N \geq 3 \Longrightarrow \hat{S} + \hat{A} \neq \hat{I},$$

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 $\hat{A}$

$$\left[\hat{B}, \hat{S}\right] = 0, \quad \left[\hat{B}, \hat{A}\right] = 0,$$

tj. pozorovatelné nerozlišitelných částic musí působit uvnitř příslušného podprostoru $\mathcal{H}_{S/A}^{(N)}$.

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 $\phi_{k_1}, \ldots, \phi_{k_N}$, kde jsou indexy uspořádané $k_1 \leq k_2 \ldots \leq k_n$ (abychom dostali různé stavy). Normalizovaný bazický stav N bosonů pak označíme jako

$$|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \ldots, \phi_{k_N}; S\rangle = \mathcal{N}_S \hat{S} |\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \ldots, \phi_{k_N}\rangle.$$

Analogicky pro N fermionů označíme normalizovaný bazický stav jako

$$|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \ldots, \phi_{k_N}; A\rangle = \mathcal{N}_A \hat{A} |\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \ldots, \phi_{k_N}\rangle,$$

kde kvůli Pauliho principu musíme požadovat $k_1 < k_2 \ldots < k_n$. $\mathcal{N}_S$ a $\mathcal{N}_A$ jsou normalizační faktory, které nyní určíme. Začněme s fermiony, kde je výpočet jednodušší. Vektor $\hat{A}|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \ldots, \phi_{k_N}\rangle$ je superpozicí $N!$ ortogonálních 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.

$$|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \ldots, \phi_{k_N}; A\rangle = \sqrt{N!} \hat{A} |\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \ldots, \phi_{k_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_\pi \sigma_\pi |\phi_{k_{\pi_1}}, \phi_{k_{\pi_2}}, \ldots, \phi_{k_{\pi_N}}\rangle.$$

Pro bosony je určení normalizačního faktoru složitější, protože mohou být ve stejném kvantovém stavu, a v takovém případě nejsou všechny stavy v superpozici $\hat{S}|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \ldots, \phi_{k_N}\rangle$ 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 $\frac{N!}{n_1! n_2! \ldots}$ různých ortogonálních stavů. Normalizační faktor tak musí být

$$\mathcal{N}_S = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \ldots}}.$$

Pro N bosonů tak dostaneme bazické stavy

$$\begin{aligned} |\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \ldots, \phi_{k_N}; S\rangle &= \sqrt{\frac{N!}{n_1!n_2!\ldots}}\hat{S}|\phi_{k_1}, \phi_{k_2}, \ldots, \phi_{k_N}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\ldots}}\sum_\pi |\phi_{k_{\pi_1}}, \phi_{k_{\pi_2}}, \ldots, \phi_{k_{\pi_N}}\rangle. \end{aligned}$$

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 $n_i! = 1$)

$$|n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots; S/A\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_1!n_2!\ldots}}\hat{S}/\hat{A}\left(|\phi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes |\phi_2\rangle^{\otimes n_2} \otimes \ldots \otimes |\phi_k\rangle^{\otimes n_k} \otimes \ldots\right).$$

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

$$\begin{aligned} |n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots; S\rangle, \quad \sum_i n_i = N, &\qquad n_i = 0, 1, 2, \ldots, \\ \langle n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots; S|n_1', n_2', \ldots, n_k', \ldots; S\rangle &= \delta_{n_1 n_1'}\delta_{n_2 n_2'}\ldots\delta_{n_k n_k'}. \end{aligned} \tag{20.5}$$

a v případě prostoru N fermionů $\mathcal{H}_A^{(N)}$ je tvořena stavy

$$\begin{aligned} |n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots; A\rangle, \quad \sum_i n_i = N, &\qquad n_i = 0, 1, \\ \langle n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots; A|n_1', n_2', \ldots, n_k', \ldots; A\rangle &= \delta_{n_1 n_1'}\delta_{n_2 n_2'}\ldots\delta_{n_k n_k'}. \end{aligned} \tag{20.6}$$

Těmto vektorům se často říká Fockovy stavy.

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

$$\mathcal{F}_B(\mathcal{H}) = \mathcal{H}_S^{(0)} \oplus \mathcal{H}_S^{(1)} \oplus \mathcal{H}_S^{(2)} \oplus \ldots = \bigoplus_{k=0}^{\infty} \mathcal{H}_S^{(k)},$$

a pro fermiony

$$\mathcal{F}_F(\mathcal{H}) = \mathcal{H}_A^{(0)} \oplus \mathcal{H}_A^{(1)} \oplus \mathcal{H}_A^{(2)} \oplus \ldots = \bigoplus_{k=0}^{\infty} \mathcal{H}_A^{(k)}.$$

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

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{S/A}^{(N_1)}, \quad |\phi\rangle \in \mathcal{H}_{S/A}^{(N_2)}, \quad N_1 \neq N_2 \Longrightarrow \langle\psi|\phi\rangle = 0,$$

a na celý Fockův prostor ho rozšíříme tak, aby to byla sesquilineární forma.

Báze v podprostorech $\mathcal{H}_{S/A}^{(N)}$ tvoří vektory (20.5), (20.6), 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 (20.5), (20.6) 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. přidají 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

$$\hat{H}|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \ldots.$$

Pro hamiltonián LHO můžeme nalézt posunovací operátory $\hat{a} \equiv \hat{a}_-$ a $\hat{a}^\dagger \equiv \hat{a}_+$, které splňují

$$\left[\hat{H}, \hat{a}\right] = -\hbar\omega\hat{a}, \quad \left[\hat{H}, \hat{a}^\dagger\right] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger, \quad \left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \hat{I}.$$

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 (částicí 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.

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 (20.5) následovně

$$\hat{a}_k^\dagger|n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots; S\rangle = \sqrt{n_k+1}|n_1, n_2, \ldots, n_k+1, \ldots; S\rangle. \tag{20.7}$$

Anihilační operátor $\hat{a}_k$ ubere jednu částici ve stavu $|\phi_k\rangle$, tj. jeho akce na bazické stavy (20.5) je

$$\hat{a}_k|n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots; S\rangle = \sqrt{n_k}|n_1, n_2, \ldots, n_k-1, \ldots; S\rangle. \tag{20.8}$$

Vidíme, že takto definované operátory jsou k sobě opravdu hermitovsky sdružené

$$\underbrace{\langle n_1', \ldots n_k', \ldots; S|\hat{a}_k|n_1, \ldots n_k, \ldots; S\rangle}_{\sqrt{n_k}\delta_{n_1' n_1}\cdots\delta_{n_k' n_k-1}\cdots} = \underbrace{\langle n_1, \ldots n_k, \ldots; S|\hat{a}_k^\dagger|n_1', \ldots n_k', \ldots; S\rangle^*}_{\sqrt{n_k'+1}\delta_{n_1 n_1'}\cdots\delta_{n_k n_k'+1}\cdots}.$$

Evidentně platí komutační relace

$$\left[\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger\right] = \left[\hat{a}_k, \hat{a}_l\right] = 0, \tag{20.9}$$

protože pro všechny bazické vektory platí

$$\begin{aligned}\left[\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger\right]|n_1, \ldots n_k, \ldots, n_l, \ldots; S\rangle &= \sqrt{(n_k+1)(n_l+1)}|n_1, \ldots n_k+1, \ldots, n_l+1, \ldots; S\rangle \\ &\quad -\sqrt{(n_k+1)(n_l+1)}|n_1, \ldots n_k+1, \ldots, n_l+1, \ldots; S\rangle \\ &= 0,\end{aligned}$$

a druhá identita je jen hermitovské sdružení první. Odmocniny na pravých stranách (20.7) a (20.8) jsou zvoleny tak, že platí komutační relace

$$\left[\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger\right] = \delta_{kl}. \tag{20.10}$$

Pro $k \neq l$ dostaneme

$$\begin{aligned}\left[\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger\right]|n_1, \ldots n_k, \ldots, n_l, \ldots; S\rangle &= \sqrt{n_k(n_l+1)}|n_1, \ldots n_k-1, \ldots, n_l+1, \ldots; S\rangle \\ &\quad -\sqrt{n_k(n_l+1)}|n_1, \ldots n_k-1, \ldots, n_l+1, \ldots; S\rangle \\ &= 0.\end{aligned}$$

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 (20.10).

Vakuový stav splňuje pro všechny anihilační operátory vztah

$$\hat{a}_k|0\rangle = 0.$$

Fockovské stavy (20.5) 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 $\hat{N}_k$

$$\begin{aligned}\left[\hat{N}_k, \hat{a}_l\right] &= \hat{a}_k^\dagger \underbrace{[\hat{a}_k, \hat{a}_l]}_{0} + \underbrace{\left[\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l\right]}_{-\delta_{kl}} \hat{a}_k = -\hat{a}_l \delta_{kl}, \\ \left[\hat{N}_k, \hat{a}_l^\dagger\right] &= \hat{a}_k^\dagger \underbrace{\left[\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger\right]}_{\delta_{kl}} + \underbrace{\left[\hat{a}_l^\dagger, \hat{a}_k\right]}_{0} \hat{a}_k = \hat{a}_l^\dagger \delta_{kl}.\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
\hat{b}_k^\dagger|n_1,\dots,0_k,\dots;A\rangle &= \sqrt{N!}|\phi_k\rangle\otimes\hat{A}\left(|\phi_1\rangle^{\otimes n_1}\otimes|\phi_2\rangle^{\otimes n_2}\otimes\dots\right)\\
&= \sqrt{(N+1)!}\hat{A}\left(|\phi_k\rangle\otimes|\phi_1\rangle^{\otimes n_1}\otimes|\phi_2\rangle^{\otimes n_2}\otimes\dots\right)\\
&= (-1)^{\sum\limits_{j=1}^{k} n_j}\sqrt{(N+1)!}A\left(|\phi_1\rangle^{\otimes n_1}\otimes|\phi_2\rangle^{\otimes n_2}\otimes\dots\otimes|\phi_k\rangle\otimes\dots\right)\\
&= (-1)^{\sum\limits_{j=1}^{k-1} n_j}|n_1,\dots,1_k,\dots\rangle.
\end{aligned}$$

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

$$\hat{b}_k|n_1,\dots,n_k,\dots;A\rangle = \begin{cases} 0, & n_k = 0 \\ (-1)^{\sum\limits_{j=1}^{k-1} n_j}|n_1,\dots,n_k-1,\dots;A\rangle, & n_k = 1. \end{cases}.$$

Snadno ukážeme, že fermionové operátory splňují antikomutační relace

$$\left\{\hat{b}_j^\dagger,\hat{b}_k^\dagger\right\} = \left\{\hat{b}_j,\hat{b}_k\right\} = 0. \tag{20.11}$$

Pro případ $j = k$ je $\left\{\hat{b}_k^\dagger,\hat{b}_k^\dagger\right\} = 2\hat{b}_k^{\dagger 2}$, a vztah plyne přímo z definic

$$\left\{\hat{b}_k^\dagger,\hat{b}_k^\dagger\right\}|n_1,\dots,n_k,\dots;A\rangle = \begin{cases} 0, & n_k = 1 \\ 2\hat{b}_k^\dagger|n_1,\dots,1_k,\dots;A\rangle = 0, & n_k = 0 \end{cases}.$$

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)

$$\begin{aligned}
\hat{b}_j^\dagger\hat{b}_k^\dagger|n_1,\dots,0_j,\dots,0_k,\dots;A\rangle &= (-1)^{\sum\limits_{l=1}^{j-1} n_l}(-1)^{\sum\limits_{i=1}^{k-1} n_i}|n_1,\dots,1_j,\dots,1_k,\dots;A\rangle\\
&= (-1)^{\sum\limits_{i=j}^{k-1} n_i}|n_1,\dots,1_j,\dots,1_k,\dots;A\rangle.
\end{aligned}$$

V opačném pořadí platí

$$\begin{aligned}
\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_j^\dagger|n_1,\dots,0_j,\dots,0_k,\dots;A\rangle &= (-1)^{\left(\sum\limits_{l=1}^{k-1} n_l\right)+1}(-1)^{\sum\limits_{i=1}^{j-1} n_i}|n_1,\dots,1_j,\dots,1_k,\dots;A\rangle\\
&= -(-1)^{\sum\limits_{i=j}^{k-1} n_i}|n_1,\dots,1_j,\dots,1_k,\dots;A\rangle.
\end{aligned}$$

Ve všech případech můžeme zapsat rovnost

$$\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k^\dagger |n_1, \ldots, n_j, \ldots, n_k, \ldots; A\rangle = -\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_j^\dagger |n_1, \ldots, n_j, \ldots, n_k, \ldots; A\rangle,$$

ze které plynou antikomutační relace (20.11). Analogickým postupem se ukáže, že platí

$$\left\{\hat{b}_j, \hat{b}_k^\dagger\right\} = \delta_{jk}. \tag{20.12}$$

Antisymetrizace stavů pro fermiony tedy implikuje antikomutační relace pro kreační a anihilační operátory. Pauliho princip je schován v identitě

$$\left\{\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_k^\dagger\right\} = 2\hat{b}_k^{\dagger 2} = 0 \Longrightarrow \hat{b}_k^{\dagger 2} = 0.$$

Pro vakuový stav fermionů platí stejně jako pro bosony rovnosti

$$\hat{b}_k|0\rangle = 0.$$

Fockovské stavy (20.6) vytvoříme z vakua pomocí kreačních operátorů

$$|n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots; A\rangle = \hat{b}_1^{\dagger n_1} \hat{b}_2^{\dagger n_2} \ldots |0\rangle,$$

na rozdíl od bosonů zde závisí na pořadí kreačních operátorů. Fockův prostor fermionů lze zapsat jako

$$\mathcal{F}_F(\mathcal{H}) = \left[\left(\prod_k \hat{b}_k^{\dagger n_k}\right)|0\rangle \middle| \sum_k n_k < \infty, n_k = 0, 1\right]_\lambda .$$

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 $\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left\{\hat{B}, \hat{C}\right\} - \left\{\hat{C}, \hat{A}\right\}\hat{B}$)

$$\begin{aligned}
\left[\hat{N}_k, \hat{b}_l\right] &= \hat{b}_k^\dagger \underbrace{\left\{\hat{b}_k, \hat{b}_l\right\}}_{0} - \underbrace{\left\{\hat{b}_l, \hat{b}_k^\dagger\right\}}_{\delta_{kl}} \hat{b}_k = -\hat{b}_l \delta_{kl}, \\
\left[\hat{N}_k, \hat{b}_l^\dagger\right] &= \hat{b}_k^\dagger \underbrace{\left\{\hat{b}_k, \hat{b}_l^\dagger\right\}}_{\delta_{kl}} - \underbrace{\left\{\hat{b}_l^\dagger, \hat{b}_k^\dagger\right\}}_{0} \hat{b}_k = \hat{b}_l^\dagger \delta_{kl}.
\end{aligned}$$

V případě fermionů je $\hat{N}_k$ projektor

$$\hat{N}_k^2 = \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k = \hat{b}_k^\dagger \left(\underbrace{\left\{\hat{b}_k, \hat{b}_k^\dagger\right\}}_{1} - \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k\right) \hat{b}_k = \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k - \underbrace{\hat{b}_k^{\dagger 2}}_{0} \hat{b}_k^2 = \hat{N}_k,$$

tj. jeho vlastní čísla jsou 0 a 1 v souladu s Pauliho principem. Operátor celkového počtu částic pak definujeme pomocí

$$\hat{N} = \sum_k \hat{N}_k = \sum_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k.$$

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 $\hat{c}_k$. Začněme 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

$$\hat{T} = \sum_{k,k'} \langle\phi_k|\hat{T}|\phi_{k'}\rangle|\phi_k\rangle\langle\phi_{k'}|. \tag{20.13}$$

Pro N identických částic pozorovatelnou rozšíříme předpisem

$$\hat{T}^{(1)} = \sum_{l=1}^{N} \hat{I}_1 \otimes \ldots \hat{I}_{l-1} \otimes \hat{T} \otimes \hat{I}_{l+1} \otimes \ldots \otimes \hat{I}_N.$$

Pokud máme částice v jednočásticových stavech $|\phi_{k_1}\rangle, \ldots, |\phi_{k_N}\rangle$, pak na ně tento operátor působí následovně ($\hat{P} = \hat{S}, \hat{A}$ pro bosony, resp. fermiony)

$$\hat{T}^{(1)}\hat{P}|\phi_{k_1}, \ldots, \phi_{k_N}\rangle = \sum_{i=1}^{N}\sum_{l_i}\langle\phi_{l_i}|\hat{T}|\phi_{k_i}\rangle\hat{P}|\phi_{k_1}, \ldots, \phi_{l_i}, \ldots, \phi_{k_N}\rangle. \tag{20.14}$$

Ukážeme, že tento operátor lze na Fockově prostoru definovat pomocí kreačních a anihilačních operátorů ve tvaru

$$\hat{T}^{(1)} = \sum_{k,k'}\langle\phi_k|\hat{T}|\phi_{k'}\rangle\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{k'}. \tag{20.15}$$

Přepíšeme nejprve stav identických částic pomocí kreačních operátorů

$$\hat{P}|\phi_{k_1}, \ldots, \phi_{k_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{c}_{k_1}^\dagger \ldots \hat{c}_{k_N}^\dagger|0\rangle,$$

dosadíme ho spolu s (20.15) do (20.14). Operátor $\hat{T}^{(1)}$ budeme postupně komutovat skrz kreační operátory

$$\begin{aligned}
\hat{T}^{(1)}\hat{c}_{k_1}^\dagger \ldots \hat{c}_{k_N}^\dagger|0\rangle &= \left[\hat{T}^{(1)}, c_{k_1}^\dagger\right] c_{k_2}^\dagger \ldots \hat{c}_{k_N}^\dagger|0\rangle + \hat{c}_{k_1}^\dagger\hat{T}^{(1)}c_{k_2}^\dagger \ldots \hat{c}_{k_N}^\dagger|0\rangle = \ldots \\
&= \left[\hat{T}^{(1)}, c_{k_1}^\dagger\right] c_{k_2}^\dagger \ldots \hat{c}_{k_N}^\dagger|0\rangle + \hat{c}_{k_1}^\dagger\left[\hat{T}^{(1)}, c_{k_2}^\dagger\right]\hat{c}_{k_3}^\dagger \ldots \hat{c}_{k_N}^\dagger|0\rangle + \ldots + \\
&\quad \hat{c}_{k_1}^\dagger \ldots \hat{c}_{k_{N-1}}^\dagger\left[\hat{T}^{(1)}, c_{k_N}^\dagger\right]|0\rangle + \hat{c}_{k_1}^\dagger \ldots \hat{c}_{k_N}^\dagger\hat{T}^{(1)}|0\rangle.
\end{aligned} \tag{20.16}$$

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 (20.15) komutátor (platí pro bosony i fermiony)

$$\left[\hat{T}^{(1)}, \hat{c}_i^\dagger\right] = \sum_{k,k'}\langle\phi_k|\hat{T}|\phi_{k'}\rangle\underbrace{\left[\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{k'}, \hat{c}_i^\dagger\right]}_{\hat{c}_k^\dagger\delta_{k'i}} = \sum_k\langle\phi_k|\hat{T}|\phi_i\rangle\hat{c}_k^\dagger.$$

Dosazením do (20.16) dostaneme

$$\begin{aligned}
\hat{T}^{(1)}\hat{c}^\dagger_{k_1}\dots\hat{c}^\dagger_{k_N}|0\rangle &= \sum_{l_1}\langle\phi_{l_1}|\hat{T}|\phi_{k_1}\rangle\hat{c}^\dagger_{l_1}\hat{c}^\dagger_{k_2}\dots\hat{c}^\dagger_{k_N}|0\rangle + \sum_{l_2}\langle\phi_{l_2}|\hat{T}|\phi_{k_2}\rangle\hat{c}^\dagger_{k_1}\hat{c}^\dagger_{l_2}\hat{c}^\dagger_{k_3}\dots\hat{c}^\dagger_{k_N}|0\rangle + \dots \\
&= \sum_{i=1}^{N}\sum_{l_i}\langle\phi_{l_i}|\hat{T}|\phi_{k_i}\rangle\hat{c}^\dagger_{k_1}\dots\hat{c}^\dagger_{l_i}\dots\hat{c}^\dagger_{k_N}|0\rangle,
\end{aligned}$$

takže operátor (20.15) skutečně splňuje rovnici (20.14). Ve Fockově prostoru mají tedy jednočásticové operátory tvar (20.15). Porovnáním (20.15) a (20.13) vidíme, že operátor ve Fockově prostoru dostaneme formálně záměnou

$$|\phi_k\rangle \to \hat{c}^\dagger_k, \quad \langle\phi_{k'}| \to \hat{c}_{k'}.$$

Operátor počtu částic v módu $|\phi_k\rangle$ $\hat{N}_k = \hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k$ 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 $\mathcal{H}^{(2)}_{S/A}$

$$\hat{V} = \frac{1}{2!}\sum_{k,k'}\sum_{l,l'}\langle\phi_k,\phi_l|\hat{V}|\phi_{k'},\phi_{l'}\rangle|\phi_k,\phi_l\rangle\langle\phi_{k'},\phi_{l'}|.$$

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

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2!}\sum_{k,k'}\sum_{l,l'}\langle\phi_k,\phi_l|\hat{V}|\phi_{k'},\phi_{l'}\rangle\hat{c}^\dagger_k\hat{c}^\dagger_l\hat{c}_{l'}\hat{c}_{k'}. \tag{20.17}$$

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

$$\hat{H} = \sum_k E_k\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k = \sum_k E_k\hat{N}_k.$$

Pro bosony i fermiony jsou $\hat{c}^\dagger_i$, $\hat{c}_i$ posunovací operátory k hamiltoniánu $\hat{H}$

$$\begin{aligned}
\left[\hat{H},\hat{c}^\dagger_i\right] &= \sum_k E_k\underbrace{\left[\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k,\hat{c}^\dagger_i\right]}_{\hat{c}^\dagger_k\delta_{ki}} = E_i\hat{c}^\dagger_i, \\
\left[\hat{H},\hat{c}_i\right] &= \sum_k E_k\underbrace{\left[\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_k,\hat{c}_i\right]}_{-\hat{c}_k\delta_{ki}} = -E_i\hat{c}_i.
\end{aligned}$$

Vliv nějakého vnějšího pole U je popsaný 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 popsaná nějakým dvoučásticovým operátorem tvaru (20.17). 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.

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 (20.9), (20.10), resp. antikomutačních relacích pro fermiony (20.11), (20.12), se Kroneckerovo δ nahradí Diracovou δ-funkcí

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}_{\vec{p},\xi}^\dagger, \hat{a}_{\vec{p}',\xi'}^\dagger\right] &= \left[\hat{a}_{\vec{p},\xi}, \hat{a}_{\vec{p}',\xi'}\right] = 0, \quad \left[\hat{a}_{\vec{p},\xi}, \hat{a}_{\vec{p}',\xi'}^\dagger\right] = \delta_{\xi,\xi'} \delta(\vec{p} - \vec{p}'), \\ \left\{\hat{b}_{\vec{p},\xi}^\dagger, \hat{b}_{\vec{p}',\xi'}^\dagger\right\} &= \left\{\hat{b}_{\vec{p},\xi}, \hat{b}_{\vec{p}',\xi'}\right\} = 0, \quad \left\{\hat{b}_{\vec{p},\xi}, \hat{b}_{\vec{p}',\xi'}^\dagger\right\} = \delta_{\xi,\xi'} \delta(\vec{p} - \vec{p}'). \end{aligned}$$

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

$$\hat{N} = \sum_\xi \int_{\mathbb{R}^3} \hat{c}_{\vec{p},\xi}^\dagger \hat{c}_{\vec{p},\xi} d^3p.$$

Pro volné částice je jednočásticový hamiltonián

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2M}.$$

Pokud částice navíc neinteragují, pak celkový hamiltonián na Fockově prostoru je

$$\hat{H} = \sum_{\xi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{p^2}{2M} \hat{c}^\dagger_{\vec{p},\xi} \hat{c}_{\vec{p},\xi} d^3p.$$

Fockův prostor pro různé částice

Fockův prostor pro různé druhy částic sestrojíme tenzorovým součinem jednotlivých Fockových prostorů

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_B(\mathcal{H}_1) \otimes \ldots \otimes \mathcal{F}_B(\mathcal{H}_{N_B}) \otimes \mathcal{F}_F(\tilde{\mathcal{H}}_1) \otimes \ldots \otimes \mathcal{F}_F(\tilde{\mathcal{H}}_{N_F}),$$

kde N_B je počet druhů bosonů a N_F je počet druhů fermionů, $\mathcal{H}_i$ a $\tilde{\mathcal{H}}_i$ jsou příslušné jednočásticové prostory. Označíme kreační a anihilační operátory bosonu λ jako $\hat{a}^\dagger_{\lambda,k}$, $\hat{a}_{\lambda,k}$, pro fermion σ analogicky $\hat{b}^\dagger_{\sigma,k}$, $\hat{b}_{\sigma,k}$. Komutační a antikomutační relace pak mají tvar

$$\begin{aligned}
\left[\hat{a}^\dagger_{\lambda,k}, \hat{a}^\dagger_{\lambda',k'}\right] &= \left[\hat{a}_{\lambda,k}, \hat{a}_{\lambda',k'}\right] = 0, \quad \left[\hat{a}_{\lambda,k}, \hat{a}^\dagger_{\lambda',k'}\right] = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{kk'},\\
\left\{\hat{b}^\dagger_{\sigma,k}, \hat{b}^\dagger_{\sigma',k'}\right\} &= \left\{\hat{b}_{\sigma,k}, \hat{b}_{\sigma',k'}\right\} = 0, \quad \left\{\hat{b}_{\sigma,k}, \hat{b}^\dagger_{\sigma',k'}\right\} = \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{kk'},
\end{aligned}$$

přičemž všechny bosonové a fermionové operátory navzájem komutují

$$\left[\hat{a}^\dagger_{\lambda,k}, \hat{b}^\dagger_{\sigma',k'}\right] = \left[\hat{a}_{\lambda,k}, \hat{b}^\dagger_{\sigma',k'}\right] = \left[\hat{a}^\dagger_{\lambda,k}, \hat{b}_{\sigma',k'}\right] = \left[\hat{a}_{\lambda,k}, \hat{b}_{\sigma',k'}\right] = 0.$$

Hamiltonián takového systému může obsahovat, kromě členů popisující jednotlivé druhy částic samostatně, i členy popisující interakci různých druhů částic, např.

$$\hat{a}^\dagger_k \hat{b}_k + \hat{a}_k \hat{b}^\dagger_k$$

popisuje anihilaci fermionu za kreace bosonu a opačný proces; člen

$$\hat{a}^\dagger_{1,k}\hat{a}_{2,k}\hat{a}_{3,k} + \hat{a}_{1,k}\hat{a}^\dagger_{2,k}\hat{a}^\dagger_{3,k}$$

popisuje anihilaci bosonů 2 a 3 a kreaci bosonu 1 + opačný proces, atd.

Příklady

Cvičení 64. *Fermionový systém o dvou jednočásticových stavech $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$ lze popsat hamiltoniánem*

$$\hat{H} = E_1\hat{b}^\dagger_1\hat{b}_1 + E_2\hat{b}^\dagger_2\hat{b}_2 + J(\hat{b}^\dagger_1\hat{b}_2 + \hat{b}^\dagger_2\hat{b}_1). \tag{20.18}$$

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

$$|\psi(0)\rangle = \hat{b}_1^\dagger|0\rangle = |1,0\rangle. \tag{20.19}$$

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 (20.19) 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'

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(t) = H'\psi(t), \quad \psi(t) = \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}, \tag{20.20}$$

s počáteční podmínkou $\alpha(0) = 1$, $\beta(0) = 0$. Vlastní čísla a vlastní vektory matice H' jsou

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{E}_1 = 2J, \\ \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{E}_2 = -\frac{1}{2}J. \end{aligned}$$

Řešením (20.20) 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 65. *Uvažujte bosonový systém se třemi typy částic (a, b, c), každá má pouze jeden mód. Hamiltonián systému je*

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{b}\hat{c} + \hat{a}\hat{b}^\dagger\hat{c}^\dagger), \tag{20.21}$$

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

$$\begin{aligned} \hat{H}|2,0,0\rangle &= \sqrt{2}|1,1,1\rangle, \\ \hat{H}|1,1,1\rangle &= \sqrt{2}|2,0,0\rangle + 2|0,2,2\rangle, \\ \hat{H}|0,2,2\rangle &= 2|1,1,1\rangle. \end{aligned} \tag{20.22}$$

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 (20.22)

$$H' \equiv \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}. \tag{20.23}$$

Vlastní čísla a vlastní vektory matice jsou

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad E_1 = 0, \\ \psi_2 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad E_2 = \sqrt{6}\hbar\omega, \\ \psi_3 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad E_3 = -\sqrt{6}\hbar\omega. \end{aligned}$$

Časový vývoj počátečního stavu je pak ($\psi(0) = (1,0,0)^T$)

$$\begin{aligned} \psi(t) &= (\psi_1, \psi(0))\,\psi_1 + (\psi_2, \psi(0))\,\psi_2 e^{-i\sqrt{6}\omega t} + (\psi_3, \psi(0))\,\psi_3 e^{i\sqrt{6}\omega t} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{2}{3} + \frac{1}{6}\left(e^{-i\sqrt{6}\omega t} + e^{i\sqrt{6}\omega t}\right) \\ \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(e^{-i\sqrt{6}\omega t} - e^{i\sqrt{6}\omega t}\right) \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} + \frac{1}{3\sqrt{2}}\left(e^{-i\sqrt{6}\omega t} + e^{i\sqrt{6}\omega t}\right) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

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 66. *Uvažujte systém bosonů (a) a fermionů (b), každý s jedním módem. Najděte spektrum hamiltoniánu*

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{b} + \hat{a}\hat{b}^\dagger\right). \tag{20.24}$$

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 $n_a = n \in \mathbb{N}_0, n_b \in \{0,1\}$:

$$\hat{H}|n,0\rangle = \hbar\omega\sqrt{n}|n-1,1\rangle,$$
$$\hat{H}|n,1\rangle = \hbar\omega\sqrt{n+1}|n+1,0\rangle.$$

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 (20.24) je tedy

$$\sigma(\hat{H}) = \{0\} \cup \{\pm\sqrt{n}\hbar\omega | n \in \mathbb{N}\}.$$