



KATEDRA TEORETICKEJ FYZIKY A DIDAKTIKY FYZIKY
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY
UNIVERZITA KOMENSKÉHO, BRATISLAVA

HAMILTONOVSKÝ POHĽAD NA DYNAMIKU V KVANTOVEJ MECHANIKE

Bakalárska práca

4.1.1 Fyzika

JANA KLAUDÍNIOVÁ

Vedúci: doc. RNDr. Marián Fecko, PhD.

Bratislava, 2009

Čestné prehlásenie

Vyhlasujem, že som bakalársku prácu vypracovala samostatne s použitím uvedenej odbornej literatúry.

Bratislava 12.6.2009

.....

Jana Klaudíniová

PodĎakovanie

Na tomto mieste by som sa chcela poĎakovať svojmu bakalárskemu vedúcemu doc. RNDr. Mariánovi Feckovi PhD. za množstvo času, ktorý mi venoval, za trpezlivosť, za podnecujúce rozhovory a hlavne za možnosť naučiť sa niečo také pekné a zaujímavé.

Názov práce: Hamiltonovský pohľad na dynamiku v kvantovej mechanike

Pracovisko: KTFDF, FMFI UK v Bratislave

Autor: Jana Klaudíniová

Vedúci: doc. RNDr. Marián Fecko, PhD.

Dátum: 12.6.2009

Kľúčové slová: Schrödingerova rovnica, Hamiltonove rovnice, vektorové pole, unitárny časový vývoj

Abstrakt: Práca sa zaoberá možnosťou prepísania Schrödingerovej rovnice do tvaru Hamiltonových rovníc a hľadáním súvislostí medzi týmito dvoma vyjadreniami rovníc. V skutočnosti vznikajú až dve hamiltonovské mechaniky - jedna opisuje pohyb vektorov v Hilbertovom priestore, druhá pohyb naozajstných stavov (lúčov). Ukáže sa, že za touto možnosťou prepisu je na úrovni vektorov unitarita časového vývoja v Schrödingerovej rovnici. Poukáže sa aj na zaujímavú súvislosť rýchlosti pohybu vo fázovom priestore a vzťahu neurčitosti času a energie. Na záver sa ako príklad explicitne počíta z tohoto pohľadu dvojhladinová sústava, kde sa aplikuje väčšina vedomostí získaných v tejto práci.

Predhovor

Cieľom tejto bakalárskej práce je pozrieť sa na dynamiku v kvantovej mechanike z trochu iného uhla ako sa bežne prezentuje na prednáškach z kvantovej teórie.

Ukážeme si, že vďaka *unitarite* časového vývoja daného *Schrödingerovou rovnicou* sa dá táto rovnica prepísať na sústavu *Hamiltonových rovníc*. Potom sa na časový vývoj v kvantovej mechanike dá pozeráť ako na hamiltonovský časový vývoj známy z klasickej mechaniky. Tento hamiltonovský vývoj má navyše *špeciálne* vlastnosti. Umožňuje napríklad meranie dĺžok vo fázovom priestore.

V plnom rozsahu táto téma nie je dostupná študentom na bakalárskom stupni, lebo si vyžaduje poznať aparát diferenciálnej geometrie, ktorá sa prednáša až na magisterskom stupni.

Napriek tomu sa táto práca snaží preniknúť do problematiky na úrovni *prístupnej* študentom tretieho ročníka fyziky, ktorí absolvovali prednášky z teoretickej mechaniky a z kvantovej teórie. Využíva pritom hlavne *lineárnu algebru* a len minimálne znalosti z diferenciálnej geometrie, ktoré sú na *intuitívnej* úrovni vysvetlené v kapitole 1. Celá práca je napísaná skôr na intuitívnej úrovni, aby si čitateľ vytvoril *základnú* predstavu, ktorú si môže neskôr, po doštudovaní potrebného aparátu, upresniť.

Z tohoto dôvodu sa tu pracuje hlavne v jednoduchšom priestore komplexných vektorov. Až pri konci práce sa v náznakoch ukáže prechod do na-

ozajstého fázového priestoru, do priestoru *lúčov*. Priestor lúčov (projektívny priestor) je varietou, na ktorej už treba na opis hamiltonovskej mechaniky vedieť z diferenciálnej geometrie viac.

Obsah

Predhovor	viii
Úvod	1
1 Vektorové polia	3
1.1 Čo je to vektorové pole?	3
1.1.1 Príklad	6
1.2 Integrálne krivky vektorového poľa	7
1.2.1 Príklad	9
1.3 Tok vektorového poľa	9
1.3.1 Príklad	10
2 Hamiltonove rovnice	12
2.1 Vektorové pole zodpovedajúce Hamiltonovým rovniciam	12
2.1.1 Príklad	13
2.2 Komplexný zápis	15
2.3 Lineárne Hamiltonove rovnice	16
2.3.1 Malé kmity	18
3 Schrödingerova rovnica	21
3.1 Hamiltonove rovnice zodpovedajúce Schrödingerovej rovnici .	21

4	Časový vývoj v Schrödingerovej rovnici	24
4.1	Unitárny časový vývoj	24
4.2	Hermitovský skalárny súčin	27
4.2.1	Realifikácia komplexného priestoru \mathbb{C}^n	27
4.2.2	Vlastnosti dvoch reálnych bilineárnych foriem	29
4.3	Odkiaľ prišli Hamiltonove rovnice do kvantovej mechaniky?	31
5	Pohyb vo fázovom priestore	36
5.1	Veľkosť rýchlosti	37
5.2	Veľkosť kolmej zložky rýchlosti	38
6	Variety	42
6.1	Čo je to varieta?	42
6.2	Sféra S^2	44
6.3	Komplexný projektívny priestor $\mathbb{C}P^1$	47
7	Dvojhľadínová sústava	50
7.1	Riešenie v $\mathbb{C}P^1$	50
7.2	Izomorfizmus medzi $\mathbb{C}P^1$ a S^2	53
7.3	Riešenie na sfére S^2	56
7.4	Hamiltonovský časový vývoj	58
	Literatúra	61

Zoznam obrázkov

1.1	Pole $V = -y\partial_x + x\partial_y$	6
1.2	Tok vektorového poľa	10
2.1	Fázový portrét oscilátora	14
4.1	Hamiltonovský časový vývoj	33
5.1	Vektory rýchlosti v \mathbb{R}^2	39
6.1	Lokálne súradnice na kružnici	43
6.2	Dve mapy na kružnici	43
6.3	Stereografická projekcia na sfére S^2	45
7.1	Dvojhľadínová sústava - fázový portrét na sfére	58

Úvod

Schrödingerovu rovnicu

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \hat{H}\Psi$$

poznáme z prednášok kvantovej teórie. S Hamiltonovými rovnicami

$$\begin{aligned}\dot{q}_a &= \frac{\partial H}{\partial p_a}, \\ \dot{p}_a &= -\frac{\partial H}{\partial q_a}\end{aligned}$$

sme sa stretli na prednáškach z teoretickej mechaniky.

Sú to teda všetko známe rovnice. Ale napadlo Vám niekedy, že tieto rovnice majú niečo spoločné? Ak neviete, čo ich spája, a chceli by ste sa to dozvedieť, tak práve pre Vás je určená táto bakalárska práca.

Prvé pozorovanie skúmaných rovníc hovorí, že sú to *diferenciálne rovnice prvého rádu* a vyskytujú sa v nich derivácie voči *času*. Odtiaľto by sme sa mohli odraziť. Na popis takýchto diferenciálnych rovníc prvého rádu sa hodia *vektorové polia*. Ale treba ich vidieť trochu ináč ako sme ich vnímali doteraz. Preto si v kapitole 1 porozprávame o tom, čo sú vektorové polia, ich *integrálne krivky* a *toky*. Ku každému z týchto nových pojmov pripojíme aj ilustratívny príklad.

Následne v kapitole 2 použijeme tieto nové nástroje na staré známe Hamiltonove rovnice a uvidíme ich z nového uhla. Zistíme, že za Hamiltonovými rovnicami je skryté vektorové pole, a aj to, že sa dajú prepísať do *komplexného* jazyka.

Odtiaľ je už len krôčik k Hamiltonovým rovniciam prislúchajúcim k Schrödingerovej rovnici.

V ďalších kapitolách podrobnejšie preskúmame, ako je vlastne možné, že sa Schrödingerova rovnica dá prepísať na Hamiltonove rovnice. Ukážeme si, že je to vďaka *unitarite* časového vývoja daného Schrödingerovou rovnicou. Z toho vyplývajú ďalšie zaujímavé zistenia. Napríklad súvislosť medzi veľkosťou rýchlosti pohybu vo fázovom priestore a *vzťahom neurčitosti energie a času*.

V poslednej kapitole využijeme získané teoretické vedomosti v príklade o *dvojhladinovej sústave*.

Kapitola 1

Vektorové polia

1.1 Čo je to vektorové pole?

S vektorovými poľami sa vo fyzike stretávame často. Je to predpis, ktorým každému bodu v priestore priradíme nejaký vektor. Poznáme napríklad vektorové pole sily (magnetickej, gravitačnej, ...), elektrickej intenzity, vektorové pole rýchlosti tečúcej kvapaliny atď. Všeobecné vektorové pole v n -rozmernom priestore má tvar

$$V = V_i(x_1, \dots, x_n)e_i. \quad (1.1)$$

kde e_i sú bázové vektory v smeroch x_i , koeficienty V_i sú funkciami polohy a nazývajú sa *zložky (komponenty)* poľa V . Keď uvidíme v súčine jeden index dvakrát, ako v tomto prípade index i , znamená to že cez neho *presumujeme* od jedna po n . Túto sumačnú konvenciu budeme používať v celej práci.

V tejto podkapitole si ukážeme, že na vektorové pole sa dá pozeráť aj ako na *diferenciálny operátor prvého rádu*.

Začneme tým, že si ujasníme prípadné nové pojmy.

- *Operátor* je zobrazenie, ktoré funkcii priradí funkciu.

- *Diferenciálny* operátor robí toto priradenie pomocou derivovania. Napríklad funkcii priradí jej deriváciu.
- Diferenciálny operátor *prvého rádu* obsahuje derivácie nanaajvyšvého rádu.

Uvažujme diferenciálny operátor prvého rádu v n -rozmernom priestore, ktorý vyzerá takto:

$$W = W_i(x_1, \dots, x_n)\partial_i, \quad \text{používame označenie} \quad \partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (1.2)$$

Koeficienty W_i sú funkciami polohy a ∂_i sú parciálne derivácie v smere i .

Aká je spojitosť vektorových polí a takýchto diferenciálnych operátorov? Najprv si treba uvedomiť podobnosti vektorov a parciálnych derivácií.

Po prvé, oboje nám dáva informáciu o *smere*. Bázové vektory e_i majú orientáciu v smere nárastu i -tej súradnice. Rovnaký smer môžeme priradiť aj parciálnym deriváciám ∂_i , lebo tiež pracujú v smere nárastu i -tej súradnice.

Po druhé, rovnako ako sa z bázových vektorov dá *lineárnou kombináciou* zložiť ľubovoľný vektor z daného priestoru, dá sa z parciálnych derivácií v základných smeroch (záleží od zvolených súradníc, napr. x, y) vyskladať derivácia v ľubovoľnom smere. Čiže výraz $a\partial_x + b\partial_y$ znamená parciálnu deriváciu v smere jednotkového vektora

$$n = \frac{1}{\sqrt{a^2 + b^2}}(a, b), \quad (1.3)$$

ktorá je vynásobená ešte číslom $\sqrt{a^2 + b^2}$.

Vlastne takýmto spôsobom môžeme *jednoznačne* priradiť každému vektoru smerovú deriváciu a opačne. Derivácia bude určená smerom daného vektora a ešte vynásobená jeho veľkosťou. Naopak, ak máme deriváciu, pozrieme sa na jej smer, na číslo, ktorým je prenasobená a máme vektor. Takže napríklad vektoru $(a, b) = ae_x + be_y$ vieme priradiť smerovú deriváciu a $a\partial_x + b\partial_y$. Prakticky to robíme len prepísaním e_i na ∂_i .

Teraz sa už začína vynárať súvislosť medzi diferenciálnym operátorom a vektorovým poľom. Vektorové pole priradí každému bodu *vektor*, ktorý je lineárnou kombináciou bázových vektorov. Koefficienty tejto lineárnej kombinácie sú komponenty poľa V_i vyčíslené v danom bode. Diferenciálny operátor (1.2) robí niečo veľmi podobné. Priradí každému bodu *smerovú deriváciu* vyčíslenú v danom bode, ktorá je lineárnou kombináciou základných smerov parciálnych derivácií. Koefficienty tejto lineárnej kombinácie sú funkcie W_i vyčíslené v danom bode.

Keďže medzi vektormi a smerovými deriváciami poznáme jednoznačné zobrazenie, tak vektorové pole (1.1) aj diferenciálny operátor (1.2) robia vlastne presne to isté (priraďujú bodu to isté). Takýmto spôsobom môžeme *stotožniť* vektorové pole a diferenciálny operátor prvého rádu. Odteraz ich budeme považovať za jedno a to isté len v inom zápise. My budeme pracovať hlavne s operátormi.

Vektorové pole zapísané ako diferenciálny operátor (1.2) sa dá podobne pekne nakresliť ako pole v klasickom zápise (1.1). Musíme si však uvedomiť jeden rozdiel. Sme zvyknutí, že vektor má okrem smeru aj veľkosť. Napríklad bázové vektory e_i majú jednotkovú dĺžku a od toho sa odvodzuje dĺžka ostatných vektorov vo vektorovom priestore. Parciálne derivácie nemajú určenú dĺžku. Kreslia sa síce ako šípky s rovnakou veľkosťou, ale treba mať na pamäti, že v skutočnosti sú tieto šípky veľmi maličké. Až také maličké, že sú „schované v bode“, z ktorého ich kreslíme. Takže nám prezrádzajú len *smer* vektorov a pomery ich veľkostí (ak vezmeme $6\partial_x$ je to trikrát viac ako $2\partial_x$).

Treba si uvedomiť, že *smer* je to hlavné, čo potrebujeme vedieť. Ak chceme zistiť, ako sa niečo vyvíja, pozeráme sa vždy len *infinitesimalne* ďaleko od daného bodu a zaujíma nás, ktorým smerom sa pohneme. Keď vieme smer, tak za čas ϵ (infinitesimalne krátko) pôjdeme daným smerom a potom sa znovu pozrieme, ako ďalej.

1.1.1 Príklad

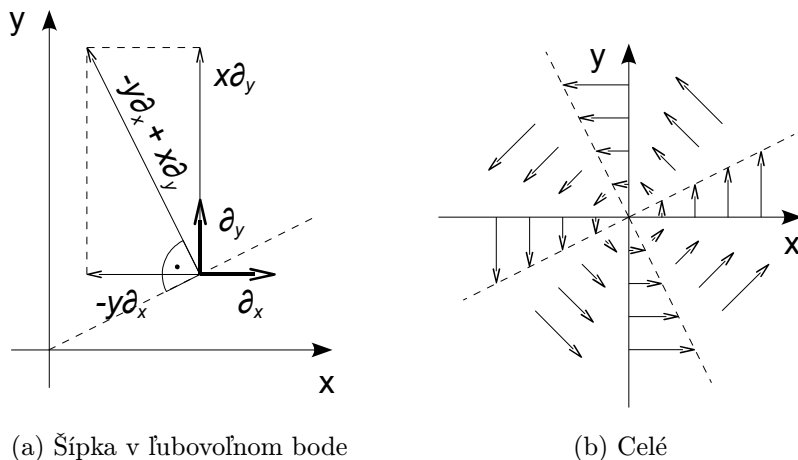
Majme vektorové pole:

$$V = -y\partial_x + x\partial_y. \quad (1.4)$$

Skúsime si ho nakresliť. V každom bode si vyznačíme šípku podľa predpisu (1.4). Bázové vektory ∂_x a ∂_y si nakreslíme ako rovnako dlhé šípky a vektory poľa V budú násobkami týchto bázových vektorov.

Začneme kresliť na súradnicových osiach. Pre body na osi x platí $y = 0$, takže šípky budú kolmé na os x a ich dĺžka bude lineárne narastať s x . Podobne postupujeme na osi y .

Keď chceme nakresliť šípku v ľubovoľnom inom bode, pozrieme sa na jeho x -ovú a y -ovú súradnicu a nakreslíme v smere x šípku dĺžky $-y\partial_x$ a v smere y šípku dĺžky $x\partial_y$. Tieto dve šípky sčítame tak, ako bežne sčítavame vektory (obr. 1.1a). Nakoniec dostaneme obrázok poľa (obr. 1.1b).



Obr. 1.1: Pole $V = -y\partial_x + x\partial_y$

Zaujímavé je, že nakreslené šípky sú *kolmé* na spojnicu počiatku súradnicovej sústavy a bodu, z ktorého vychádzajú. Dôvod uvidíme, keď si predpis

poľa prepíšeme do polárnych súradníc

$$x = r \cos \varphi, \quad \frac{\partial x}{\partial \varphi} = -r \sin \varphi = -y, \quad (1.5)$$

$$y = r \sin \varphi, \quad \frac{\partial y}{\partial \varphi} = r \cos \varphi = x. \quad (1.6)$$

Potom

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \varphi} &= \underbrace{\frac{\partial x}{\partial \varphi}}_{-y} \frac{\partial}{\partial x} + \underbrace{\frac{\partial y}{\partial \varphi}}_x \frac{\partial}{\partial y}, \\ \partial_\varphi &= -y\partial_x + x\partial_y = V. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Celé vektorové pole V sa po prepise do polárnych súradníc zmenilo len na

$$V = \partial_\varphi = 1 \cdot \partial_\varphi + 0 \cdot \partial_r. \quad (1.8)$$

Čiže len na parciálnu deriváciu podľa φ , ktorá má smer nárastu uhla φ . V smere r sa nič v poli nehýbe, preto sú šípky na obr. 1.1 kolmé na spojnicu počiatku súradnicovej sústavy a bodu, z ktorého vychádzajú.

1.2 Integrálne krivky vektorového poľa

Na hodinách fyziky sme sa veľakrát stretli so siločiarami vektorového poľa. Sú to čiary, ktoré majú v každom bode *smerektora určeného vektorovým poľom*. Dajú sa nimi názorne zobrazíť vlastnosti študovaného poľa.

Integrálne krivky sú veľmi podobné siločiaram majú však navyše aj *parametrizáciu*, ktorá určuje ich časový vývoj. To znamená, že ak sa nachádzame v nejakom bode a chceme ísť do iného bodu, čiara nám povie kadiaľ pôjdeme a parametrizácia ako sa bude meniť naša rýchlosť. Môžeme si to predstaviť ako prúd tečúcej vody. Integrálna krivka popisuje, ako *rýchlo* a akým *smenom* bude unášaná smietka pustená do vody. Smer krivky určuje jej derivácia a rýchlosť je veľkosť derivácie v danom bode. Navyše vieme, že rýchlosť

a smer integrálnej krivky γ v každom bode P sú určené vektorovým poľom V , takže platí:

$$\dot{\gamma}(P) = V(P). \quad (1.9)$$

Aby sme našli súradnicové vyjadrenie pre integrálnu krivku, stačí si postupne rozpísať ľavú a pravú stranu tejto rovnice.

Začneme ľavou stranou. V súradniciach v danom vektorovom priestore má krivka γ ako funkcia parametra t zápis

$$\gamma(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t)) \quad (1.10)$$

a jej derivácia v bode P je

$$\dot{\gamma}(P) = \dot{x}_i(P) \partial_i|_P. \quad (1.11)$$

Na pravej strane v (1.9) je vektor v bode P

$$V(P) = V_i(P) \partial_i|_P. \quad (1.12)$$

Po dosadení našich výpočtov (1.12) a (1.11) do pôvodnej rovnice (1.9) vyjde:

$$\dot{x}_i(P) \partial_i|_P = V_i(P) \partial_i|_P. \quad (1.13)$$

Teraz si stačí všimnúť, aké koeficienty sú pri rovnakých deriváciách ∂_i . A keďže rovnosť (1.13) má platiť v každom bode, dostaneme diferenciálne rovnice pre súradnice integrálnej krivky

$$\dot{x}_i = V_i(x_1, \dots, x_n). \quad (1.14)$$

Neskôr, keď budeme hľadať integrálne krivky, teda stačí na jednu stranu rovnice napísať obodkovanú i -tu súradnicu \dot{x}_i a na druhú stranu komponentu vektorového poľa V_i , ktorú nájdeme stáť pri parciálnej derivácii ∂_i .

Sústava diferenciálnych rovníc (1.14) predstavuje predpis pre nájdenie integrálnych kriviek konkrétneho poľa V . Dá sa však na to pozeráť aj *opačne*.

Každá takáto sústava diferenciálnych rovníc prvého rádu popisuje integrálne krivky nejakého vektorového poľa. Vyšetrením tohoto vektorového poľa sa dá niečo zistiť o daných diferenciálnych rovniciach.

1.2.1 Príklad

Zoberme si vektorové pole (1.8) z predchádzajúceho príkladu zapísané v polárnych súradniciach

$$V = \partial_\varphi = 1 \cdot \partial_\varphi + 0 \cdot \partial_r \quad (1.15)$$

a skúsme nájsť jeho integrálne krivky.

Budeme postupovať podľa vyššie popísaného návodu. K i -tej súradnici s bodkou napíšeme V_i . Takto získame jednoduchú sústavu rovníc:

$$\dot{\varphi} = V_\varphi \quad \Rightarrow \quad \dot{\varphi} = 1, \quad (1.16)$$

$$\dot{r} = V_r \quad \Rightarrow \quad \dot{r} = 0, \quad (1.17)$$

ktorej riešením je

$$r(t) = r_0, \quad (1.18)$$

$$\varphi(t) = t + \varphi_0, \quad (1.19)$$

kde r_0 a φ_0 sú súradnice bodu na integrálnej krivke v čase $t = 0$.

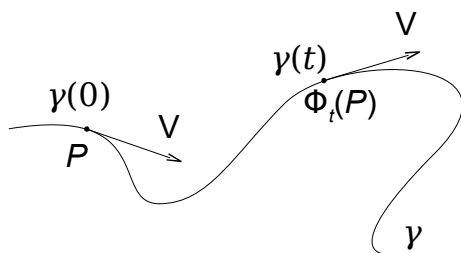
Z rovnice (1.18) vidíme, že vzdialenosť od počiatku - r ostáva vždy konštantná (nezávisí od času) a z rovnice (1.19) vyčítame, že uhol φ s časom rovnomerne narastá. Takže integrálne krivky predstavujú *rovnomerný pohyb po kružnici* polomeru r_0 .

1.3 Tok vektorového poľa

Integrálne krivky vytvárajú vo vektorovom priestore zaujímavú *štruktúru*. Ak si každú predstavíme, ako prúd vody, tak spolu vytvárajú čosi ako *rieku*

vo vektorovom priestore. Táto rieka „tečie“ v každom okamihu *rovnako* (rovnako rýchlo, rovnakým smerom), lebo vektor rýchlosti „tečenia“ je v danom bode určený vektorovým poľom a je *nezávislý* od času. Pohyb bodu unášaného jej prúdom je teda presne určený.

Ak sledujeme tento bod za čas t dostane sa z bodu $\gamma(0)$ do bodu $\gamma(t)$. Takto získame zobrazenie Φ_t , ktoré každému bodu v čase 0 priradí bod v čase t .



Obr. 1.2: Tok vektorového poľa

Platí tiež, že ak sa bod pohybuje po integrálnej krivke za čas t a potom ešte za čas s , dostane sa do toho istého bodu, ako keby sa od začiatku naraz pohyboval čas $t + s$

$$\Phi_t \circ \Phi_s = \Phi_{t+s}. \quad (1.20)$$

1.3.1 Príklad

Opäť sa pozrieme na vektorové pole (1.8)

$$V = \partial_\varphi. \quad (1.21)$$

Pripomeňme si, že integrálne krivky majú tvar:

$$r(t) = r_0, \quad (1.22)$$

$$\varphi(t) = t + \varphi_0 \quad (1.23)$$

a vyjadrujú rovnomerný pohyb po kružnici.

Takže tok Φ_t priradí bodu (r, φ) bod $(r, \varphi + t)$.

$$\Phi_t : (r, \varphi) \mapsto \Phi_t(r, \varphi) = (r, \varphi + t) \quad (1.24)$$

To znamená, že celá rovina sa za čas t otočí o uhol t .

Pozrieme sa na to ešte z pohľadu *kartézskych* súradníc. Zápis nášho vektorového poľa v kartézskych súradniciach vyzerá:

$$V = -y\partial_x + x\partial_y. \quad (1.25)$$

Postupom z podkapitoly 1.2 nájdeme sústavu diferenciálnych rovníc pre integrálne krivky

$$\dot{x} = -y, \quad (1.26)$$

$$\dot{y} = x \quad (1.27)$$

a vyriešime ich:

$$x(t) = x_0 \cos t - y_0 \sin t, \quad (1.28)$$

$$y(t) = x_0 \sin t + y_0 \cos t. \quad (1.29)$$

Rovniciam (1.28), (1.29) lepšie porozumieme, ak si zapíšeme sústavu v maticovom tvare:

$$\begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix}}_{\text{matica rotácie}} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

Objavila sa nám tam *matica rotácie*. Takže zobrazenie Φ_t otočí polohový vektor o uhol t . Toto potvrdilo naše predchádzajúce zistenie v prípade polárnych súradníc. Tok nášho vektorového poľa *otáča rovinu*.

Kapitola 2

Hamiltonove rovnice

2.1 Vektorové pole zodpovedajúce Hamiltonovým rovniciam

Hamiltonove rovnice sú:

$$\dot{q}_a = \frac{\partial H}{\partial p_a} \quad (2.1)$$

$$\dot{p}_a = -\frac{\partial H}{\partial q_a}, \quad (2.2)$$

kde q_a sú zovšeobecnené súradnice, p_a zovšeobecnené hybnosti a H je hamiltonián, ktorý je funkciou q_a a p_a .

Hamiltonove rovnice sú diferenciálne rovnice *prvého* rádu. V podkapitole (1.2) sme zistili, že na každú takúto sústavu diferenciálnych rovníc prvého rádu sa môžeme pozeráť ako na *rovnice pre integrálne krivky* (1.14) nejakého vektorového poľa. Vektorové pole nájdeme podľa návodu z podkapitoly (1.2): pozrieme sa, čo je na pravej strane rovnice pre a -tu obodkovanú súradnicu integrálnej krivky a to bude a -ta zložka nášho vektorového poľa. Nájdene vektorové pole má tvar:

$$V = \frac{\partial H}{\partial p_a} \partial_{q_a} - \frac{\partial H}{\partial q_a} \partial_{p_a}. \quad (2.3)$$

Pozrime sa, ako vyzerá vektorové pole pre nejaký konkrétny hamiltonián.

2.1.1 Príklad

Nájdeme vektorové pole pre jednorozmerný lineárny harmonický oscilátor a nakreslíme si jeho integrálne krivky.

Hamiltonián v tomto prípade je

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kq^2. \quad (2.4)$$

Podľa rovnice (2.3) vypočítame vektorové pole

$$V = \frac{p}{m}\partial_q - kq\partial_p. \quad (2.5)$$

A známym postupom zostavíme aj rovnice pre integrálne krivky

$$\dot{q} = \frac{p}{m}, \quad (2.6)$$

$$\dot{p} = -kq, \quad (2.7)$$

kde p , q sú funkcie závislé od času. Možno v týchto rovniciach čitateľ spoznáva obyčajné Hamiltonove rovnice pre harmonický oscilátor s hamiltoniánom (2.4). Nie je to náhoda. Veď vektorové pole (2.3) sme *konštruovali* tak, aby rovnice pre integrálne krivky, ktoré z neho dostaneme, boli Hamiltonovými rovnicami.

Pre počiatočné podmienky

$$q(0) = q_0, \quad (2.8)$$

$$p(0) = p_0 \quad (2.9)$$

dostaneme riešenie

$$q = q_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin(\omega t), \quad (2.10)$$

$$p = -q_0 m \omega \sin \omega t + p_0 \cos(\omega t). \quad (2.11)$$

Priamym výpočtom sa dá overiť, že platí

$$\frac{q^2}{\frac{p_0^2}{(m\omega)^2} + q_0^2} + \frac{p^2}{p_0^2 + m\omega q_0^2} = 1,$$

$$\frac{q^2}{\frac{2E}{k}} + \frac{p^2}{2mE} = 1. \quad (2.12)$$

Využili sme pri tom, že celková mechanická energia harmonického oscilátora je

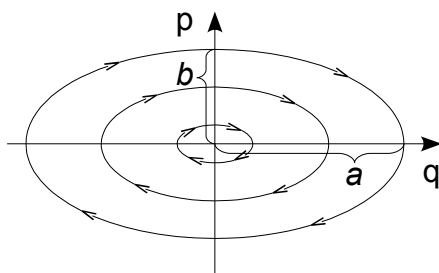
$$E = \frac{p_0^2}{2m} + \frac{1}{2}kq_0^2. \quad (2.13)$$

Rovnica (2.12) je rovnicou *elipsy* s polosami a , b

$$a^2 = \frac{2E}{k}, \quad (2.14)$$

$$b^2 = 2mE. \quad (2.15)$$

Pre danú hmotnosť m a tuhosť k oscilátora závisí veľkosť elipsy len od jeho celkovej energie. Energiu nastavíme počiatocnými podmienkami. Ak majú dve rôzne počiatocné podmienky rovnakú energiu, pohyb oscilátora bude popísaný tou istou elipsou len začne v inom bode. *Pomer* polosí nezávisí od energie, takže ak máme dve počiatocné podmienky s rôznou energiou, dostaneme sústredné elipsy rovnakého tvaru, len jedna bude väčšia.



Obr. 2.1: Fázový portrét oscilátora

Celý náš výsledok nápadne pripomína *fázový portrét* lineárneho harmonického oscilátora, ktorý poznáme z hodín teoretickej mechaniky. Skutočne,

keď si nakreslíme integrálne krivky (obr. 2.1), tak zistíme, že je to *presne* náš známy fázový portrét.

2.2 Komplexný zápis

Hamiltonove rovnice sa dajú zapísať aj pomocou *komplexnej* premennej. Tento zápis sa nám v budúcnosti zíde, preto si ho v tejto podkapitole odvodíme.

Budeme pracovať v n -rozmernom komplexnom priestore, aby sme dostali čo najvšeobecnejší výsledok. Celé odvodenie spočíva v tom, že si zavedieme namiesto $2n$ reálnych premenných (q_a a p_a) n komplexných premenných z_a

$$z_a = q_a + ip_a \quad (2.16)$$

a všetko dôležité prepíšeme pomocou tejto substitúcie.

Najprv si z rovnice (2.16) vyjadríme

$$q_a = \frac{1}{2}(z_a + \bar{z}_a), \quad (2.17)$$

$$p_a = \frac{1}{2i}(z_a - \bar{z}_a), \quad (2.18)$$

kde \bar{z}_a je komplexne združené k z_a . Ďalej potrebujeme poznať

$$\partial_{q_a} = \frac{\partial z_a}{\partial q_a} \frac{\partial}{\partial z_a} + \frac{\partial \bar{z}_a}{\partial q_a} \frac{\partial}{\partial \bar{z}_a} = \partial_a + \bar{\partial}_a, \quad (2.19)$$

$$\partial_{p_a} = \frac{\partial z_a}{\partial p_a} \frac{\partial}{\partial z_a} + \frac{\partial \bar{z}_a}{\partial p_a} \frac{\partial}{\partial \bar{z}_a} = i(\partial_a - \bar{\partial}_a). \quad (2.20)$$

Pre zjednodušenie zápisu sme si zaviedli označenie

$$\frac{\partial}{\partial z_a} = \partial_a, \quad \frac{\partial}{\partial \bar{z}_a} = \bar{\partial}_a.$$

Teraz všetko dosadíme do obyčajných Hamiltonových rovníc:

$$\dot{q}_a = \frac{\partial H}{\partial p_a}, \quad (2.21)$$

$$\frac{1}{2}\dot{z}_a + \frac{1}{2}\dot{\bar{z}}_a = i(\partial_a H - \bar{\partial}_a H). \quad (2.22)$$

Analogicky pre druhú polovicu rovníc

$$\dot{p}_a = -\frac{\partial H}{\partial q_a}, \quad (2.23)$$

$$\frac{1}{2i}\dot{z}_a - \frac{1}{2i}\dot{\bar{z}}_a = -i(\partial_a H + \bar{\partial}_a H). \quad (2.24)$$

Po sčítaní resp. odčítaní rovníc (2.22) a (2.24) dostaneme Hamiltonove rovnice v komplexných súradniciach

$$\dot{z}_a = -2i\bar{\partial}_a H, \quad (2.25)$$

$$\dot{\bar{z}}_a = 2i\partial_a H. \quad (2.26)$$

Táto sústava rovníc znovu predstavuje sústavu rovníc pre integrálne krivky. Z toho vyplýva, že vektorové pole zodpovedajúce Hamiltonovým rovniciam má v komplexnom zápise tvar:

$$V = -2i(\bar{\partial}_a H)\partial_a + 2i(\partial_a H)\bar{\partial}_a. \quad (2.27)$$

Odtiaľto vidieť, že sa naozaj jedná o *reálne* pole len prepísané do komplexných premenných. Keď ho komplexne združíme, dostaneme to isté.

2.3 Lineárne Hamiltonove rovnice

Zaujímavým prípadom Hamiltonových rovníc sú *lineárne* Hamiltonove rovnice. Všeobecne si ich môžeme zapísať ako

$$\dot{x}_a = A_{ab}x_b, \quad (2.28)$$

kde A je nejaká štvorcová matica a x je teraz označenie pre súradnice aj pre hybnosť.

Linearita Hamiltonových rovníc je naozaj špeciálny prípad. Napríklad aj taký jednoduchý mechanický systém ako matematické kyvadlo má *neline-*

árne Hamiltonove rovnice:

$$\dot{\varphi} = \frac{p}{ml^2}, \quad (2.29)$$

$$\dot{p} = -mgl \sin \varphi. \quad (2.30)$$

Preskúmame teda, čo vieme povedať v prípade lineárnych Hamiltonových rovníc o hamiltoniáne.

Po prvé, poznáme tvar *vektorového poľa* pre Hamiltonove rovnice (2.3). Jeho a -ta komponenta sa dá vyjadriť v tvare

$$V_a = \omega_{ab}(\partial_b H), \quad (2.31)$$

kde

$$\omega = \begin{pmatrix} 0_n & \mathbb{I}_n \\ -\mathbb{I}_n & 0_n \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Po druhé, vieme, že pre rovnice *integrálnych kriviek* platí

$$\dot{x}_a = V_a. \quad (2.33)$$

Z posledných dvoch rovností (2.31) a (2.33) máme

$$\dot{x}_a = \omega_{ab}(\partial_b H). \quad (2.34)$$

Porovnaním *všeobecného* vyjadrenia lineárnych Hamiltonových rovníc (2.28) a poslednej rovnice pre \dot{x}_a (2.34) vyjde súvislosť medzi maticou A_{ab} a hamiltoniánom

$$\omega_{ab}(\partial_b H) = A_{ab}x_b. \quad (2.35)$$

Výraz na pravej strane rovnice je *lineárny* v premennej x . Keďže ω_{ab} je konštantná matica, musí byť hamiltonián pred deriváciou *kvadratický* v x . Takže

$$H = \frac{1}{2}S_{ab}x_ax_b. \quad (2.36)$$

Jedna polovica vo výraze zabezpečí, aby sa nám po derivovaní vo výrazoch nemotali čísla. Ďalej je z tohoto vyjadrenia vidieť, že matica S_{ab} je *symetrická*. Toto tvrdenie platí, pretože súčin $x_a x_b$ je symetrický voči zámene indexov. Ak by S_{ab} bola všeobecná matica, môžeme ju rozložiť na súčet symetrickej a antisymetrickej. Antisymetrická časť dá v súčine s $x_a x_b$ nulu a ostane len symetrická. Rovnako ako keby tam antisymetrická ani nebola. Preto platí

$$S_{ab} = S_{ba}. \quad (2.37)$$

Po dosadení vyjadrenia (2.36) do rovnice (2.35) dostaneme

$$\omega_{ab} S_{bc} x_c = A_{ac} x_c, \quad (2.38)$$

a odtiaľ

$$(\omega S)_{ab} = A_{ab}. \quad (2.39)$$

Zistili sme teda, že lineárne Hamiltonove rovnice, ktoré majú vo všeobecnosti tvar (2.28), majú kvadratický hamiltonián (2.36) a matica A_{ab} je s maticou S_{ab} z hamiltoniánu viazaná vzťahom (2.39).

2.3.1 Malé kmity

Ukázali sme, že lineárne Hamiltonove rovnice majú vždy *kvadratický* hamiltonián. Môžeme si to overiť na príklade lineárneho harmonického oscilátora, ktorý sme rozoberali v podkapitole (2.1). Zovšeobecnením tohoto príkladu sú malé kmity. Pozrime sa, ako vyzerá ich hamiltonián.

Najprv si zapíšeme *lagranžián*. Lagranžián ľubovoľného systému má tvar

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} T_{ab}(q) \dot{q}_a \dot{q}_b - U(q_1, \dots, q_n), \quad (2.40)$$

kde prvý člen je kinetická energia, druhý člen je potenciálna energia, T_{ab} je symetrická matica, \dot{q}_a je zovšeobecnená rýchlosť a q_a zovšeobecnená súradnica.

Nech má potenciálna energia v bode $q_0 = (q_{01}, \dots, q_{0n})$ *lokálne minimum*. Ak je celková energia sústavy len o trošku väčšia ako $U(q_0)$, tak sa pri pohybe veľmi nevzdialime od bodu q_0 . Pomocou Taylorovho rozvoja môžeme získať zaujímavé priblíženie pre tento prípad:

$$U(q) = U(q_0) + \left. \frac{\partial U}{\partial q_a} \right|_{q_0} (q_a - q_{0a}) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 U}{\partial q_a \partial q_b} \right|_{q_0} (q_a - q_{0a})(q_b - q_{0b}) + \dots \quad (2.41)$$

Vyššie členy sme zanedbali. Druhý člen sa rovná nule, lebo sa nachádzame v minime poteciálnej energie. Tretí člen je zaujímavý. Pre skrátenie zápisu si označíme

$$K_{ab} = \left. \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial q_a \partial q_b} \right|_{q_0}. \quad (2.42)$$

Ešte nám v rozvoji ostal prvý člen, ale ten je len konštanta. Aby sme sa ho zbavili, urobíme zámenu súradníc:

$$q_0 \mapsto 0 \quad \Rightarrow \quad q_a - q_{0a} \equiv x_a. \quad (2.43)$$

Po týchto úpravách je potenciálna energia

$$U(x) = \frac{1}{2} K_{ab} x_a x_b. \quad (2.44)$$

Podobné úpravy urobíme aj s kinetickou energiou. Pri zámene súradníc sa *rýchlosti nezmenia*. Platí

$$\dot{q}_a = \dot{x}_a. \quad (2.45)$$

Maticu T_{ab} rozvinieme do radu okolo bodu q_0

$$T_{ab}(q) = T_{ab}(q_0) + \dots \quad (2.46)$$

a zanedbáme všetky členy okrem prvého. Maticu $T_{ab}(q_0)$ si označíme

$$M_{ab} = T_{ab}(q_0). \quad (2.47)$$

Po dosadení novú lagranžian vyjde

$$L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} M_{ab} \dot{x}_a \dot{x}_b - \frac{1}{2} K_{ab} x_a x_b. \quad (2.48)$$

A odtiaľto už veľmi jednoducho dostaneme hamiltonián:

$$H(x, p) = \frac{1}{2}(M^{-1})_{ab}p_ap_b + \frac{1}{2}K_{ab}x_ax_b. \quad (2.49)$$

Vidíme, že hamiltonián je *kvadratický* v súradniciach aj v hybnostiach. Ak nahradíme označenia pre súradnice x a pre hybnosti p spoločným označením - len x (ale teraz už $2n$ -rozmerné), dostaneme hamiltonián pre lineárne Hamiltonove rovnice (2.36). Matica S bude mať blokový diagonálny tvar

$$S = \begin{pmatrix} K & 0 \\ 0 & M^{-1} \end{pmatrix}. \quad (2.50)$$

Pretože matice M^{-1} , K sú symetrické, bude aj matica S *symetrická*.

Z tohto všetkého vyplýva, že Hamiltonove rovnice pre malé kmity sú ďalším zaujímavým prípadom lineárnych Hamiltonových rovníc.

Kapitola 3

Schrödingerova rovnica

3.1 Hamiltonove rovnice zodpovedajúce Schrödingerovej rovnici

V tejto časti si ukážeme, ako sa dá *Schrödingerova rovnica* prepísať na *sústavu Hamiltonových rovníc*. Využijeme pritom ich *komplexný zápis*, ktorý sme si odvodili v predchádzajúcej kapitole.

Ako Hilbertov priestor budeme uvažovať komplexný priestor \mathbb{C}^n . Zaoberať sa budeme Schrödingerovou rovnicou pre *n-hladinovú* sústavu¹, čiže komplexnými stĺpčkami $z \in \mathbb{C}^n$. Treba si uvedomiť, že tradičné vlnové funkcie $\Psi(x, t)$, s ktorými sa začína na prednáškach z kvantovej teórie, patria do *nekonečnorozmerného* priestoru. My budeme pracovať len s *konečnými n-rozmernými* stĺpčkami. Konečná dimenzia nášho pracovného Hilbertovho priestoru nám prinesie veľké technické *zjednodušenie*.

Pre *n-rozmerné* komplexné stĺpčky má Schrödingerova rovnica tvar

$$i\dot{z} = \hat{H}z, \quad \text{ak } \hbar = 1. \quad (3.1)$$

¹Pre podrobnosti okolo *n-hladinových* sústav pozri [PGČ83] kap. 5

Rozpísané po zložkách

$$i\dot{z}_a = \hat{H}_{ab}z_b. \quad (3.2)$$

Ak si odtiaľ vyjadríme \dot{z}_a a následne rovnicu komplexne združíme, dostaneme dvojicu rovníc

$$\dot{z}_a = -i\hat{H}_{ab}z_b, \quad (3.3)$$

$$\dot{\bar{z}}_a = i\bar{\hat{H}}_{ab}\bar{z}_b = i\hat{H}_{ba}\bar{z}_b. \quad (3.4)$$

Pri úprave druhej z rovníc sme využili, že hamiltonián je *hermitovský* operátor a platí preň

$$\bar{\hat{H}}_{ab} = \hat{H}_{ba}. \quad (3.5)$$

Naším cieľom je nájsť Hamiltonove rovnice pre z a \bar{z} . Ale možno nebudeme musieť dlho hľadať. Rovnice (3.3) a (3.4) sú nádejnými kandidátmi na tento post. Stačí už len nájsť (pozri (2.25) a (2.26)) klasický hamiltonián $H(z, \bar{z})$, pre ktorý by platilo

$$\dot{z}_a = -2i\bar{\partial}_a H, \quad (3.6)$$

$$\dot{\bar{z}}_a = 2i\partial_a H. \quad (3.7)$$

Keď si porovnáme pravé strany rovníc (3.3) s (3.6) a (3.4) s (3.7) dostaneme podmienky, ktoré musí hľadaný hamiltonián spĺňať:

$$-i\hat{H}_{ab}z_b = -2i\bar{\partial}_a H, \quad (3.8)$$

$$i\hat{H}_{ba}\bar{z}_b = 2i\partial_a H. \quad (3.9)$$

Týmto rovniciam vyhovuje

$$H = \frac{1}{2}\bar{z}_a\hat{H}_{ab}z_b = \frac{1}{2}z^+\hat{H}z. \quad (3.10)$$

To znamená, že Schrödingerovu rovnicu si naozaj *môžeme* prepísať na Hamiltonove rovnice (3.6) a (3.7) s použitím hamiltoniánu (3.10). Pričom

klasický hamiltonián (3.10) má aj jednoduchý kvantovo-mechanický význam - je to jedna polovica strednej hodnoty kvantového hamiltoniánu \hat{H} v stave z .

Je dobré si všimnúť, že rovnice (3.3) a (3.4), ktoré sme dostali, sú *lineárne* Hamiltonove rovnice. Toto je ďalší dôležitý príklad týchto špeciálnych rovníc.

Kapitola 4

Časový vývoj v Schrödingerovej rovnici

4.1 Unitárny časový vývoj

Dôležitou črtou časového vývoja podľa Schrödingerovej rovnice je to, že *zachováva normovanie* vlnových funkcií. Integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx \quad (4.1)$$

vyjadruje pravdepodobnosť nájdenia častice v celom priestore. Funkcia Ψ by mala byť normovaná tak, aby sa tento integrál rovnal jednej. Predpokladajme, že v čase $t = 0$ sme túto podmienku splnili. Časový vývoj daný Schrödingerovou rovnicou nám zabezpečí, že normovanie sa *zachová*.

Dôkaz. Ak sa má zachovávať normovanie, potom časová derivácia

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) dx \quad (4.2)$$

musí byť *nulová*.

Pre deriváciu súčinu platí

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (4.3)$$

Ak do tohoto výrazu dosadíme zo Schrödingerovej rovnice a z rovnice k nej komplexne združenej

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V\Psi, \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V\Psi^*, \quad (4.5)$$

dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) &= -\frac{i\hbar}{2m} \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V\Psi^*\Psi + \frac{i\hbar}{2m} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V\Psi^*\Psi \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Po zintegrování vyjde

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi dx = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty}. \quad (4.7)$$

Aby sa dala funkcia Ψ normovať, musí byť jej limita v nekonečne aj v mínus nekonečne nulová. Preto pravá strana rovnice je nulová a platí

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi dx = 0. \quad (4.8)$$

Integrál naľavo je tým pádom *nezávislý od času*.

Dokázali sme, že časový vývoj Schrödingerovej rovnice zachováva normovanie. \square

Tento dôkaz slúžil na pripomenutie, ako to funguje s vlnovými funkciami. My sa však zaoberáme *komplexnými vektormi*. Tu je dôkaz ešte jednoduchší. Pre vektory $z \in \mathbb{C}^n$ platí Schrödingerova rovnica

$$i\dot{z} = \hat{H}z. \quad (4.9)$$

Z nej si môžeme vyjadriť časovú deriváciu z

$$\dot{z} = -i\hat{H}z. \quad (4.10)$$

Ak teraz vypočítame deriváciu $|z|^2$ dostaneme:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}|z|^2 &= \frac{d}{dt}\langle z|z \rangle \\ &= \dot{z}_a z_a + \bar{z}_a \dot{z}_a \\ &= i\hat{H}_{ba}\bar{z}_b z_a - \bar{z}_a i\hat{H}_{ab}z_b \\ &= 0. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Znamená to, že veľkosť vektora z *nezávisí od času*.

Skúsme to rozobrať podrobnejšie. Časový vývoj z za čas ϵ je

$$\begin{aligned} z(t + \epsilon) &= z(t) + \epsilon \dot{z}|_t \\ &= z(t) - i\epsilon\hat{H}z(t) \\ &= (\mathbb{I} - i\epsilon\hat{H})z(t). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Vidíme, že vektor $z(t + \epsilon)$ dostaneme z vektora $z(t)$ transformáciou pomocou operátora

$$U = \mathbb{I} - i\epsilon\hat{H}. \quad (4.13)$$

Vďaka komplexnému i a hermitovosti hamiltoniánu \hat{H} , ktoré spolu vytvárajú *antihermitovský* operátor, vyjde operátor U *unitárny* ($U^+U = \mathbb{I}$) do rádu ϵ :

$$\begin{aligned} U^+U &= (\mathbb{I} + i\epsilon\hat{H}^+)(\mathbb{I} - i\epsilon\hat{H}) \\ &= \mathbb{I} - i\epsilon\hat{H} + i\epsilon\hat{H} + o(\epsilon^2) \\ &= \mathbb{I}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Unitárne operátory zachovávajú hermitovský skalárny súčin, pomocou ktorého sa dá zaviesť norma vektora. Vyššie sme videli, že druhá mocnina veľ-

kosti vektora z skutočne nezávisí od času. Toto je možné práve vďaka *unitarite časového vývoja*:

$$\langle z(t + \epsilon) | z(t + \epsilon) \rangle = \langle U z(t) | U z(t) \rangle = \langle z(t) | z(t) \rangle. \quad (4.15)$$

4.2 Hermitovský skalárny súčin

Pripomeňme si, ako vyzerá hermitovský skalárny súčin

$$h(z, v) = \langle z | v \rangle = \bar{z}_a v_a. \quad (4.16)$$

Ak sa zachováva hermitovský skalárny súčin, znamená to, že sa zachováva nejaké *komplexné číslo*. Takže sa zachováva reálna a imaginárna časť tohoto čísla. Rozložme si preto hermitovský skalárny súčin na reálnu a imaginárnu časť:

$$h(z, v) = g(\tilde{z}, \tilde{v}) + i\omega(\tilde{z}, \tilde{v}). \quad (4.17)$$

Bilineárne formy g , ω sú *reálne* a pracujú s *reálnymi* vektormi \tilde{z} , \tilde{v} . Vysvetlenie, odkiaľ prišli tieto reálne vektory, poskytneme čitateľovi o dve strany ďalej. Najprv si musíme povedať niečo o *reálnom pohľade na komplexný priestor*. V nasledujúcej časti sa naučíme prepísať komplexné štruktúry do reálneho zápisu. Potom sa vrátíme k hermitovskému skalárnemu súčinu. Budeme už vedieť, kde sa vzali vektory \tilde{z} , \tilde{v} a preskúmame vlastnosti foriem g a ω .

4.2.1 Realifikácia komplexného priestoru \mathbb{C}^n

Majme komplexný vektorový priestor \mathbb{C}^n s vektormi z . Vektory z tohoto priestoru sa dajú „prepísať do reálneho tvaru“. Urobíme to tak, že komplexný vektor rozdelíme na súčet reálnej časti x a imaginárnej časti p a tieto dve časti zapíšeme do jedného stĺpčeka pod seba. Získame takto *vzájomne jednoznačné*

28 KAPITOLA 4. ČASOVÝ VÝVOJ V SCHRÖDINGEROVEJ ROVNICI

zobrazenie medzi n -rozmernými komplexnými vektormi a $2n$ -rozmernými reálnymi vektormi. Podrobne to vyzerá takto:

$$z = x + ip, \quad (4.18)$$

$$z \mapsto \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \tilde{z}, \quad (4.19)$$

kde \tilde{z} je *reálny vektor* z rovnice (4.17) a podobne sa vyrobí aj vektor \tilde{v} , ktorý tiež vystupuje v rovnici (4.17).

S komplexnými vektormi z \mathbb{C}^n sa dajú robiť lineárne kombinácie, kde koeficienty pri vektoroch sú komplexné čísla (uvažujeme vektorový priestor nad \mathbb{C}). V reálnom prepise sa dajú robiť lineárne kombinácie len s reálnymi koeficientmi (tu uvažujeme vektorový priestor nad \mathbb{R}). Tento nedostatok časom vyriešime.

Komplexné matice sa tiež dajú *vzájomne jednoznačne zobrazit* na reálne matice dvojnásobných rozmerov podobne ako vektory. Najprv si zapíšeme reálnu a imaginárnu časť komplexnej matice A :

$$A = B + iC. \quad (4.20)$$

Násobenie matice a vektora vyzerá nasledovne:

$$Az = (B + iC)(x + ip) = (Bx - Cp) + i(Cx + Bp). \quad (4.21)$$

Z toho vidieť, že matica A v komplexnom priestore robí to isté, čo nasledovná bloková matica zložená z matic B a C robí v reálnom priestore:

$$Az \mapsto \begin{pmatrix} B & -C \\ C & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix}, \quad (4.22)$$

$$A \mapsto \begin{pmatrix} B & -C \\ C & B \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

V špeciálnom prípade ak reálna časť matice A je nulová a imaginárna časť sa rovná jednotkovej matici, jej reálny obraz vyzerá takto:

$$A = 0 + i\mathbb{I}_n \mapsto \begin{pmatrix} 0 & -\mathbb{I}_n \\ \mathbb{I}_n & 0 \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

a zodpovedá násobeniu komplexným i . Táto matica sa nazýva *komplexná štruktúra* v priestore \mathbb{R}^{2n} a má označenie

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbb{I}_n \\ \mathbb{I}_n & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

Takto sme vyriešili problém s komplexnými lineárnymi kombináciami. Už vieme aj v reálnom priestore zapísať násobenie komplexným i .

Násobenie ľubovoľným komplexným číslom $a = b + ic$ potom v reálnom priestore robí matica $b\mathbb{I}_{2n} + cJ$.

Po týchto úvahách vidíme, že reálny priestor \mathbb{R}^{2n} s komplexnou štruktúrou J je *ekvivalentný* komplexnému priestoru \mathbb{C}^n

$$\mathbb{C}^n \sim (\mathbb{R}^{2n}, J). \quad (4.26)$$

4.2.2 Vlastnosti dvoch reálnych bilineárnych foriem

Vyzbrojený novým matematickým aparátom sa môžeme vrátiť k hermitovskému skalárnemu súčinu

$$h(z, v) = g(\tilde{z}, \tilde{v}) + i\omega(\tilde{z}, \tilde{v}), \quad (4.27)$$

kde vektory \tilde{z} a \tilde{v} nie sú ničím iným ako reálnym obrazom komplexných vektorov z a v , presne takým, aký sme si kúsok vyššie ukázali.

Preskúmame teraz vlastnosti bilineárnych foriem g a ω . Pre tieto dve

formy platí:

$$1. \quad g(\tilde{v}, \tilde{z}) = g(\tilde{z}, \tilde{v}), \quad \omega(\tilde{v}, \tilde{z}) = -\omega(\tilde{z}, \tilde{v}), \quad (4.28)$$

$$2. \quad g(J\tilde{z}, J\tilde{v}) = g(\tilde{z}, \tilde{v}), \quad \omega(J\tilde{z}, J\tilde{v}) = \omega(\tilde{z}, \tilde{v}), \quad (4.29)$$

$$3. \quad g(J\tilde{z}, \tilde{v}) = \omega(\tilde{z}, \tilde{v}), \quad \omega(J\tilde{z}, \tilde{v}) = -g(\tilde{z}, \tilde{v}). \quad (4.30)$$

Dôkaz. Využijeme, čo vieme o hermitovskom skalárnom súčine a potom porovnáme reálnu časť pravej strany rovnice s reálnou časťou ľavej strany rovnice. Podobne s imaginárnymi časťami.

$$1. \quad h(v, z) = \overline{h(z, v)} \quad \Rightarrow \quad g(\tilde{v}, \tilde{z}) + i\omega(\tilde{v}, \tilde{z}) = g(\tilde{z}, \tilde{v}) - i\omega(\tilde{z}, \tilde{v}),$$

$$2. \quad h(iz, iv) = h(z, v) \quad \Rightarrow \quad g(J\tilde{z}, J\tilde{v}) + i\omega(J\tilde{z}, J\tilde{v}) = g(\tilde{z}, \tilde{v}) + i\omega(\tilde{z}, \tilde{v}),$$

$$3. \quad h(iz, v) = -ih(z, v) \quad \Rightarrow \quad g(J\tilde{z}, \tilde{v}) + i\omega(J\tilde{z}, \tilde{v}) = -ig(\tilde{z}, \tilde{v}) + \omega(\tilde{z}, \tilde{v}).$$

□

Už vieme dosť o vlastnostiach týchto dvoch bilineárnych foriem. Ako však vyzerajú ich matice?

Znovu budeme vychádzať z hermitovského skalárneho súčinu. V kanonickej báze e_a má maticu

$$h_{ab} = h(e_a, e_b) = \delta_{ab}. \quad (4.31)$$

Dá sa ukázať, že v \mathbb{R}^{2n} môžeme zvoliť bázu (e_a, Je_a) . Z rovnice (4.31) vyplýva, že v báze (e_a, Je_a) vyzerajú komponenty bilineárnych foriem g , ω nasledovne:

$$\begin{aligned} g(e_a, e_b) &= \delta_{ab}, & \omega(e_a, e_b) &= 0, \\ g(Je_a, Je_b) &= \delta_{ab}, & \omega(Je_a, Je_b) &= 0, \\ g(e_a, Je_b) &= 0, & \omega(e_a, Je_b) &= \delta_{ab}, \\ g(Je_a, e_b) &= 0, & \omega(Je_a, e_b) &= -\delta_{ab}. \end{aligned}$$

Matice bilineárnych foriem g a ω potom majú blokový tvar

$$g = \begin{pmatrix} g(e, e) & g(e, Je) \\ g(Je, e) & g(Je, Je) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_n & 0 \\ 0 & \mathbb{I}_n \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

$$\omega = \begin{pmatrix} \omega(e, e) & \omega(e, Je) \\ \omega(Je, e) & \omega(Je, Je) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_n \\ -\mathbb{I}_n & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.33)$$

Takže, ak unitárny časový vývoj zachováva hermitovský skalárny súčin, zachováva zároveň *dve reálne* bilinéarne formy. Jedna je *symetrická* - g a jedna je *antisymetrická* - ω . Obidve sú *nedegenerované*. Tou symetrickou sa budeme zaoberať neskôr. Antisymetrická však poskytuje kľúč k hlbšiemu porozumeniu súvislosti medzi Schrödingerovou rovnicou a Hamiltonovými rovnicami.

4.3 Odkiaľ prišli Hamiltonove rovnice do kvantovej mechaniky?

V tejto časti si tak zhruba ukážeme, prečo je možné Schrödingerovu rovnicu prepísať na Hamiltonove rovnice. Nebude to presný dôkaz, lebo na to by sme potrebovali diferenciálnu geometriu. Niektoré tvrdenia len prehlásime bez ďalšieho zdôvodnenia. Na takéto miesta v pravú chvíľu čitateľa upozorníme.

Táto podkapitolka je určená najmä pre zvedavého čitateľa. Nie je nutná pre ďalšie čítanie tejto práce.

Hlavným dôvodom prečo sa dá Schrödingerova rovnica prepísať na Hamiltonove rovnice je, že Schrödingerova rovnica generuje *unitárny* časový vývoj. Technicky to vidno takto: nachádza sa tam hermitovský operátor \hat{H} vynásobený komplexným i a spolu tvoria antihermitovský operátor. Vďaka tejto antihermitovosti je časový vývoj unitárny (pozri (4.14)) a podľa *definície* unitarity zachováva hermitovský skalárny súčin. Avšak zachovávanie hermitovského skalárneho súčinu, ako sme ukázali v predchádzajúcej podkapitole,

zodpovedá zachovávaníu *dvoch* nedegenerovaných *reálnych* bilineárnych foriem. Jedna je symetrická, druhá antisymetrická.

Ukazuje sa, že časový vývoj, ktorý zachováva tú antisymetrickú formu, musí byť nevyhnutne hamiltonovský. Toto si teraz dokážeme výpočtom.

Majme rovnice pre integrálne krivky vektorového poľa $V_a(x)$ na variete

$$\dot{x}_a = V_a(x), \quad (4.34)$$

kde $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$. Integrálne krivky vytvárajú infinitezimálny tok vektorového poľa, ktorý bodu so súradnicami x_a na integrálnej krivke priradí bod „odtečený“ o ϵ

$$\Phi_\epsilon : x_a \mapsto x_a + \epsilon V_a(x). \quad (4.35)$$

Predstavme si teraz nejaké krivky $y(t)$ a $z(t)$, ktoré vo všeobecnosti nemusia byť integrálnymi krivkami. Nech sa tieto krivky pretínajú v bode P . Prvá krivka určuje v tomto bode vektor. Konkrétne, jej dotykový vektor $u = \dot{y}_a \partial_a$, kde y_a sú súradnice vektora v báze ∂_a . Podobne aj druhá krivka určuje vektor $v = \dot{z}_a \partial_a$. Vektory u, v chápeme ako vektory v zmysle, ktorý sme podrobnejšie rozoberali v kapitole 1.

Vektory v jednom bode variety vytvárajú v danom bode vektorový priestor a možno s nimi robiť lineárne kombinácie. Vektory z rôznych bodov sa lineárne kombinovať nedajú. Na vysvetlenie tohoto treba diferenciálnu geometriu. My využijeme len fakt, že pre naše účely musíme brať vždy vektory z jedného bodu.

Tak isto s bilineárnymi formami musíme byť opatrní. Máme k dispozícii *pole* bilineárnych foriem, t.j. v *každom* bode variety je jedna forma a môžeme do nej dosadzovať vektory v tomto bode.

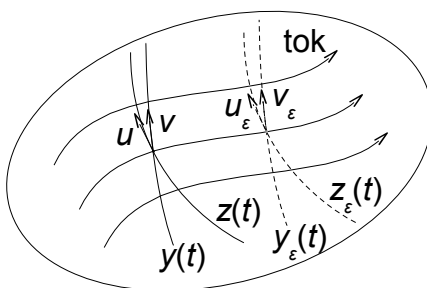
Každý bod krivky y odteká pozdĺž integrálnych kriviek, tak ako to predpisuje tok:

$$\Phi_\epsilon : y_a \mapsto y_{\epsilon a} = y_a + \epsilon V_a(y). \quad (4.36)$$

Derivácia krivky (vektor v nejakom bode) sa potom mení v smere toku nasledovne:

$$\Phi_\epsilon : \dot{y}_a \mapsto \dot{y}_{\epsilon a} = \dot{y}_a + \epsilon \dot{y}_b \partial_b V_a(y). \quad (4.37)$$

Podobne odteká aj krivka z . „Časový vývoj“ (ak pod časom ϵ myslím parameter toku Φ_ϵ) týchto kriviek vďaka toku vektorového poľa je naznačený na obrázku 4.1.



Obr. 4.1: Hamiltonovský časový vývoj

Pozrime sa teraz, aké podmienky musia byť splnené, aby bolo pole bilineárnej formy ω invariantné voči časovému vývoju. Najprv do nej dosadíme vektory u a v v bode P

$$\omega(u, v) = \omega_{ab} \dot{y}_a \dot{z}_b. \quad (4.38)$$

Teraz necháme krivky trochu „odtiecť“ o ϵ . Takto „priplávajú“ do nového bodu (obrazu bodu P). V tomto novom bode tiež žije bilineárna forma ω . Dosadíme do nej „pritečené“ vektory a pozrieme sa, aké podmienky musia spĺňať, aby dali s formou ω rovnaké číslo ako v bode P .

$$\omega_{ab} \dot{y}_{\epsilon a} \dot{z}_{\epsilon b} = \omega_{ab} \dot{y}_a \dot{z}_b. \quad (4.39)$$

Pri všeobecnej bilineárnej forme nevieme zaručiť, že bude mať v každom bode rovnaký „tvar“ (rovnakú maticu ω_{ab}). Čiže, jej matica by mohla byť závislá od polohy. Pole antisymetrickej bilineárnej formy je ale špeciálne v tom,

34 KAPITOLA 4. ČASOVÝ VÝVOJ V SCHRÖDINGEROVEJ ROVNICI

že sa dajú vybrať súradnice, v ktorých bude mať v každom bode rovnakú maticu. Navyše táto matica bude mať „kanonický“ tvar (4.33). Na dôkaz tohto tvrdenia opäť treba diferenciálnu geometriu (hovorí o tom *Darbouxova veta*). Nám ale tento fakt, že ω má konštantnú maticu, veľmi uľahčuje situáciu.

Keď si podmienku (4.39) rozpíšeme podrobnejšie, tak podľa predchádzajúcich výpočtov vyjde

$$\begin{aligned}\omega_{ab}\dot{y}_c\dot{z}_b &= \omega_{ab}(\dot{y}_a + \epsilon\dot{y}_c\partial_c V_a)(\dot{z}_b + \epsilon\dot{z}_d\partial_d V_b) \\ &= \omega_{ab}\dot{y}_a\dot{z}_b + \epsilon(\omega_{ab}\dot{z}_b\dot{y}_c\partial_c V_a + \omega_{ab}\dot{y}_a\dot{z}_d\partial_d V_b)\end{aligned}$$

Aby podmienka (4.39) platila, musí sa člen, v ktorom vystupuje ϵ , rovnať nule. Toto má byť splnené pre ľubovoľné krivky y, z , preto musí platiť

$$\begin{aligned}\omega_{ad}\partial_c V_a + \omega_{cb}\partial_d V_b &= 0 \\ \partial_c(\omega_{ad}V_a) + \partial_d(\omega_{cb}V_b) &= 0 \\ \partial_c(\omega_{da}V_a) &= \partial_d(\omega_{cb}V_b).\end{aligned}\tag{4.40}$$

Využili sme, že ω_{ab} je konštantná matica a že je antisymetrická.

Pre väčšiu prehľadnosť si označíme

$$W_a = \omega_{ab}V_b\tag{4.41}$$

a rovnica (4.40) prejde na tvar

$$\partial_c W_d = \partial_d W_c.\tag{4.42}$$

V trojrozmernom prípade by to znamenalo, že $\text{rot } W = 0$. Z čoho vyplýva, že W je gradientom nejakej skalárnej funkcie $W = \text{grad } f$, komponentne $W_a = \partial_a f$. V našom prípade nie sme v trojrozmernej situácii, ale ukazuje sa, že tvrdenie stále platí

$$\partial_c W_d = \partial_d W_c \Leftrightarrow W_a = \partial_a H,\tag{4.43}$$

kde H je nejaká skalárna funkcia. Implikácia sprava doľava je triviálna. Druhá implikácia sa však už dokazuje ťažšie (hovorí o nej *Poincarého lema*). Znovu by sme na to potrebovali diferenciálnu geometriu.

Keď dosadíme (4.43) do označenia (4.41) dostaneme

$$\omega_{ab}V_b = \partial_a H. \quad (4.44)$$

Využijeme, že poznáme, akú má ω maticu a vieme k nej nájsť ľahko inverznú

$$\omega = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_n \\ -\mathbb{I}_n & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \omega_{ab}^{-1} = -\omega_{ab} = \omega_{ab}^T. \quad (4.45)$$

S touto vedomosťou ľahko upravíme rovnicu (4.44) do tvaru

$$V_b = \omega_{ba}\partial_a H. \quad (4.46)$$

Tento tvar vektorového poľa by mal byť čitateľovi už povedomý z podkapitoly 2.3 o lineárnych Hamiltonových rovniciach. Ak dosadíme vektorové pole do rovníc pre integrálne krivky (4.34), dostaneme Hamiltonove rovnice

$$\dot{x}_a = \omega_{ab}\partial_b H. \quad (4.47)$$

Vidíme, že časový vývoj, voči ktorému je (nedegenerovaná) bilineárna forma ω invariantná, nevyhnutne vychádza ako Hamiltonovský.

Kapitola 5

Pohyb vo fázovom priestore

Doteraz sme stále pracovali s Hamiltonovou dynamikou vo fázovom priestore \mathbb{C}^n . Skutočná Hamiltonova dynamika *stavov* v kvantovej mechanike sa však odohráva v *priestore lúčov* (komplexných priamok prechádzajúcich počiatkom). Rozdiel je ten, že vektory sú citlivé na vynásobenie komplexným číslom. Mení sa im pri tom veľkosť alebo fáza a dostávame iný vektor. Z kvantovej mechaniky však vieme, že stav ostáva nezmenený po prenasobení komplexným číslom. Môže sa akurát pokaziť normovanie vlnovej funkcie alebo môže pribudnúť nefyzikálna fáza. Stav sa však pri takomto násobení *nezmení*. Táto „odolnosť“ voči komplexnému násobku je správne vyjadrená v priestore lúčov.

Dôvod, prečo sme si vybrali na prácu fázový priestor \mathbb{C}^n je, že tento priestor je *lineárny* a dá sa v ňom pracovať metódami lineárnej algebry. Naproti tomu priestor lúčov je vo všeobecnosti *nelineárny* a vyžaduje si poznať aparát diferenciálnej geometrie. No priestor lúčov je zase oveľa lákavejší z fyzikálneho hľadiska, lebo predstavuje skutočné ihrisko kvantovej mechaniky. Preto sa na niektorých miestach v práci snažíme k tomuto priestoru „priblížiť“.

Prvým takýmto priblížením bola podkapitola 4.3, kde sme nevychádzali zo žiadneho konkrétneho fázového priestoru. Pracovali sme na všeobecnej

variete, teda výsledok hovorí aj o priestore lúčov.

Ďalšie takéto priblíženie urobíme v časti 5.2.

5.1 Velkosť rýchlosti

Väčšinou sa vo fázových priestoroch *nedajú merať dĺžky* vektorov, lebo tam na to nie sú vhodné nástroje - vhodné bilinéarne formy, pomocou ktorých sa dá zaviesť veľkosť vektorov. Každý hamiltonovský časový vývoj síce zachováva antisymetrickú bilinéarnu formu ω , ale tá dáva pre ľubovoľný vektor z výsledok $\omega(z, z) = 0$.

V našom prípade vieme (z podkapitoly 4.2), že máme v každom bode priestoru okrem spomínanej antisymetrickej formy ω aj symetrickú a spolu vytvárajú hermitovský skalárny súčin, ktorý umožňuje zaviesť dĺžky vektorov.

Obyvatelmi nášho fázového priestoru sú vektory z , ktoré sú riešeniami Schrödingerovej rovnice. Každý vektor z predstavuje jeden kvantový stav. No *nie všetky sú nezávislé*. Tie, ktoré sa dajú získať z iných len komplexným násobkom, predstavujú ten istý stav. Majú len inú veľkosť, prípadne im pribudne nefyzikálna komplexná fáza.

Stavy sústavy sa v čase vyvíjajú, čiže sústava prechádza do iných stavov, čo sa prejavuje pohybom vektorov z vo fázovom priestore. Časová derivácia vektora z je jeho rýchlosť w

$$\dot{z} = w. \tag{5.1}$$

Vypočítajme veľkosť tejto rýchlosti:

$$\begin{aligned} |w|^2 &= \bar{w}_a w_a \\ &= \bar{\dot{z}}_a \dot{z}_a. \end{aligned}$$

Za \dot{z}_a dosadíme zo Schrödingerovej rovnice a máme

$$\begin{aligned} |w|^2 &= i\bar{\dot{H}}_{ab}\bar{z}_b(-i)\hat{H}_{ac}z_c \\ &= \langle z|\hat{H}^2|z\rangle \\ &= \langle E^2\rangle. \end{aligned} \tag{5.2}$$

Takže kvadrát veľkosti rýchlosti sa rovná strednej hodnote druhej mocniny energie v danom stave.

5.2 Veľkosť kolmej zložky rýchlosti

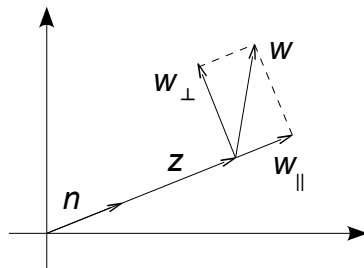
Predchádzajúca podkapitola hovorila o veľkosti rýchlosti pohybu vo fázovom priestore. Ukazuje sa ešte zaujímavejšie vypočítať len veľkosť *istej zložky rýchlosti* w . Treba si uvedomiť, že v našom fázovom priestore \mathbb{C}^n neprispieva celý časový vývoj k zmene stavu, teda nie celá rýchlosť w je podstatná. Niektorá zložka rýchlosti napríklad len mení komplexnú fázu. Tým, že z výpočtov vypustíme túto nepodstatnú zložku, ktorá nemení stav, sa trochu priblížime k situácii v priestore lúčov.

V dvojrozmernom reálnom prípade by sa dal nakresliť obrázok 5.1, kde vektor w_{\parallel} nemení stav, ale len dĺžku vektora z . Túto rovnobežnú zložku by sme radi vypustili z nášho výpočtu a brali do úvahy len zložku *kolmú* na vektor z .

V n -rozmernom komplexnom priestore sa situácia predstavuje ťažšie. Budeme však postupovať podľa analógie s reálnym priestorom a skúsime vypočítať veľkosť *kolmej* zložky vektora w . Treba mať stále na pamäti, že pracujeme v komplexnom priestore a nie všetko musí fungovať analogicky ako v reálnom.

Rovnobežnú zložku vypočítame podobne ako v reálnom priestore

$$w_{\parallel} = (n, w)n, \tag{5.3}$$

Obr. 5.1: Vektory rýchllosti v \mathbb{R}^2

kde n je jednotkový vektor v smere z a zátvorka označuje *hermitovský* skalárny súčin, keďže sa nachádzame v \mathbb{C}^n . Zo vzťahu

$$w = w_{\parallel} + w_{\perp} \quad (5.4)$$

si vyjadríme kolmú časť w_{\perp} a za rovnobežnú časť w_{\parallel} dosadíme z rovnice (5.3)

$$w_{\perp} = w - (n, w)n. \quad (5.5)$$

Výsledok rozpíšeme po zložkách

$$w_{\perp a} = w_a - \bar{n}_b w_b n_a \quad (5.6)$$

a za $w_a = \dot{z}_a$ dosadíme zo Schrödingerovej rovnice:

$$w_{\perp a} = -i\hat{H}_{ab}z_b + \bar{n}_b i\hat{H}_{bc}z_c n_a. \quad (5.7)$$

Kvadrát veľkosti kolmej časti rýchllosti potom bude

$$|w_{\perp}|^2 = \bar{w}_{\perp a} w_{\perp a} \quad (5.8)$$

$$= \left(i\hat{H}_{ba}\bar{z}_b - n_b i\hat{H}_{cb}\bar{z}_c \bar{n}_a \right) \left(-i\hat{H}_{ab}z_b + \bar{n}_b i\hat{H}_{bc}z_c n_a \right) \quad (5.9)$$

$$= \hat{H}_{ba}\bar{z}_b \hat{H}_{ac}z_c - \hat{H}_{ba}\bar{z}_b \bar{n}_d \hat{H}_{dc}z_c n_a \quad (5.10)$$

$$- n_b \hat{H}_{cb}\bar{z}_c \bar{n}_a \hat{H}_{ad}z_d + n_b \hat{H}_{cb}\bar{z}_c \bar{n}_a \bar{n}_d \hat{H}_{de}z_e n_a \quad (5.11)$$

$$= \bar{z}_b (\hat{H}^2)_{bc} z_c - \bar{z}_b \hat{H}_{ba} n_a \bar{n}_d \hat{H}_{dc} z_c. \quad (5.12)$$

Jednotkový vektor n v smere z môžeme nahradiť vyjadrením

$$n = \frac{z}{|z|} \quad (5.13)$$

a dostaneme

$$|w_{\perp}|^2 = \bar{z}_b (\hat{H}^2)_{bc} z_c - \bar{z}_b \hat{H}_{ba} \frac{z_a}{|z|} \cdot \frac{\bar{z}_d}{|z|} \hat{H}_{dc} z_c \quad (5.14)$$

$$= \langle z | \hat{H}^2 | z \rangle - \frac{1}{|z|^2} \langle z | H | z \rangle^2. \quad (5.15)$$

$$(5.16)$$

Ak predpokladáme, že vektory z sú normované na jednotku ($|z|^2 = 1$), vyjde:

$$\begin{aligned} |w_{\perp}|^2 &= \langle z | \hat{H}^2 | z \rangle - \langle z | H | z \rangle^2 \\ &= \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = (\Delta E)^2. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Teda veľkosť kolmej zložky rýchlosti sa rovná *strednej kvadratickej odchýlke v energii* daného stavu z .

Stredná kvadratická odchýlka energie vystupuje vo *vzťahu neurčitosti pre energiu a čas*¹:

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.18)$$

Tento vzťah neurčitosti hovorí o *rýchlosti zmeny* stavu systému. Čím väčšia neurčitosť v energii, tým kratší čas uplynie do podstatnej zmeny stavu systému a naopak, čím menšia neurčitosť v energii, tým sa systém mení pomalšie.

Ak si uvedomíme, že rýchlosť pohybu w vo fázovom priestore hovorí o rýchlosti prechodu systému z jedného stavu do iného stavu, a uvedomíme si, že o tomto prechode vypovedá najmä kolmá zložka rýchlosti w_{\perp} , tak nás

¹Viac o vzťahu neurčitosti pre energiu a čas je v [PGČ83] časť 10.8 alebo [Gri94] časť 3.4.3.

výsledok (5.17) hovorí presne to, čo predchádzajúci odstavec. Čím je väčšia rýchlosť w_{\perp} pohybu medzi stavmi vo fázovom priestore, tým kratší čas (menšie Δt) treba na podstatnú zmenu stavu systému.

Kapitola 6

Variety

Doteraz sme pracovali vo vektorových priestoroch \mathbb{R}^n alebo \mathbb{C}^n . Aby sme mohli pokračovať v tejto práci ďalej a vypočítať si pekný a názorný príklad, musíme zaviesť niečo *všeobecnejšie* ako tieto dva priestory. Zavedieme *variety* a ďalej budeme pracovať už len s nimi.

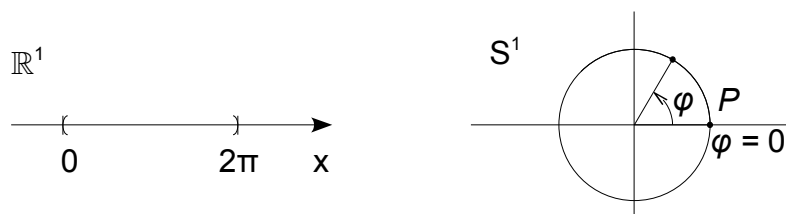
6.1 Čo je to varieta?

Veľmi nematematicky povedané, varieta je niečo podobné ako n -rozmerný reálny priestor \mathbb{R}^n . Má tiež rozmer n a *lokálne* vyzerá úplne ako \mathbb{R}^n . Veľmi krátkozraká osoba by videla to isté, nezávisle od toho, či by sa nachádzala na \mathbb{R}^n alebo na n -rozmernej variete.

Príkladom jednorozmernej variety je kružnica. Ak sa postavíme na kružnicu a poobzeráme sa dookola veľmi krátkozrakými očami, uvidíme to isté, ako keby sme stáli na priamke. Čiže kružnica lokálne vyzerá ako \mathbb{R}^1 . Tiež povrch gule a \mathbb{R}^2 sú si podobné.

Na variete sa musia dať v okolí každého bodu zaviesť *súradnice*. Napríklad na kružnici môžeme zvoliť ako súradnicu uhol φ , tak ako je to znázornené na obrázku 6.1. Veľkosť uhla budeme merať od bodu P proti smeru hodino-

vých ručičiek.

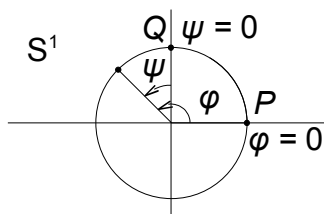


Obr. 6.1: Lokálne súradnice na kružnici

Zavedenie súradníc na variete sa robí pomocou *bijekcie* (vzájomne jednoznačného zobrazenia) medzi bodmi na variete a bodmi z *otvorenej* oblasti v \mathbb{R}^n . Teda každému bodu variety sa priradí n -tica čísel. Takéto zobrazenie sa volá *mapa* alebo aj *lokálne súradnice*.

Jednoznačnosť priradenia súradnice na kružnici nespĺňa bod P , lebo mu možno okrem súradnice $\varphi = 0$ priradiť aj súradnicu $\varphi = 2\pi$. Preto si zvolíme na reálnej osi otvorený interval $(0, 2\pi)$. Hodnotami z tohoto intervalu možno *jednoznačne* popísať súradnice všetkých bodov okrem bodu P .

Ako sme vyššie spomenuli, na variete musia byť súradnice v okolí *každého* bodu. Problém súradníc bodu P vyriešime tak, že zavedieme okrem prvých súradníc ďalšie súradnice - ďalšiu mapu. Tentokrát budeme merať uhol od bodu Q a označíme si ho ψ (obr. 6.2). Takto problematickému bodu P priradíme súradnicu $\psi = 3/2\pi$.



Obr. 6.2: Dve mapy na kružnici

V súradniciach ψ je zase problematický bod Q . Ale jeho problém je už vyriešený, lebo prvá mapa mu prisúdila súradnicu $\varphi = \pi/2$.

Vďaka zavedeniu dvoch máp majú niektoré body na kružnici dvojaké súradnice. Medzi týmito súradnicami sa dá prechádzať - dá sa urobiť *zámena súradníc*. Jedny sa dajú vyjadriť ako funkcia druhých. V našom prípade $\varphi(\psi) = \psi + \pi/2$. Všeobecne máme $y_a(x_i)$, ak si jedny súradnice označíme y_a a druhé x_i . Označenie $y_a(x_i)$ znamená, že máme n funkcií y_a závislých od n premenných x_i . Každá z týchto funkcií musí byť *hladká*, čo je v našom prípade na kružnici splnené.

Na kružnici sme zaviedli pomocou dvoch máp súradnice pre každý bod. Takýto systém máp sa nazýva *atlas*.

Keď si to zhrnieme, tak na tvorbu variety potrebujeme zadať dve veci:

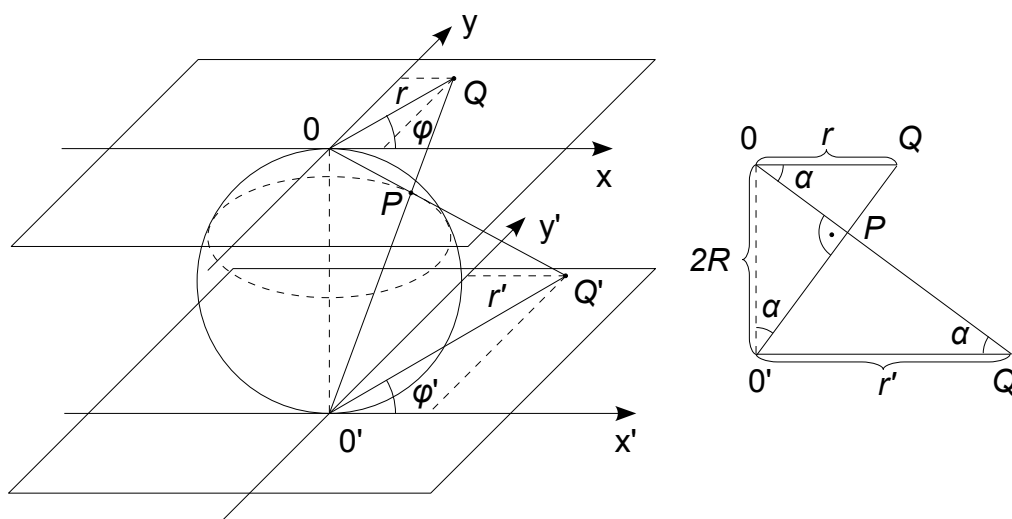
- množinu bodov variety,
- aspoň jeden atlas.

V nasledujúcich podkapitolách rozoberieme dve variety, ktoré budeme v tejto práci ešte potrebovať.

6.2 Sféra S^2

Zaujímavým a pre nás dôležitým príkladom variety je dvojrozmerná sféra S^2 . Jednou z možností zavedenia lokálnych súradníc na sfére sú klasické sférické súradnice φ, ϑ . My však budeme potrebovať iný druh súradníc, ktorý si zavedieme v tejto podkapitole. Nové súradnice vzniknú špeciálnym postupom, ktorému sa hovorí *stereografická projekcia*.

Pri vysvetľovaní si pomôžeme obrázkom 6.3. Na väčšom obrázku vľavo je znázornená samotná konštrukcia súradníc, ktorá sa robí nasledovne.

Obr. 6.3: Stereografická projekcia na sfére S^2

Zvolíme si bod na sfére, ktorý chceme premietat'. Nazvime ho P . Z južného pólu gule vedieme priamku cez bod P . V mieste, kde sa priamka pretne s rovinou dotykovou k severnému pólu gule, je obraz bodu P . Označíme ho Q . Na rovine dotykovej k severnému pólu, kde leží aj bod Q si zvolíme súradnicové osi x, y , ktoré sa pretínajú na severnom póle gule. V tejto sústave má bod Q polárne súradnice r, φ .

Týmto spôsobom sa dajú zobrazit' všetky body sféry okrem južného pólu. Kvôli tomuto bodu musíme zaviesť ďalšiu mapu. Urobíme to takto.

Ten istý bod P na sfére budeme premietat' na rovinu dotykovú k *južnému* pólu gule. Vedeime priamku zo severného pólu cez bod P a tam, kde sa pretne so spomínanou rovinou, bude obraz bodu P - bod Q' . V dotykovej rovine k južnému pólu tiež zavedieme súradnicovú sústavu. Súradnicové osi x', y' zvolíme *rovnobežné* so súradnicovými osami x, y v dotykovej rovine k severnému pólu. Súradnice bodu Q' označíme rovnakými písmenami ako súradnice bodu Q , ale budú čiarkované - r', φ' .

Aby bolo zavedenie súradníc na sfére úplné, musíme nájsť prevodové

vzťahy medzi týmito dvoma mapami. K tomu nám poslúži obrázok 6.3 vpravo, kde je zobrazený prierez rovinou vytvorenou pólmi gule a zobrazovaným bodom P . Treba si uvedomiť, že aj body Q a Q' ležia v tejto rovine. Navyše táto rovina je kolmá na obe dotykové roviny, takže uhly φ a φ' sú rovnaké

$$\varphi = \varphi'. \quad (6.1)$$

Vzťah medzi r a r' nájdeme tiež pomocou obrázku 6.3. Polomer sféry sme si označili R a uhol medzi spojnicou pólov a spojnicou južného pólu s bodom P sme pomenovali α . Potom platia nasledovné rovnosti:

$$r = 2R \tan \alpha, \quad (6.2)$$

$$r' \tan \alpha = 2R, \quad (6.3)$$

odkiaľ dostaneme prechodové vzťahy pre r , r'

$$r'(r) = \frac{4R^2}{r}, \quad (6.4)$$

$$r(r') = \frac{4R^2}{r'}. \quad (6.5)$$

Treba ešte skontrolovať, či sú prechodové vzťahy hladké funkcie. Vidíme, že problémový je len bod $r = 0$ resp. $r' = 0$. Tieto však nepatria do prieniku našich dvoch máp, teda pre ne vôbec nemá zmysel hovoriť o prechodových vzťahoch.

Ešte odvodíme prechodový vzťah pre polohové vektory. Pre kartézské súradnice platí:

$$x = r \cos \varphi,$$

$$x' = r' \cos \varphi.$$

Po dosadení do (6.4) máme

$$x' = \frac{4R^2}{r^2} x, \quad \text{analogicky} \quad y' = \frac{4R^2}{r^2} y. \quad (6.6)$$

Keď dáme posledné dva vzťahy dokopy, pre polohové vektory $\mathbf{r} = (x, y)$, $\mathbf{r}' = (x', y')$ dostaneme:

$$\mathbf{r}' = \frac{4R^2}{r^2} \mathbf{r}. \quad (6.7)$$

6.3 Komplexný projektívny priestor $\mathbb{C}P^1$

Ďalšia varieta, ktorá bude pre nás veľmi užitočná, je *komplexný projektívny priestor* $\mathbb{C}P^1$.

Vo všeobecnosti n -rozmerný komplexný projektívny priestor $\mathbb{C}P^n$ je priestor všetkých komplexných priamok v \mathbb{C}^{n+1} , ktoré prechádzajú počiatkom. Treba si uvedomiť, že komplexná priamka je množina všetkých komplexných násobkov fixovaného nenulového vektora. Z reálneho pohľadu je to teda *dvojrozmerný* útvar.

Priestor $\mathbb{C}P^n$ hrá významnú úlohu v kvantovej mechanike. Je to totiž *priestor stavov* $(n + 1)$ -hladinovej sústavy, lebo komplexné vektory v Hilbertovom priestore, ktoré sa líšia len komplexným násobkom, zodpovedajú jednému stavu.

V tejto práci budeme potrebovať len priestor stavov *dvojhladinovej sústavy* - $\mathbb{C}P^1$. Tu si ho predpripravíme. Postup, ktorý použijeme sa dá zovšeobecniť aj na n -rozmerný projektívny priestor.

Už vieme, že body variety tvoria priamky prechádzajúce počiatkom. Pustime sa do hľadania máp. Komplexný priestor sa veľmi ťažko predstavuje, preto poradíme čitateľovi držať si v hlave predstavu nejakého reálneho priestoru, napríklad \mathbb{R}^2 , a v ňom si predstavovať reálne priamky prechádzajúce počiatkom. Počítať však budeme pre $\mathbb{C}P^1$.

Začnime z normálneho dvojrozmerného komplexného priestoru \mathbb{C}^2 . Ľubovoľná priamka prechádzajúca počiatkom je v tomto priestore jednoznačne určená smerovým vektorom alebo jeho ľubovoľným *komplexným* násobkom. Takže vektorov, ktoré určujú priamku je veľa. Na zavedenie súradníc na na-

šej variete potrebujeme *vzájomne jednoznačné* zobrazenie medzi priamkami z $\mathbb{C}P^1$ a vektormi z \mathbb{C}^2 .

Množinu všetkých vektorov určujúcich komplexnú priamku tvoria vektory

$$(\lambda z_1, \lambda z_2), \quad (6.8)$$

kde λ je komplexné číslo a z_i sú súradnice ľubovoľného fixovaného komplexného vektora ležiaceho na našej skúmanej komplexnej priamke. Zvoľme si *jedného* reprezentanta tejto množiny. Takého, aby $\lambda z_1 = 1$. Tento vektor bude vyzerat' nasledovne:

$$\left(1, \frac{z_2}{z_1}\right) \quad (6.9)$$

a keď si prezradíme súradnice $w = z_2/z_1$, máme

$$(1, w). \quad (6.10)$$

To sú práve vektory, ktoré ležia na rovine $z_1 = 1$. Takto sme získali jednoznačné zobrazenie medzi vektormi a priamkami. Všetkým priamkám, ktorých smerové vektory nemajú na mieste z_1 nulu, čiže takým, ktoré nie sú kolmé na os z_1 , priradíme súradnicu w .

Pre priamky, ktoré *majú* na mieste z_1 nulu, nemôžeme použiť predchádzajúcu mapu. Preto zvolíme ako reprezentujúci vektor taký, ktorý má jednotku na mieste z_2 :

$$\left(\frac{z_1}{z_2}, 1\right) = (w', 1). \quad (6.11)$$

Súradnicou w' popíšeme všetky priamky, ktoré nemajú nulu na mieste z_2 .

Vektor, ktorý má nulu na mieste z_1 aj z_2 , neurčuje žiadnu priamku. Takže dve mapy, čo sme vytvorili, už pokrývajú *všetky* priamky.

Prechodové vzťahy medzi našimi mapami sú veľmi jednoduché:

$$w'(w) = \frac{1}{w}, \quad (6.12)$$

$$w(w') = \frac{1}{w'}. \quad (6.13)$$

Hladkosť splňajú v každom bode okrem $w = 0$ resp. $w' = 0$. Ale to sú práve body, ktoré nepatria do prieniku máp.

Kapitola 7

Dvojhladinová sústava

V tejto kapitole využijeme veľkú časť z toho, čo sme sa v tejto práci naučili. Budeme riešiť Schrödingerovu rovnicu pre *dvojhladinovú sústavu*. Nájdeme *integrálne krivky* jej hamiltonovského vektorového poľa a aj *fázový portrét*.

7.1 Riešenie v $\mathbb{C}P^1$

V tejto podkapitole nájdeme riešenie Hamiltonových rovníc pre dvojhladinovú sústavu na variete $\mathbb{C}P^1$. Budeme postupovať krok za krokom.

Začneme z obyčajného komplexného priestoru \mathbb{C}^2 . Dvojhladinová sústava je v ňom reprezentovaná vektorom

$$z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}, \quad (7.1)$$

pre ktorý platí Schrödingerova rovnica

$$i\dot{z}_a = \hat{H}_{ab}z_b. \quad (7.2)$$

Nájdeme klasický hamiltonián H , ktorý má tvar

$$H = \frac{1}{2}\bar{z}_a\hat{H}_{ab}z_b. \quad (7.3)$$

Dosadíme ho do Hamiltonových rovníc

$$\dot{z}_a = -2i\bar{\partial}_a H \quad (7.4)$$

a vyjde

$$\dot{z}_a = -i\hat{H}_{ab}z_b, \quad (7.5)$$

čo je sústava Hamiltonových rovníc pre z_a . Keď si túto sústavu rovníc rozpiseme podrobne pre našu dvojhladinovú sústavu, dostaneme rovnice

$$\dot{z}_1 = -i\hat{H}_{11}z_1 - i\hat{H}_{12}z_2, \quad (7.6)$$

$$\dot{z}_2 = -i\hat{H}_{21}z_1 - i\hat{H}_{22}z_2. \quad (7.7)$$

Vieme, že stavom dvojhladinovej sústavy zodpovedajú v komplexnom priestore \mathbb{C}^2 priamky prechádzajúce počiatkom, čiže body z komplexného projektívneho priestoru $\mathbb{C}P^1$. Naše súradnice upravíme do tvaru, v ktorom bude zrejmé, čo patrí do $\mathbb{C}P^1$ a čo je nepodstatné.

Veľkosť vektora z si označíme r a pomocou nej si vyjadríme veľkosť čísla z_1 :

$$r^2 = |z_1|^2 + |z_2|^2, \quad (7.8)$$

$$r^2 = |z_1|^2 \left(1 + \left| \frac{z_2}{z_1} \right|^2 \right). \quad (7.9)$$

Keď zlomok z_2/z_1 označíme w , veľkosť čísla z_1 bude

$$\frac{r}{\sqrt{1 + |w|^2}} = |z_1|. \quad (7.10)$$

Číslo z_1 sa dá napísať ako

$$z_1 = |z_1|e^{i\phi} = \frac{re^{i\phi}}{\sqrt{1 + |w|^2}}. \quad (7.11)$$

Vektor z prepíšeme s využitím predchádzajúcich výpočtov:

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = z_1 \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{z_2}{z_1} \end{pmatrix}, \quad (7.12)$$

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \frac{re^{i\phi}}{\sqrt{1+|w|^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ w \end{pmatrix}. \quad (7.13)$$

V tomto novom vyjadrení súradníc vidieť, že číslo w je tou *dôležitou* časťou vektora z . Je to časť, ktorá hovorí o priestore stavov $\mathbb{C}P^1$. Všetko ostatné je len nejaký komplexný násobok, od ktorého, ako vieme, nezávisí stav sústavy.

Rozpíšme si súradnice po zložkách:

$$z_1 = \frac{re^{i\phi}}{\sqrt{1+|w|^2}}, \quad (7.14)$$

$$z_2 = \frac{re^{i\phi}w}{\sqrt{1+|w|^2}} \quad (7.15)$$

a dosadíme do Hamiltonových rovníc. Najprv do prvej rovnice (7.6), kde sa hneď vykrátí zlomok $\frac{e^{i\phi}}{\sqrt{1+|w|^2}}$:

$$i\dot{\phi}r + \dot{r} - \frac{r\bar{w}\dot{w}}{2(1+|w|^2)} = -i\hat{H}_{11}r - i\hat{H}_{12}rw, \quad (7.16)$$

a potom do druhej rovnice (7.7), kde sa vykrátí to isté:

$$i\dot{\phi}rw + \dot{r}w + r\dot{w} - \frac{r|w|^2\dot{w}}{2(1+|w|^2)} = -i\hat{H}_{21}r - i\hat{H}_{22}wr \quad (7.17)$$

Keď dosadíme z prvej rovnice \dot{r} do druhej rovnice, dostaneme

$$\dot{w} = i(\hat{H}_{11}w + \hat{H}_{12}w^2 - \hat{H}_{21} - \hat{H}_{22}w), \quad (7.18)$$

čo je rovnica pre integrálne krivky hamiltonovského vektorového poľa pre dvojhladinovú sústavu.

Vidíme, že súradnice r , ϕ sú skutočne *nepotrebné*, že riešenie pre zaujímavú premennú w od nich nezávisí.

Vo všeobecnosti je kvantový hamiltonián \hat{H} lineárnou kombináciou Pauliho matíc $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. My si situáciu zjednodušíme. Zvolíme si hamiltonián zodpovedajúci spinu elektrónu (ako modelu dvojhľadinovej sústavy) v homogénnom magnetickom poli v *smere osi z*. Tento hamiltonián má tvar

$$\hat{H} = -\frac{eB}{2m} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (7.19)$$

kde e je náboj elektrónu, m je jeho hmotnosť a B je veľkosť magnetického poľa. Elementy hamiltoniánu \hat{H}_{12} a \hat{H}_{21} sú v tomto prípade nulové, čím sa rovnica (7.18) zjednoduší na rovnicu

$$\dot{w} = i(\hat{H}_{11} - \hat{H}_{22})w. \quad (7.20)$$

Jej riešením je

$$w = w_0 e^{i(\hat{H}_{11} - \hat{H}_{22})t}, \quad (7.21)$$

kde w_0 je w v čase $t = 0$. Pre skrátenie zápisu ešte označme $\omega = (\hat{H}_{11} - \hat{H}_{22})$. Riešenie má potom tvar

$$w = w_0 e^{i\omega t}. \quad (7.22)$$

Táto rovnica hovorí o pohybe (o integrálnych krivkách) vo fázovom priestore $\mathbb{C}P^1$. Tento priestor sa dosť ťažko predstavuje, preto si riešenie trošku upravíme. Konkrétne túto úpravu vysvetlíme v nasledujúcej podkapitole. Dopredu však čitateľovi môžeme sľúbiť, že výsledok bude veľmi pekný a ľahko predstaviteľný.

7.2 Izomorfizmus medzi $\mathbb{C}P^1$ a S^2

V tejto podkapitole si ukážeme, že variety $\mathbb{C}P^1$ a S^2 sú *izomorfné*. Pomôže nám to lepšie si predstaviť riešenie (7.22) z predchádzajúcej kapitoly. Pri dôkaze využijeme nasledovnú myšlienku.

Nech sú dané dve variety. Na oboch sú zavedené súradnice pomocou práve dvoch máp. Na jednej sú to mapy x^1, x^2 a na druhej mapy y^1, y^2 , kde x^1, x^2, y^1, y^2 predstavujú n -tice súradníc x_a^1 , atď. Potom, ak sú prechodové vzťahy medzi týmito mapami na obidvoch varietách dané rovnakým vzorcom pre funkcie $x_a^1(x_1^2, x_2^2, \dots, x_n^2), y_a^1(y_1^2, y_2^2, \dots, y_n^2)$, sú tieto dve variety izomorfné a izomorfizmus medzi nimi má tvar

$$x_a^1 = y_a^1, \quad (7.23)$$

$$x_a^2 = y_a^2. \quad (7.24)$$

Najprv treba nájsť rovnaké vzorce pre prechodové vzťahy medzi mapami na $\mathbb{C}P^1$ a na S^2 . Na to potrebujeme trochu transformovať súradnice na sfére, ktoré sme odvodili v časti 6.2, konkrétne rovnicu (6.7)

$$\mathbf{r}' = \frac{4R^2}{r^2} \mathbf{r}. \quad (7.25)$$

Urobíme zámenu súradníc

$$\mathbf{r} = (x, y) \mapsto z = x + iy, \quad (7.26)$$

$$\mathbf{r}' = (x', y') \mapsto z' = x' + iy'. \quad (7.27)$$

V podstate sme len zmenili reálnu rovinu s kartézskymi súradnicami na Gaussovu rovinu. Dosadíme zamenené súradnice do (7.25):

$$z' = \frac{4R^2}{|z|^2} z = \frac{4R^2}{\bar{z}}. \quad (7.28)$$

Následne urobíme ešte jednu transformáciu

$$\bar{z} \mapsto 2Rt, \quad (7.29)$$

$$z' \mapsto 2Rt', \quad (7.30)$$

kde t, t' sú komplexné čísla. A dostaneme prechodový vzťah

$$t' = \frac{1}{t}, \quad (7.31)$$

ktorý je rovnaký ako prechodový vzťah (6.12) pre $\mathbb{C}P^1$.

Znamená to, že komplexný projektívny priestor $\mathbb{C}P^1$ a sféra S^2 sú izomorfné a izomorfné zobrazenie medzi nimi má tvar

$$w = t, \quad (7.32)$$

$$w' = t' \quad (7.33)$$

(obe variety sú dvojrozmerné, máme na nich po dve mapy a bijekcia v rámci zodpovedajúcich máp je daná vzorcami (7.32) a (7.33))

Keď si spomenieme, ako sme sa dostali k súradnici t , môžeme spätne zrekonštruovať jej vzťah až k sférickým súradniciam, s ktorými už vieme pracovať.

$$w = t \mapsto \frac{\bar{z}}{2R} = \frac{x - iy}{2R} \mapsto \frac{x, -y}{2R}, \quad (7.34)$$

$$w' = t' \mapsto \frac{z'}{2R} = \frac{x' + iy'}{2R} \mapsto \frac{x', y'}{2R}. \quad (7.35)$$

Vráťme sa k obrázku 6.3. Vidíme, že jedna zo sférických súradníc bodu P , uhol, ktorý sa štandardne označuje φ a ktorý meriame v rovine xy od osi x proti smeru hodinových ručičiek, je rovnaký ako φ resp. φ' , ktoré máme zakreslené na obrázku. Druhá sférická súradnica, uhol ϑ je dvojnásobkom uhla α

$$\frac{\vartheta}{2} = \alpha. \quad (7.36)$$

S touto vedomosťou už ľahko vypočítame vzťahy medzi sférickými súradnicami ϑ , φ a súradnicami x , y , ktoré sme dostali stereografickou projekciou. Pomôžeme si vzťahom (6.2)

$$\tan \varphi = -\frac{y}{x}, \quad (7.37)$$

$$\tan \vartheta/2 = \tan \alpha = \frac{r}{2R} = \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{2R}. \quad (7.38)$$

Odtiaľto je už len krok k priamemu prevodu medzi komplexným projek-tívnym priestorom $\mathbb{C}P^1$ so súradnicou w a sférickými súradnicami ϑ , φ

$$\tan \varphi \mapsto \frac{\operatorname{Im}(w)}{\operatorname{Re}(w)}, \quad (7.39)$$

$$\tan \vartheta/2 \mapsto |w|, \quad (7.40)$$

kde $\operatorname{Im}(w)$, $\operatorname{Re}(w)$ sú imaginárna a reálna časť w .

7.3 Riešenie na sfére S^2

Konečne sa znovu dostávame k riešeniu dvojhladinovej sústavy v homogén-nom magnetickom poli v smere osi z . Pripomeňme si tvar riešenia pre integ-rálne krivky (7.22) v $\mathbb{C}P^1$

$$w = w_0 e^{i\omega t} \quad (7.41)$$

a prevedme ho na sľubované vyjadrenie v sférických súradniciach. Využijeme pri tom vzťahy (7.39) a (7.40)

$$\tan \varphi \mapsto \frac{\operatorname{Im}(w)}{\operatorname{Re}(w)} = \tan(\omega t), \quad (7.42)$$

$$\tan \vartheta/2 \mapsto |w| = |w_0|. \quad (7.43)$$

V sférických súradniciach už vieme dekódovať riešenie. Riešením dvoj-hladinovej sústavy v homogénnom magnetickom poli v smere osi z je bod na sfére so súradnicami ϑ , φ . Kde

$$\vartheta = 2 \arctan |w_0|, \quad (7.44)$$

čo je súradnica, ktorá ostáva počas celého pohybu rovnaká, a

$$\varphi = \omega t, \quad (7.45)$$

čo je súradnica rovnomerne narastajúca s časom. Dá sa ukázať, že v čase t tento výsledok popisuje *spinor*, ktorý má *ostrý priemet spinu* $\frac{1}{2}$ na os určenú jednotkovým vektorom $n = n(\vartheta, \varphi)$. A vidíme, že jednotkový vektor n vykonáva *precesný* pohyb okolo osi z .

Vypočítajme ešte veľkosť rýchlosti pohybu bodu (stavu) v tomto fázovom priestore.

Polohový vektor bodu na sfére v sférických súradniciach je

$$\mathbf{r} = (\sin \vartheta \cos(\omega t), \sin \vartheta \sin(\omega t), \cos \vartheta). \quad (7.46)$$

Rýchlosť bodu na sfére je potom

$$\dot{\mathbf{r}} = (-\omega \sin \vartheta \sin(\omega t), \omega \sin \vartheta \cos(\omega t), 0). \quad (7.47)$$

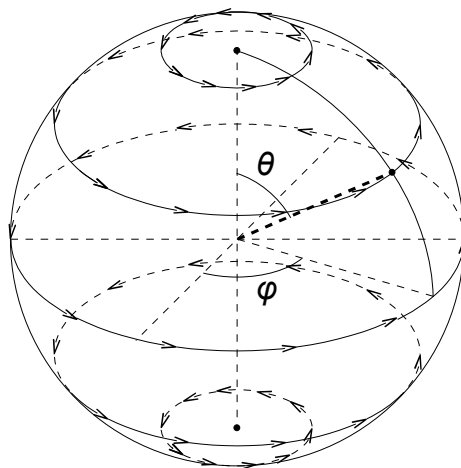
Takže veľkosť rýchlosti je

$$|\dot{\mathbf{r}}| = \omega \sin \vartheta, \quad (7.48)$$

čo je presne veľkosť obvodovej rýchlosti bodu na sfére, ktorá rotuje okolo osi z uhlovou rýchlosťou ω . Celý fázový priestor (celá sféra) teda rotuje uhlovou rýchlosťou ω . Toto je zakreslené aj na obrázku 7.1, ktorý je *fázovým portrétom* dvojhľadinovej sústavy (v zmysle bežnej klasickej Hamiltonovej mechaniky).

Keď interpretujeme výsledok, ktorý sme dostali, v kvantovej mechanike, zistíme, že *stacionárne stavy* sú na severnom a južnom póle gule. Tie sa nepohybujú a majú stále ostrú hodnotu priemetu spinu na tú istú os. Najrýchlejšie sa meniace stavy sú na rovníku. Vidíme, že rotujú najväčšou rýchlosťou. Tu sa nachádzajú aj stavy známe ako „spin v smere x “ a „spin v smere y “.

Keby bolo magnetické pole orietnované v inom smere, dá sa ukázať, že sféra by sa jednoducho točila okolo inej osi. Okolo osi určenej smerom magnetického poľa.



Obr. 7.1: Dvojhladinová sústava - fázový portrét na sfére

7.4 Hamiltonovský časový vývoj

Chceli by sme sa presvedčiť, či to, čo nám vyšlo na sfére, je naozaj *hamiltonovský* časový vývoj. Skúsme nájsť premenné a hamiltonián, ktorý generuje takýto časový vývoj

$$\vartheta(t) = \vartheta_0 = \text{konš.}, \quad (7.49)$$

$$\varphi(t) = \varphi_0 + \omega t, \quad (7.50)$$

kde ϑ_0 a φ_0 sú súradnice v čase $t = 0$.

Zvoľme si kanonické premenné $(q, p) = (\varphi, -\cos \vartheta)$ a nájdime k nim vhodný hamiltonián $H(q, p)$, taký, aby riešeniami hamiltonových rovníc boli funkcie (7.49) a (7.50).

Hamiltonove rovnice vyzerajú nasledovne

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad (7.51)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}. \quad (7.52)$$

Z rovnic (7.49) a (7.50) vieme vypočítať pravé strany

$$\dot{q} = \dot{\varphi} = \omega, \quad (7.53)$$

$$\dot{p} = (-\dot{\cos \vartheta}) = 0. \quad (7.54)$$

Keď dáme dokopy posledné štyri rovnice, dostaneme:

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \omega, \quad (7.55)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q} = 0. \quad (7.56)$$

Riešením tejto sústavy je hamiltonián:

$$H(q, p) = \omega p, \quad (7.57)$$

čiže v premenných φ, ϑ

$$H(\varphi, \vartheta) = -\omega \cos \vartheta. \quad (7.58)$$

Časový vývoj, ktorý nám vyšiel na sfére je naozaj *hamiltonovský* pre kano-
nické súradnice $(q, p) = (\varphi, -\cos \vartheta)$ a hamiltonián (7.58) .

Záver

Časový vývoj v *Schrödingerovej rovnici* zachováva normu stavového vektora. Tejto vlastnosti sa hovorí *unitarita časového vývoja*.

Videli sme, že vďaka unitarite časového vývoja môžeme Schrödingerovu rovnicu prepísať na *Hamiltonove rovnice* a na časový vývoj sa pozeráť ako na hamiltonovský. Tento pohľad nám umožnil využiť nástroje *vektorových polí* a *integrálnych kriviek* a prípadne *fázových portrétov* na skúmanie dynamiky v kvantovej mechanike.

Zistili sme, že každý hamiltonovský časový vývoj zachováva nedegenerovanú reálnu *antisymetrickú* bilineárnu formu ω . Hamiltonovský časový vývoj v kvantovej mechanike je *výnimočný* v tom, že navyše zachováva aj nedegenerovanú reálnu *symetrickú* bilineárnu formu. Vďaka nej sa dá vo fázovom priestore vypočítať dĺžka vektorov.

Vypočítali sme veľkosť kolmej zložky rýchlosti pohybu stavu vo fázovom priestore a zistili sme, že úzko súvisí s *neurčitosťou energie* daného stavu: rýchlo sa odchádza zo stavov, ktoré majú veľkú neurčitosť energie.

V celej práci sme sa niekoľkokrát v náznakoch priblížili ku *skutočnému* fázovému priestoru hamiltonovskej dynamiky v kvantovej mechanike, k *priestoru lúčov*. Na záver sme sa pozreli na časový vývoj *dvojhľadinovej sústavy* v homogénnom magnetickom poli. Ako klasický fázový priestor vyšla sféra a ako hamiltonovský tok vyšlo rovnomerné otáčanie tejto sféry okolo vektora magnetického poľa.

Literatúra

- [Fec04] M. Fecko. *Diferenciálna geomertia a Lieove grupy pre fyzikov*. IRIS, Bratislava, 2004.
- [Gri94] J. F. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, United States, 1994.
- [PGČ83] J. Pišút, L. Gomolčák a V. Černý. *Úvod do kvantovej mechaniky*. Alfa, Bratislava, 2. vyd edition, 1983.
- [TR] J. Tillich a L. Richterek. Klasická mechanika. <http://optics.upol.cz/~richterek/mechanika.pdf>.
- [Wik09] Wikipedia. Wikipedia, the free encyclopedia, 2009. http://en.wikipedia.org/wiki/Linear_complex_structure.
- [Zla] P. Zlatoš. Lineárna algebra a geometria. <http://thales.doa.fmph.uniba.sk/zlatos/>.