ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra fyziky
Obor: Matematické inženýrství
Zaměření: Matematická fyzika

Feynmanův integrál přes trajektorie a jeho aproximace

Feynman path integral and its approximations

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Autor práce:	**Jan Fuksa**
Školitel:	**Prof. Ing. Jiří Tolar, DrSc.**
Datum:	**6.7.2009**

Prohlašuji, že jsem předloženou práci vypracoval samostatně a že jsem uvedl veškerou použitou literaturu.

Nemám závažný důvod proti užití tohoto školního díla ve smyslu§60 Zákona č.121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon).

V Praze, dne 6.7.2009

Poděkování

Děkuji Prof. Jiřímu Tolarovi za velmi ochotný a trpělivý přístup, za nesčetné konzultace a poskytnutí mnoha hodnotných studijních materiálů.

Název práce: **Feynmanův integrál přes trajektorie a jeho aproximace**
Autor: Jan Fuksa

Obor: Matematické inženýrství
Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: Prof. Ing. Jiří Tolar, DrSc.
Katedra fyziky
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Abstrakt:

Tato práce shrnuje základy problematiky Feynmanova integrálu a konečně rozměrné kvantové mechaniky. Následovně využijeme $N \times N$ aproximaci ve Feynmanově integrálu. Výsledky úzce souvisí se vzájemně komplementárními bázemi.

Klíčová slova: Feynmanův integrál, konečně rozměrný Hilbertův prostor, konečná Heisenbergova grupa, $N \times N$ aproximace, vzájemně komplementární báze

Title: **Feynman path integral and its approximations**
Author: Jan Fuksa

Abstract:

This thesis summarizes basics of Feynman path integral and finite-dimensional quantum mechanics. We consequently use $N \times N$ approximation in Feynman path integral. Results are closely related to mutually unbiased bases.

Keywords: Feynman path integral, finite-dimensional Hilbert space, finite Heisenberg group, $N \times N$ approximation, mutually unbiased bases

Obsah

Úvod

První kapitola této práce je shrnutím Feynmanových myšlenek o dráhovém integrálu. Výsledky Feynmanových úvah poté porovnáváme s výsledky, které dává operátorový přístup ke kvantové mechanice. Není velkým překvapením, že tyto výsledky jsou stejné. Čili Feynmanova formulace kvantové mechaniky je analogická předchozím formulacím.

Druhá kapitola se zabývá kvantovou mechanikou na Hilbertových prostorech konečné dimenze N. Konfiguračním prostorem je diskrétní množina N bodů, kterou vybavíme strukturou Abelovské grupy Z_N. Pro zavedení kvantové mechaniky se buduje zvláštní matematická konstrukce, která poskytuje pozorovatelné hybnosti. Fázový prostor $Z_N \times Z_N$ úzce souvisí s konečnou Heisenbergovou grupou.

Ve třetí kapitole se zabýváme analogií volné kvantové částice na diskrétním konfiguračním prostoru. Zde se objeví operátor C_N elementárního časového vývoje, který je posléze vhodně modifikován.

Čtvrtá kapitola pojednává o $N \times N$ aproximaci jednorozměrných kvantových systémů. Odtud vyplynou i důvody pro zavedení zmíněné modifikace operátou C_N.

V páté kapitole je využita $N \times N$ aproximace ve Feynmanově integrálu. Zde se objevuje (emerge) Lagrangián. Již podruhé je modifikován operátor C_N.

Šestá a poslední kapitola se týká pojmu vzájemné komplementerity bází. Zavádí se zde matematická struktura, která umožňuje nalezení těchto bází pro Hilbertovy prostory prvočíselné dimenze N. Prvočíselnost je naprosto esenciální pro nalezení těchto bází. Na závěr se ukazuje, že existuje úzká a pro mě i velmi překvapivá souvislost mezi výsledky získanými v páté kapitole a procesem hledání vzájemně komplementárních bází.

Kapitola 1

Feynmanův integrál v kvantové mechanice

První, kdo přišel s myšlenkou, že existuje vztah mezi klasickou akcí a kvantovou mechanikou, byl P. A. M. Dirac. Této myšlenky se chopil R. P. Feynman a dále ji rozvinul ve své disertaci. Známým se však stal až jeho článek *Space-time approach to quantum mechanics* zveřejněný v roce 1948.

Od té doby nalezl Feynmanův integrál mnoho aplikací v různých oblastech fyziky.

V první části této kapitoly zavedeme Feynmanův integrál pomocí úvah, které Feynman publikoval právě ve zmíněném článku [1]. V druhé části jenom krátce zmíníme i operátorový pohled na tuto problematiku.

1.1 Klasická akce

Začněmě u akčního funkcionálu. V klasické mechanice je trajektorie, po které se částice pohybuje, označme ji $x_0(t)$, určena tzv. *principem nejmenší akce*. To znamená, že existuje funkcionál, označme ho S, na prostoru všech trajektoriií, který nabývá na klasické trajektorii $x_0(t)$ extremální hodnoty. Tento funkcionál se nazývá *akční funkcionál*. Je dán výrazem

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt,$$

kde funkce L je Lagrangeova funkce systému a časový interval (t_a, t_b) je doba, během které zkoumáme pohyb částice.

Nalezení extremální trajektorie systému $x_0(t)$ je tradiční úloha variačního počtu. Předpokládejme, že se dráha liší od extremální dráhy $x_0(t)$ jenom málo o dráhu $\delta x(t)$.

Dále předpokládejme, že koncové body dráhy $x_0(t)$ jsou zafixovány a že platí

$$\delta x(t_a) = \delta x(t_b) = 0.$$

Mluvíme o tzv. variaci s pevnými konci. Nyní variujme funkcionál S. Podmínkou, aby $x_0(t)$ byla extremální trajektorií, je platnost

$$\delta S = S[x_0 + \delta x] - S[x] = 0$$

do prvního řádu v δx. Potom dostáváme

$$\begin{aligned}\delta S &= \int\limits_{t_a}^{t_b} [L(\dot{x_0} + \delta\dot{x}, x_0 + \delta x, t) - L(x_0, \dot{x_0}, t)]\, dt = \\ &= \int\limits_{t_a}^{t_b} \left[\delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}(\dot{x_0}, x_0, t) + \delta x\frac{\partial L}{\partial x}(\dot{x_0}, x_0, t)\right] dt,\end{aligned}$$

kde jsme Lagrangeovu funkci rozvinuli do prvního řádu Taylorova polynomu. Integrací per partes dostaneme

$$\delta S = \left[\delta x\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right]_{t_a}^{t_b} - \int\limits_{t_a}^{t_b} \delta x \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x}\right] dt$$

Protože δx je v koncových bodech nulová a chceme, aby i δS bylo rovno nule, podle fundamentálního lemmatu variačního počtu dostáváme vztah určující dráhu klasické částice

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0.$$

To je ovšem Lagrangeova rovnice určující klasickou trajektorii pohybu systému popsaného Lagrangeovou funkcí L. Z klasického pohledu je tedy nejzajímavější extremální akce S_0.

Ve Feynmanově popisu definujeme pravděpodobnostní amplitudu jako sumu amplitud všech hladkých drah v prostoročase. Příspěvek každé takové dráhy bude určen pomocí akce odpovídající této dráze. Takto zavedeme akci do kvantové mechaniky. Při definici křivkového integrálu každou dráhu určíme pomocí posloupnosti stále se zahušťujících množin ekvidistantních, na dané dráze ležících bodů a budeme počítat akce mezi těmito body, takto zakomponujeme veličinu klasické mechaniky do mechaniky kvantové.

1.2 Superpozice pravděpodobnostních amplitud

Ve Feynmanově formulaci kvantové mechaniky hraje ústřední roli amplituda pravděpodobnosti. V následujícím rozebereme změnu fyzikálního pohledu při přechodu od klasické ke kvantové mechanice. Ta se projeví obzvláště na počítání pravděpodobností.

Za účelem demonstrace této změny uvažme smyšlený experiment, při kterém vykonáme postupně tři měření. Označme je měření A, B, C. Mohou to být měření různých veličin, ale ne nutně. Čili klidně můžeme uvažovat tři stejná měření, například měření polohy. Dále označme jako a možný výstup měřění A, b možnou hodnotu měření B, obdobně pro C. Dále předpokládejme, že každé z těchto měření kompletně určí stav kvantově-mechanického systému. Takže například stav systému odpovídající hodnotě a získané při měření A je nedegenerovaný.

Kvantová mechanika dává výsledky pouze jako pravděpodobnosti. Abychom ukázali vztah mezi kvantovou a klasickou mechanikou, budeme předpokládat, že i klasická mechanika dává pravděpodobnostní předpovědi. Samozřejmě takové, že pravděpodobnost je buď nula nebo jednička. Ještě vhodnější pro naše účely je nahlížet na předpovědi klasické mechaniky jako na předpovědi fyziky statistické.

Definujeme P_{ab} jako pravděpodobnost, že jestliže při měření A naměříme hodnotu a, tak potom při měření B získáme hodnotu b. Podobně pro P_{bc}. Stejně označme P_{ac} pravděpodobnost, že jestliže naměříme hodnotu a, potom při měření C získáme hodnotu c. Konečně, označme jako P_{abc} pravděpodobnost naměření všech tří, tj. jestli měření A dá a, potom B dá b a C dá c. Jestliže událost proběhnuvší mezi naměřením a a b je nezávislá na události mezi b a c a naopak, potom platí

$$P_{abc} = P_{ab} P_{bc}. \tag{1.1}$$

Toto tvrzení je pravdivé i v kvantové mechanice, ovšem za předpokladu, že stav odpovídající hodnotě b je nedegenerovaný.

Samozřejmě platí vztah

$$P_{ac} = \sum_b P_{abc}. \tag{1.2}$$

To platí proto, že jestliže systém přejde ze stavu a do stavu c, musí mezitím projít nějakým stavem při měření B. Pravděpodobnost, že to byl stav b je P_{abc}. Sčítáme (nebo integrujeme) přes všechny vzájemně se vylučující stavy b.

Nyní se dostáváme k podstatnému rozdílu mezi kvantovou a klasickou mechanikou. Zatímco v klasické mechanice platí vztah (1.2) vždy, v kvantové mechanice často neplatí. Označme jako P^q_{ac} kvantově-mechanickou pravděpodobnost, že po naměření a bude naměřeno c. Tento klasický zákon sčítání pravděpodobností je v kvantové mechanice nahrazen jiným zákonem:

Existují komplexní čísla φ_{ab}, φ_{bc}, φ_{ac} taková, že

$$P_{ab} = |\varphi_{ab}|^2\,, \quad P_{bc} = |\varphi_{bc}|^2, \quad P_{ac} = |\varphi_{ac}|^2.$$

Klasický zákon

$$P_{ac} = \sum_b P_{ab} P_{bc} \tag{1.3}$$

je nahrazen novým

$$\varphi_{ac} = \sum_b \varphi_{ab} \varphi_{bc}. \tag{1.4}$$

Jestliže platí rovnice (1.4), rovnice (1.3) obvykle neplatí. Problém spočívá v tom, že aby platila rovnice (1.3) musel by systém mezi body a a c projít nějakou konkrétní hodnotou b. Ten žádnou takovou hodnotou neprochází, dokud se ji nepokusíme změřit. Pokud se tedy pokusíme zjistit hodnotu b, čili pokud uvedeme do činnosti k tomu sestavené zařízení, rovnice (1.3) je platná. Jinak ale žádnou hodnotou b vylučující ostatní hodnoty systém neprochází, naopak dochází k interferenci alternativ a proto je tolik vhodné pro vyjádření pravděpodobnosti zavedení „vlnové funkce“ φ. Toto je typický příklad vlnového charakteru hmoty.

Jestli pro vyjádření pravděpodobnosti použijeme vztah (1.3) nebo (1.4) závisí na tom, zda jsme se pokusili uskutečnit měření B. Pokud tedy není učiněn žádný pokus změřit hodnotu b, počítáme pravděpodobnost jako druhou mocninu absolutní hodnoty sumy jistých komplexních veličin—pro každou alternativu (dráhu) jedné.

Zobecněním předchozího na větší počet měření $A, B, C, \ldots, K$, dostáváme pro pravděpodobnost naměření $a, b, c, \ldots, k$ vztah

$$P_{abc\ldots k} = |\varphi_{abc\ldots k}|^2.$$

Pravděpodobnost výsledku a, c, k, když $b, d, \ldots$ jsou měřeny je dána klasickým vztahem

$$P_{ack} = \sum_b \sum_d \cdots \sum_{k-1} P_{abcd\ldots k},$$

zatímco pravděpodobnost toho samého, když $b, d, \ldots$ nejsou měřeny, je dána

$$P^q_{ack} = |\sum_b \sum_d \cdots \sum_{k-1} \varphi_{abcd\ldots k}|^2.$$

Veličinu $\varphi_{abcd\ldots k}$ nazýváme *amplituda pravděpodobnosti* pro podmínku

$$A = a, B = b, \ldots, K = k.$$

Amplitudu pravděpodobnosti můžeme samozřejmě vyjádřit vztahem

$$\varphi_{abcd\ldots k} = \varphi_{ab}\varphi_{bc}\cdots\varphi_{k-1,k}.$$

1.3 Pravděpodobnostní amplituda pro dráhu v prostoročase

Ideje použité v minulé kapitole nyní využijeme pro odvození amplitudy pravděpodobnosti pro dráhu v prostoročase. Omezíme na jednodimenzionální problém, výsledky pro problém vícerozměrný se dají získat jednoduchým zobecněním.

Předpokládejme částici popsanou souřadnicí polohy x. Dále předpokládejme, že na ní vykonáme obrovské množství po sobě jdoucích měření polohy. Nechť jsou tato měření oddělena časovým intervalem ϵ. Potom jako posloupnost měření $A, B, C, \ldots$ z předchozí kapitoly můžeme uvažovat posloupnost měření polohy x v časech t_1, t_2, t_3 $\ldots$, kde $t_{i+1} = t_i + \epsilon$. Označme jako x_i hodnotu polohy získanou při měření v čase t_i. Dostáváme posloupnost hodnot $x_1, x_2, x_3 \ldots$. Tato posloupnost pro $\epsilon \to 0$ definuje dráhu $x(t)$.

Pravděpodobnost, že dráha prochází body $x_1, x_2, \ldots$, označme jako $P(x_1, x_2, \ldots)$. (Spíše bychom $P(x_1, x_2, \ldots)$ měli nazvat hustotou pravděpodobnosti.) Pravděpodobnost, že dráha určená pomocí takovéto posloupnosti bodů leží v nějaké oblasti prostoročasu Ω je tradičně určena integrací nad oblastí Ω, čili dostáváme vztah

$$\int\limits_{\Omega} P(x_1, x_2, \ldots)dx_1 dx_2 \cdots = \int\limits_{a_1}^{b_1}\int\limits_{a_2}^{b_2}\cdots P(x_1, x_2, \ldots)dx_1 dx_2 \ldots$$

V kvantové mechanice je takovýto vztah pravdivý pro případ, že všechna měření polohy $x_1, x_2, \ldots$ byla vykonána. Jestliže však takováto měření neproběhla, tento vztah neplatí.

V dalším předpokládejme, že máme k dispozici jisté *ideální* měření, které určí pouze, zda dráha leží v oblasti Ω, ale toto že je současně maximum informace, které o systému pomocí tohoto měření zjistíme. V analogii k výsledkům poslední podkapitoly budeme očekávat, že pravděpodobnost nalezení dráhy v oblasti Ω bude dána kvadrátem absolutí hodnoty komplexní veličiny $\varphi(\Omega)$. Ve shodě se vztahem (1.4) ji definujeme jako

$$\varphi(\Omega) = \lim_{\epsilon\to 0}\int\limits_{\Omega} \Phi(x_1, x_2, \ldots)dx_1 dx_2 \cdots ,$$

kde jsme však sumu nahradili integrálem. Předpokládáme, že pro $\epsilon \to 0$ bude veličina Φ záviset na celé dráze $x(t)$ procházející body $x_1, x_2, \ldots$. Veličinu $\varphi(\Omega)$ nazveme *amplitudou pravděpodobnosti nalezení dráhy $x(t)$ v oblasti Ω.*

Tyto úvahy Feynman shrnul do postulátu:
I. Jestliže je nějaké ideální měření schopné určit, zda dráha leží v nějaké oblasti prostoročasu, potom pravděpodobnost, že výsledek bude pozitivní je dána kvadrátem absolutní hodnoty komplexních příspěvků, jednoho od každé dráhy v oblasti.

Tento postulát nám říká, jakou strukturu má pravděpodobnostní amplituda pro částici v prostročase. Avšak pojem sumy příspěvků od každé dráhy v oblasti je stále nicneříkající. Další Feynmanův postulát se týká právě toho, jak příspěvek takové dráhy vypadá:
II. Všechny dráhy přispívají stejně velikostí, ale liší se fází příspěvku, která je úměrná klasické akci.

Zkombinováním těchto dvou postulátů získáme, že

$$\varphi(\Omega) = \lim_{\epsilon \to 0} \int\limits_{\Omega} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_i S(x_{i+1}, x_i)\right] dx_1 dx_2 \cdots .$$

Pro $\epsilon \to 0$ však tento integrál diverguje. Je tudíž nutné zavést nějaký normalizační faktor závislý na ϵ. Ten budeme zavádět tak, aby pro každé ϵ platilo pro jistou událost, že je znormalizovaná k jedničce.

První postulát byl zaveden na základě rozdělení dráhy na posloupnost jejích bodů $x_1, x_2, \ldots$. Pro počítání akce $S = \int_\Omega L(x, \dot{x}, t)dt$ však musíme mít kompletní znalost dráhy ve všech jejích bodech. Proto budeme předpokládat, že funkce $x(t)$ se mezi body t_i a t_{i+1} pohybuje po dráze určené principem nejmenší akce, čili po dráze klasické částice. Potom budeme mít pro akci S vztah

$$S = \sum_i S(x_{i+1}, x_i), \tag{1.5}$$

kde

$$S(x_{i+1}, x_i) = \min \int\limits_{t_i}^{t_{i+1}} L(x(t), \dot{x}(t), t)dt. \tag{1.6}$$

Dostáváme tedy vztah pro pravděpodobnostní amplitudu, který bereme jako definici dráhového integrálu

$$\varphi(\Omega) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{A} \int\limits_{\Omega} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_i S(x_{i+1}, x_i)\right] \frac{dx_1}{A}\frac{dx_2}{A} \cdots , \tag{1.7}$$

kde A zavádíme jako normalizační konstantu závislou na ϵ. Integrujeme jen přes takové hodnoty x_i, $i = 0, 1, \ldots$, které leží v oblasti Ω.

Nyní počítejme amplitudu pravděpodobnosti pro oblast Ω, která bude ohraničena počátečním časem, označme ho t_0, ve kterém se částice bude nacházet v počáteční poloze x_0, a koncovým časem t_f, kterému odpovídá koncová poloha částice x_f. Dále předpokládejme, že všechna měření polohy x_i v časech t_i, $i = 1, 2, 3, \ldots$, kde všechna t_i leží v intervalu (t_0, t_f), jsou "neomezená", tzn. mohou nabývat libovolných hodnot z $\mathbb{R}$. Čili bude $a_i = -\infty$ a $b_i = \infty$ pro každé i. Toto je tedy amplituda pravděpodobnosti pro nalezení dráhy částice mezi body (x_0, t_0) a (x_f, t_f). Ekvivalentně ji ovšem můžeme interpretovat jako *amplitudu pravděpodobnosti přechodu z bodu* (x_0, t_0) *do bodu* (x_f, t_f). Takováto interpretace je možná z důvodu, že v tomto integrálu nyní „sčítáme“ přes úplně všechny trajektorie mezi body (x_0, t_0) a (x_f, t_f).

V této kapitole jsme postupovali podle úvah použitých ve Feynmanově článku [1], kde se pracuje s amplitudami pravděpodobnosti pro nalezení dráhy částice v nějaké oblasti Ω. Častější interpretace však je formulována v [2], kde se právě pracuje s amplitudami přechodu z jednoho bodu do druhého. Jak jsme ale viděli, tyto interpretace jsou ekvivalentní. Tyto amplitudy pravděpodobnosti přechodu můžeme též nazývat *amplitudy časové evoluce* a užívat pro ně značení $K(x_f, t_f; x_0, t_0)$. Tedy

$$K(x_f, t_f; x_0, t_0) = \varphi(\Omega) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{A} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \cdots \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_i S(x_{i+1}, x_i)\right] \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \cdots$$

Pro výpočty dráhového integrálu v konkrétních úlohách se používají různé aproximace akce stojící v exponentu, protože počítat takovýto integrál je velmi komplikované. Velmi častou aproximací je například nahrazení drah mezi body x_i a x_{i+1} rovnými čarami (lineárními funkcemi času). Potom můžeme aproximovat polohu jako $(x_i + x_{i+1})/2$ a rychlost jako $(x_{i+1} - x_i)/\epsilon$. Ne vždy je však takováto substituce vhodná nebo možná. Potom je nutné zavést substituce jiné, bude nutné použít jiný způsob výpočtu. Výpočet Feynmanova integrálu pomocí takovýchto aproximací můžeme považovat za jeho definici. Jak už jsme ale napsali, tyto aproximace jsou pro různé případy různé. Tedy i definice Feynmanova integrálu budou pro různé úlohy různé.

Ačkoliv pro různé případy se bude amplituda počítat různě, koncept sumy přes všechny dráhy zůstává správný a nezávislý na takovýchto způsobech počítání. Proto je vhodné zavést jakési univerzální, na různých způsobech počítání nezávislé, symbolické značení

$$K(x_f, t_f; x_0, t_0) = \int_{x_0}^{x_f} e^{\frac{i}{\hbar} S(x_f, x_0)} \mathcal{D}x(t),$$

kde $\mathcal{D}x(t)$ označuje jakousi „míru“ na prostoru trajektorií, závislou právě na způsobu počítání amplitudy pro konkrétní problém. Slovo „míra“ musí být opravdu v uvozovkách, protože na prostoru trajektorií neexistuje žádná obdoba Lebesgueovy míry.

Rovnice pro počítání amplitudy pravděpodobnosti spolu se vztahy (1.5) a (1.6) pro počítání akčního funkcionálu S a fyzikální interpretací, že kvadrát absolutní hodnoty této amplitudy dává pravděpodobnost daného jevu, jsou uceleným přístupem ke kvantové mechanice. Tímto se uzavírá Feynmanova formulace kvantové mechaniky.

1.4 Definice vlnové funkce

V následujícím se pokusíme zavést vlnovou funkci pomocí dráhového integrálu. V další podkapitole ukážeme, že splňuje Schrödingerovu rovnici. To bude důkazem toho, že tato formulace kvantové mechaniky je ekvivalentní tradiční formulaci.

Rovnice (1.5) umožňuje vyjádřit akci S jako součet. Odtud plyne možnost vyjádřit Φ jako produkt příspěvků od různých částí dráhy. Díky této vlastnosti je možné definovat vlnovou funkci.

Začněme tím, že oblast Ω, pro kterou budeme hledat amplitudu pravděpodobnosti, rozdělíme pomocí času $t \in (t_0, t_f)$ na tři části:

1. Na část $\Omega' \subset \Omega$ takovou, že Ω' leží celá dříve v čase než $t' < t$.
2. Na část $\Omega'' \subset \Omega$ takovou, že leží celá později v čase než $t'' > t$.
3. Na takovou část prostoročasu ležící mezi časy t' a t'', že hodnoty polohy budou v této oblasti neomezené, tj. je to celý prostoročas mezi přímkami $t = t'$ a $t = t''$. Tuto oblast můžeme vždy udělat libovolně úzkou. Nicméně v následujícím bude vhodné ji úplně nezanedbat.

Číslo $|\varphi(\Omega', \Omega'')|^2$ nyní udává pravděpodobnost nalezení dráhy v oblasti Ω' a Ω''. Považujeme-li čas t za přítomnost, potom můžeme číslo $|\varphi(\Omega', \Omega'')|^2$ interpretovat jako pravděpodobnost, že dráha se v minulosti nalézala v oblasti Ω' a v budoucnu se bude nalézat v oblasti Ω''. Po vydělení pravděpodobností nalezení částice v oblasti Ω', tedy číslem $|\varphi(\Omega')|^2$, dostaneme pravděpodobnost, že jestli se systém nalézal v minulosti v oblasti Ω', bude se v budoucnosti nalézat v oblasti Ω''.

Dále předpokládejme, že čas t odpovídá nějakému času t_k v rovnici (1.7). Předpokládáme, že nyní má ϵ infinitezimální velikost a že čas t_k leží někde uvnitř intervalu (t_0, t_f). Potom můžeme exponenciálu v této rovnici rozdělit na součin dvou částí

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{i=k}^{\infty} S(x_{i+1}, x_i)\right] \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{i=-\infty}^{k-1} S(x_{i+1}, x_i)\right].$$

První faktor obsahuje indexy k a větší, zatímco druhý obsahuje indexy k a menší. Navíc předpokládejme, že interval (t', t'') je natolik úzký, že v něm leží pouze čas t_k a všechny ostatní časy t_i připadají buď oblasti Ω' nebo Ω''. Proto nejdříve v rovnici (1.7) můžeme integrovat přes oblast Ω' obsahující jenom x_i s indexy menšími než k, čímž dostaneme funkci od x_k, protože přes x_k se neintegruje. Poté integrací přes oblast

Ω'' dostaneme opět funkci od x_k. Čili amplituda $\varphi(\Omega', \Omega'')$ se bude rovnat integrálu přes x_k ze součinu dvou faktorů, které budou funkcemi jenom od x_k a t, označme je $\chi^*(x_k, t)$ a $\psi(x_k, t)$. Máme

$$\varphi(\Omega', \Omega'') = \int_{\mathbb{R}} \chi^*(x_k, t)\psi(x_k, t)dx_k,$$

kde

$$\psi(x_k, t) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{A} \int_{\Omega'} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=-\infty}^{k-1} S(x_{i+1}, x_i)\right] \frac{dx_{k-1}}{A} \frac{dx_{k-2}}{A} \cdots$$

a

$$\chi^*(x_k, t) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{A} \int_{\Omega''} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=k}^{\infty} S(x_{i+1}, x_i)\right] \frac{dx_{k+1}}{A} \frac{dx_{k+2}}{A} \cdots ,$$

kde veličina χ^* je komplexní sdružení nějaké veličiny χ.

Nyní vidíme, že funkce ψ je závislá jenom na části prostoročasu předcházející času t, čili pokud považujeme čas t za přítomnost, potom je funce ψ závislá jenom na minulosti. Tímto je také kompletně určena, rozhodně nezávisí na tom, co se stane po čase t. Podobné tvrzení platí i pro funkci χ, ale ta tentokrát nezávisí na tom, co se stalo před časem t, a je plně určena oblastí Ω''. Nyní můžeme říct, že částice, která se nacházela v oblasti Ω', *se nachází ve stavu popsaném vlnovou funkcí* $\psi(x, t)$.

Navíc tato funkce obsahuje vše, co je nutné k počítání pravděpodobností přechodu do jiného stavu. Neboť předpokládejme, že systém nalézající se v oblasti Λ určuje stejnou vlnovou funkci ψ. Potom pravděpodobnost nalezení částice v oblasti Ω'' je stejná, jako kdyby se částice nalézala v oblasti Ω'. Čili funkce ψ obsahuje veškerou informaci z minulosti, která určuje budoucí chování částice.

Obdobné tvrzení platí i o funkci χ^*.

Nyní můžeme říct, že pravděpodobnost nalezení částice, která je ve stavu ψ, ve stavu χ je

$$\left| \int \chi^*(x, t)\psi(x, t)dx \right|^2 ,$$

což je jedno ze základních tvrzení kvantové mechaniky.

1.5 Schrödingerova rovnice

Nyní ukážeme, že časový vývoj vlnové funkce definovaný v minulé podkapitole splňuje Schrödingerovu rovnici. Tímto dokončíme důkaz ekvivalence Feynmanovy formulace kvantové mechaniky s formulací operátorovou.

Uvažme vlnovou funkci tvaru

$$\psi(x_{k+1}, t+\epsilon) = \frac{1}{A} \int_{\Omega'} \exp\left[\sum_{-\infty}^{k} S(x_{i+1}, x_i)\right] \frac{dx_k}{A} \frac{dx_{k-1}}{A} \cdots ,$$

která je totožná s vlnovou funkcí ψ z minulé podkapitoly až na faktor

$$\frac{1}{A} \exp(\frac{i}{\hbar} S(x_{k+1}, x_k))$$

a integrál přes x_k. Jestliže tuto funkci vyintegrujeme přes všechna x_i taková, že $i < k$, dostaneme

$$\psi(x_{k+1}, t+\epsilon) = \int_{\mathbb{R}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(x_{k+1}, x_k)\right] \psi(x_k, t) \frac{dx_k}{A}.$$

Tato rovnice je v limitě $\epsilon \to 0$ ekvivalentní Schrödingerově rovnici. Za předpokladu, že je tato rovnice platná do prvního řádu v ϵ, ukážeme nyní, že z ní lze odvodit rovnici Schrödingerovu. Toto odvození bude dále provedeno pro případ částice pohybující se v potenciálu $V(x)$.

K tomu musíme nejdříve aproximovat akci $S(x_{i+1}, x_i)$ nacházející se v exponentu integrandu. V našem případě je Lagrangián kvadratický v rychlostech. V kartézských souřadnicích můžeme provést následující přiblížení

$$S(x_{i+1}, x_i) = \epsilon L \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon}, \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \right).$$

My však použijeme jednodušší aproximaci

$$S(x_{i+1}, x_i) = \epsilon L \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon}, x_{i+1} \right).$$

Potom dostáváme

$$S(x_{i+1}, x_i) = \frac{m\epsilon}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon} \right)^2 - \epsilon V(x_{i+1}).$$

Dosazením do vztahu pro vlnovou funkci dostaneme

$$\psi(x_{k+1}, t+\epsilon) = \int_{\mathbb{R}} \exp\left[\frac{i\epsilon}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\epsilon} \right)^2 - V(x_{k+1}) \right\}\right] \psi(x_k, t) \frac{dx_k}{A}.$$

Provedeme přeznačení $x_{k+1} = x$ a $x_{k+1} - x_k = \xi$, čili $x_k = x - \xi$. Potom

$$\psi(x, t+\epsilon) = \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\epsilon\hbar}\right) \cdot \exp\left(\frac{-i\epsilon V(x)}{\hbar}\right) \cdot \psi(x-\xi, t)\frac{d\xi}{A}.$$

Tento integrál bude konvergovat, pokud $\psi(x, t)$ bude dostatečně rychle klesat k nule pro velká x. Navíc k integrálu z funkce $\exp(\frac{im\xi^2}{2\epsilon\hbar})$ budou podle věty o střední fázi [10] přispívat jenom blízká okolí bodu $\xi = 0$, neboť příspěvky od vzdálenějších x se vyruší kvůli rychlým oscilacím funkce. Funkci $\psi(x - \xi, t)$ můžeme rozvést do Taylorova polynomu v blízkém okolí nuly. Dostaneme

$$\begin{aligned}\psi(x, t+\epsilon) &= \exp\left(\frac{-i\epsilon V(x)}{\hbar}\right) \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\epsilon\hbar}\right) \times \\ &\times \left[\psi(x,t) - \xi\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} + \frac{\xi^2}{2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} - \cdots\right]\frac{d\xi}{A}.\end{aligned}$$

Dostáváme sérii gaussovských integrálů, konkrétně:

$$\begin{aligned}&\int_{\mathbb{R}} \exp(im\xi^2/2\epsilon\hbar)d\xi = (2i\pi\epsilon\hbar/m)^{\frac{1}{2}} \\ &\int_{\mathbb{R}} \exp(im\xi^2/2\epsilon\hbar)\xi d\xi = 0 \\ &\int_{\mathbb{R}} \exp(im\xi^2/2\epsilon\hbar)\xi^2 d\xi = (i\epsilon\hbar/m)(2i\pi\epsilon\hbar/m)^{\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

Integrál obsahující ξ^3 je opět 0, integrál obsahující ξ^4 je už příliš vysokého řádu v ϵ, proto ho můžeme zanedbat, atd. Po rozvinutí levé strany do Taylorova polynomu, kde zanedbáme členy řádu vyššího než prvního v ϵ, dostáváme rovnici

$$\begin{aligned}\psi(x,t) + \epsilon\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} &= \exp\left(\frac{-i\epsilon V(x)}{\hbar}\right) \times \\ &\times \frac{(2i\pi\epsilon\hbar/m)^{\frac{1}{2}}}{A}\left[\psi(x,t) + \frac{i\epsilon\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\right].\end{aligned}$$

Po rozvedení exponenciály na pravé straně do Taylorova polynomu dostaneme

$$\psi(x,t) + \epsilon\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{(2i\pi\epsilon\hbar/m)^{\frac{1}{2}}}{A}\left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}V(x)\right)\left(\psi(x,t) + \frac{i\epsilon\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\right).$$

Po roznásobení pravé strany zvolíme

$$A = (2i\pi\epsilon\hbar/m)^{\frac{1}{2}},$$

aby se na obou stranách vyrušily členy $\psi(x,t)$ nultého řádu v ϵ. Potom zanedbáním členů řádu vyššího než prvního v ϵ, vydělením ϵ a vynásobením faktorem $i\hbar$ dostáváme Schrödingerovu rovnici pro částici pohybující se v potenciálu $V(x)$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\psi + V(x)\cdot\psi.$$

Všechna předchozí odvození jsme čistě z praktických důvodů dělali pro jednorozměrný systém. V předchozích úvahách by však nenastal žádný problém, kdybychom místo systému s jedním stupněm volnosti uvažovali systém s r stupni volnosti. Výsledky pro zobecněný vícerozměrný systém uvedeme v následující podkapitole.

1.6 Operátorový přístup ke křivkovému integrálu

Uvažujme tedyb r-dimenzionální konfigurační prostor systému s Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x).$$

Evoluční operátor tohoto systému je

$$\hat{U}(t_f;t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot(t_f-t_0)\right).$$

Předpokládáme, že Hamiltonián $\hat{H}$ je „v podstatě samosdružený“ [11]. Dále předpokládáme, že se $\hat{H}$ dá rozložit na součet dvou samosdružených operátorů, na Hamiltonián volné částice $\hat{H}_0$ a operátor násobení potenciálem $\hat{V}(x)$. Čili dostáváme $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$. Známe vyjádření časového vývoje pro oba tyto samosdružené operátory. Užitím Trotterovy formule [10] dostáváme vztah

$$\hat{U}(t) = \lim_{n\to\infty}(e^{-i\frac{t}{n}\hat{H}_0}e^{-i\frac{t}{n}\hat{V}})^n,$$

kde limita je chápána ve smyslu silné konvergence. Vztah pro evoluční operátor můžeme přepsat

$$\begin{aligned}\hat{U}(t_f;t_0) &= \left(\exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\frac{t_f-t_0}{n})\right)^n = \\ &= \left(\exp(-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\frac{t_f-t_0}{n})\cdot\exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{V}(x)\frac{t_f-t_0}{n})\right)^n + \hat{O}(\frac{1}{n}),\end{aligned}$$

kde posloupnost operátorů $\hat{O}(\frac{1}{n})$ pro n jdoucí do nekonečna konverguje k nulovému operátoru, pro vysoká n je tedy můžeme zanedbat.

Jádro evolučního operátoru má význam amplitudy pravděpodobnosti přechodu systému z čistého stavu $|x_0\rangle$ do stavu $|x_f\rangle$.

V následujícím uvažujme velmi velká n, abychom mohli operátor zbytku $\hat{O}(\frac{1}{n})$ považovat za nulový. Jestliže $(n-1)$-krát vložíme úplný systém vlastních stavů operátoru polohy

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \qquad \int d^r x|x\rangle\langle x| = 1, \qquad \langle x|y\rangle = \delta^{(r)}(x-y),$$

dostaneme pro jádro evolučního operátoru v souřadnicové reprezentaci

$$\begin{aligned}
&K(x_f, t_f; x_0, t_0) = \langle x_f, t_f|x_0, t_0\rangle = \langle x_f|U(t_f;t_0)|x_0\rangle = \\
&= \langle x_f|e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\frac{t_f-t_0}{n}\cdot n}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}(x)\frac{t_f-t_0}{n}\cdot n}|x_0\rangle = \\
&= \int d^r x_1 d^r x_2 \dots d^r x_{n-1}\langle x_f|e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\frac{t_f-t_0}{n}-\frac{i}{\hbar}\hat{V}(x)\frac{t_f-t_0}{n}}|x_{n-1}\rangle\dots \\
&\dots\langle x_1|e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\frac{t_f-t_0}{n}-\frac{i}{\hbar}\hat{V}(x)\frac{t_f-t_0}{n}}|x_0\rangle,
\end{aligned}$$

Vložme úplný systém vlastních vektorů operátoru hybnosti

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \qquad \int d^r p|p\rangle\langle p| = 1, \qquad \langle x|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{r/2}}\exp{(\frac{i}{\hbar}p\cdot x)}.$$

Dostaneme

$$\begin{aligned}
&\langle x_j|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\frac{t_f-t_0}{n} - \frac{i}{\hbar}\hat{V}(x)\frac{t_f-t_0}{n}\right)|x_{j-1}\rangle = \\
&= \int d^r p_j \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\frac{p_j^2}{2m} + V(x_{j-1}))\frac{t_f-t_0}{n}\right)\langle x_j|p_j\rangle\langle p_j|x_{j-1}\rangle = \\
&= \int \frac{d^r p_j}{(2\pi\hbar)^r}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_j\cdot(x_j - x_{j-1}) - \frac{i}{\hbar}(\frac{p_j^2}{2m} + V(x_{j-1}))\frac{t_f-t_0}{n}\right).
\end{aligned}$$

Celkem tedy pro jádro evolučního operátoru dostáváme

$$\begin{aligned}
K(x_f, t_f;, x_0, t_0) \quad = \quad & \lim_{n\to\infty}\int\frac{d^r p_n}{(2\pi\hbar)^r}\left(\prod_{j=1}^{n-1}\frac{d^r p_j d^r x_j}{(2\pi\hbar)^r}\right)\times \\
& \times\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{n}(p_j\cdot(x_j - x_{j-1}) - (\frac{p_j^2}{2m} + V(x_{j-1}))\frac{t_f-t_0}{n})\right),
\end{aligned}$$

kde jsme označili $x_n = x_f$ a limita je stále ve smyslu silné konvergence. Toto je další z mnoha definic Feynmanova integrálu. Užíváme pro ni značení

$$K(x_f, t_f; x_0, t_0) = \int\limits_{x(0)=x_0}^{x(t_f)=x_f} e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f}(p\cdot\dot{x}-H)dt}\mathcal{D}x(t)\mathcal{D}p(t).$$

Gaussovské integrály vyskytující se v této definici Feynmanova integrálu lze ještě upravit

$$\begin{aligned}
&\int \frac{d^r p_j}{(2\pi\hbar)^r}\exp\left(\frac{i}{\hbar}(-\frac{p_j^2}{2m}\frac{t_f-t_0}{n} + p_j\cdot(x_j - x_{j-1}))\right) = \\
&= \left(\frac{nm}{2i\pi\hbar(t_f-t_0)}\right)^{r/2}\exp\left(\frac{i}{\hbar}m(x_j-x_{j-1})^2\frac{n}{2(t_f-t_0)}\right).
\end{aligned}$$

Dosazením těchto výrazů pro $j = 1, 2, \ldots, n$ dostaneme pro jádro evolučního operátoru vztah

$$\begin{aligned}
K(x_f, t_f; x_0, t_0) &= \lim_{n\to\infty}\left(\frac{nm}{2\pi i\hbar(t_f-t_0)}\right)^{nr/2}\int\prod_{j=1}^{n-1} d^r x_j \times \\
&\times \exp\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{n}\left(m(x_j-x_{j-1})^2\frac{n}{2(t_f-t_0)} - V(x_{j-1})\frac{t_f-t_0}{n}\right).
\end{aligned}$$

Toto je podobná definice Feynmanova integrálu, s jakou jsme se setkali v podkapitole 1.5. V tomto případě pro pohyb mezi body x_{i-1} a x_i využíváme vlastně aproximaci $x = x_{i-1},\ \dot{x} = (x_i - x_{i-1})/\epsilon$, kde $\epsilon = (t_f - t_0)/n$. Všimněme si ještě faktoru před integrálem, který je očividně pro $r = 1$ totožný s A^{-n} z podkapitoly 1.5. Jak už bylo uvedeno v podkapitole 1.3, pro takovýto dráhový integrál používáme značení

$$K(x_f, t_f; x_0, t_0) = \int_{x_0}^{x_f}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_f} dt(m\frac{\dot{x}(t)^2}{2} - V(x(t)))\right)\mathcal{D}x(t).$$

V operátorovém přístupu jsme se za pomoci Trotterovy formule dopracovali ke stejným výsledkům jako pomocí Feynmanových úvah. Vidíme tedy opět, že Feynmanovy úvahy při zavádění dráhovéhol integrálu byly naprosto správné. Feynmanova formulace je skutečně ekvivalentní tradiční formulaci kvantové mechaniky.

Kapitola 2

Kvantová mechanika na Hilbertových prostorech konečné dimenze

Proces kanonického kvantování systému s n stupni volnosti začíná přiřazením samosdružených operátorů $\hat{Q}_i, \hat{P}_j$ kanonickým pozorovatelným $q_i,\ p_j,\ i,\ j\ =\ 1,\ 2,\ \ldots,\ n$. Na tyto operátory je však naložena zvláštní podmínka, která je kvantově mechanickou analogií fundamentálních Poissonových závorek. Musí splňovat tzv. *Heisenbergovy komutační relace:*

$$\begin{aligned} \left[\hat{Q}_i, \hat{P}_j\right] &= \hat{Q}_i\hat{P}_j - \hat{P}_j\hat{Q}_i = i\hbar\delta_{ij}\hat{I}, \\ \left[\hat{Q}_i, \hat{Q}_j\right] &= \hat{Q}_i\hat{Q}_j - \hat{Q}_j\hat{Q}_i = \hat{0}, \\ \left[\hat{P}_i, \hat{P}_j\right] &= \hat{P}_i\hat{P}_j - \hat{P}_j\hat{P}_i = \hat{0}. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Reprezentace (2.1) samosdruženými operátory na separabilním Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ definuje kvantovou kinematiku. Následně specifikací Hamiltoniánu $\hat{H} = \hat{H}(\hat{Q}, \hat{P})$ jako generátoru jednoparametrické grupy unitárních evolučních oprátorů

$$\hat{U}(t) = \exp(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}), \quad t \in \mathbb{R}$$

a jeho reprezentací na $\mathcal{H}$ můžeme definovat kvantovou dynamiku.

Z platnosti *Heisenbergových komutačních relací* už ale nutně plyne, že $\mathcal{H}$ je nekonečnědimenzionální. Uvažme totiž maticovou reprezentaci (2.1) na Hilbertově prostoru konečné dimenze N, potom jistě nemůže být splněn vztah

$$[Q_i, P_j] = Q_iP_j - P_jQ_i = i\hbar\delta_{ij}I,$$

neboť si stačí uvědomit, že

$$\mathbf{Tr}(Q_iP_j - P_jQ_i) = 0 \neq i\hbar\mathbf{Tr}(I). \tag{2.2}$$

Jestliže tedy chceme definovat kvantovou mechaniku na N-dimenzionálním Hilbertově prostoru, je nutné použít nějaké zobecnění. Užitečný model pro kvantovou mechaniku na Hilbertově prostoru konečné dimenze N byl zaveden Weylem [13] a dále rozvinut v [3].

2.1 Model diskrétního konfiguračního prostoru

Pro odvození modelu využijeme modelu použitého v [3]. Jako konfigurační prostor uvažujme konečnou množinu $\mathcal{M}$ obsahující N prvků. Pro formulaci kvantové mechaniky potřebujeme vybudovat zvláštní strukturu nad $\mathcal{M}$, která by nám poskytla pozorovatelné hybnosti. Za tímto účelem vybavíme množinu $\mathcal{M}$ strukturou Abelovské grupy $G = (\mathcal{M}, \sigma)$, kde operace grupového násobení je definována

$$\sigma : G \times G \to G : (\rho, j) \to \rho + j(modN).$$

Přirozená akce G na $\mathcal{M}$ definovaná pomocí grupového násobení nám umoží vybudovat kvantovou mechaniku nad $\mathcal{M}$. Navíc díky následujícímu teorému stačí uvažovat pouze cyklické grupy.

Věta 1. Každá konečná Abelovská grupa je izomorfní direktnímu součinu konečného počtu cyklických grup $Z_{m_1} \times Z_{m_2} \times \cdots \times Z_{m_r}$, kde $m_1, m_2, \ldots, m_r$ jsou přirozená čísla různá od jedničky a současně každé z nich je mocninou nějakého prvočísla ($m_i = n_i^{a_i}$, kde $n_i,\ i = 1, \ldots, r$ nemusí být vzájemně různá).

Nadále tedy uvažujme pouze *cyklické grupy*. Navíc budeme používat zjednodušené značení pro grupové násobení $\sigma(\rho, j) \equiv \rho \cdot j$. Nechť konfigurační prostor $\mathcal{M}$ je konečná množina

$$\mathcal{M} = Z_N = \{j | j = 0, 1, \ldots, N-1\}.$$

Protože akce Z_N na sebe prostřednictvím sčítání modulo N je tranzitivní, je $\mathcal{M}$ homogenním prostorem G

$$G = Z_N = \{\rho | \rho = 0, 1, \ldots, N-1\}.$$

Množina $G_m = \{\rho \cdot m | \rho \in G\}$ se nazývá G-orbita bodu $m \in \mathcal{M}$. Protože G působí na $\mathcal{M}$ tranzitivně, existuje zde jen jedna orbita. Dostáváme, že

$$\forall m \in \mathcal{M} \quad G_m = \{\rho \cdot m | \rho \in G\} = \mathcal{M}.$$

Množina $H = \{h \in G | h \cdot m = m\}$ se nazývá stacionární podgrupa bodu $m \in \mathcal{M}$. V našem případě obsahuje jenom bod $0 \in G$ pro každé $m \in \mathcal{M}$, tedy $H = \{0\}$. H je navíc normální podgrupa grupy G

$$\rho h \rho^{-1} \in H \quad \forall \rho \in G, h \in H.$$

Nyní můžeme zavést ekvivalenci na G:

$$g_1 \sim g_2 \Leftrightarrow \exists h \in H \quad g_2 = g_1 \cdot h,$$

což je ekvivalentní následujícímu:

$$g_1 \sim g_2 \Leftrightarrow g_2 \in g_1 \cdot H.$$

Dostáváme faktorgrupu $G/H = \{gH | g \in G\}$ obsahující levé třídy ekvivalence $g \cdot H$. Ale protože $H = \{0\}$, je $G/H = \{g \cdot 0 | g \in G\} = \mathcal{M}$. Čili konfigurační prostor $\mathcal{M}$ můžeme ztotožnit s G/H.

2.1.1 Systémy imprimitivity

Definice 1. Nechť G je grupa symetrie prostoru X vybaveného σ-algebrou $\mathcal{B}(\mathrm{X})$ borelovských množin. Dvojici (U, E), kde U je unitární reprezentace grupy G a E je projektorová míra na G-prostoru X, se nazývá *systém imprimitivity grupy G*, jestliže platí

$$E(g \cdot S) = U(g)E(S)U(g)^{-1} \quad \forall g \in G, \forall S \in \mathcal{B}(M). \tag{2.3}$$

Dva systémy imprimitivity jsou ekvivalentní, jesliže odpovídající reprezentace jsou ekvivalentní a projektorové míry jsou si rovny.

2.1.2 Kvantová mechanika na $\mathcal{M} = \mathrm{G/H}$

Kvantová mechanika na lokálně kompaktním prostoru $\mathcal{M} = G/H$ je podle Mackeyho určena tranzitivním systémem imprimitivity (U, E) pro G působící na $\mathcal{M}$ (viz [19]). Pro konečnou množinu se navíc vztah (2.3) zjednodušuje na

$$U(j)E(\rho)U(j)^{-1} = E(\rho - j(modN)), \tag{2.4}$$

kde $\rho \in \mathcal{M}, j \in G$ a $E(S) = \sum_{\rho \in S} E(\rho)$. Kanonickou konstrukcí tohoto systému imprimitivity a použitím věty (The Imprimitivity Theorem [19]) získáme následující výsledky [3]:

Jestliže (U, E) působí ireducibilně na $\mathcal{H}$, potom až na unitární ekvivalence existuje pouze jeden systém imprimitivity, kde

1. $\mathcal{H}$ je Hilbertův prostor dimenze N se skalárním součinem

$$(\varphi, \psi) = \sum_{\rho=0}^{N-1} \bar{\varphi}_\rho \psi_\rho,$$

kde φ_ρ, ψ_ρ, $\rho = 0, 1, \ldots, N-1$ označují ρ-tou komponentu vektorů φ, ψ ve standardní bázi.

2. U je indukovaná reprezentace zvaná pravá regulární reprezentace

$$[U(j)\psi]_\rho = \psi_{\rho+j(modN)} \quad \text{pro } j \in G.$$

Maticová forma U ve standardní bázi je

$$(U(j))_{\rho\sigma} = \delta_{\rho+j(modN),\sigma}.$$

3. $[E(\rho)\psi]_\sigma = \delta_{\rho\sigma}\psi_\rho$ tj. $(E(\rho))_{\sigma\tau} = \delta_{\sigma\rho}\delta_{\tau\rho}$ pro $\rho \in \mathcal{M}$.

2.1.3 Fyzikální interpretace

Tento systém imprimitivity má jednoduchou geometrickou interpretaci. Operátory $E(\rho)$ jsou projektory na vlastní vektory polohy $|\rho\rangle$ odpovídající poloze $\rho = 0, 1, \ldots, N-1$. Současně ale množina $|\mathit{0}\rangle, |\mathit{1}\rangle, \ldots, |N-\mathit{1}\rangle$ je standardní báze Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$. Potom pro částici v normalizovaném stavu $|\psi\rangle$ je pravděpodobnost jejího nalezení v poloze ρ rovna

$$\langle\psi|E(\rho)|\psi\rangle = |\psi_\rho|^2,$$

kde ψ_ρ je ρ-tá komponenta vektoru $|\psi\rangle$ ve standartní bázi. Dále unitární operátory $U(j)$ působí jako operátory posunutí

$$U(j)|\rho\rangle = |\rho - j(modN)\rangle$$

a dále platí, že $U(j) = U(1)^j$, kde $U(1)$ v souřadnicové reprezentaci má tvar

$$U(1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

2.1.4 Souřadnicová a hybnostní reprezentace

Dosud jsme se pohybovali v souřadnicové reprezentaci. Pomocí diskrétní Fourierovy transformace na prostoru Z_N, která je analogií Fourierovy transformace na $\mathbb{R}$, můžeme přejít do reprezentace hybnostní:

$$|k\rangle = \sum_{\rho=0}^{N-1} |\rho\rangle\langle\rho|k\rangle.$$

Diskrétní Fourierova transformace má v maticové formě tvar unitární Sylvestrovy matice S_N, jejíž prvky jsou až na multiplikativní konstantu $1/\sqrt{N}$ shodné s s prvky Vandermondovy matice,

$$(S_N)_{\rho k} = \langle\rho|k\rangle = \frac{\omega_N^{\rho k}}{\sqrt{N}};$$

zde ω_N je N-tá odmocnina z jednotky, tj. $\omega_N = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right)$ a $|k\rangle$ je vlastní stav hybnosti – vlastní stav operátoru $U(j)$. Diskrétní Fourierova transformace diagonalizuje operátor $U(1)$:

$$U'(1) = S_N^{-1}U(1)S_N = diag(1, \omega_N, \omega_N^2, \ldots, \omega_N^{N-1}).$$

Čili dostáváme, že

$$U'(j) = S_N^{-1}U(j)S_N = U'(1)^j. \tag{2.5}$$

Vlastní vektory operátoru $U(j)$, $j = 0, 1, \ldots, N-1$, odpovídající vlastním hodnotám $\{\omega_N^{jk}\}$, $k = 0, 1, \ldots, N-1$, mají v souřadnicové reprezentaci tvar

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\left(1, \omega_N^k, \ldots, \omega^{(N-1)k}\right).$$

Operátory $F(k) : |\psi\rangle \to |k\rangle\langle k|\psi\rangle$ jsou spektrální projektory operátoru $U(j)$, čili

$$U(j) = \sum_{k=0}^{N-1} \omega_N^{jk} F(k).$$

Na systém spektrálních operátorů $F'(k) = S_N^{-1}F(k)S_N$ můžeme nahlížet jako na projektory náležející komplementárnímu systému imprimitivity nad hybnostmi. Předpokládáme-li totiž, že $\mathcal{M} = Z_N$ působí na $G = Z_N$ akcí

$$\mathcal{M} \times G \to G : (j, \rho) \to \rho - j(modN),$$

potom existuje opět právě jeden systém imprimitivity (V, F) grupy $\mathcal{M}$, až na unitární ekvivalence. V hybnostní reprezentaci pro něj platí následující vztahy

$$(F'(j))_{kl} = \delta_{kj}\delta_{lj} \quad V'(\sigma) = V'(1)^{\sigma} \quad V'(1) = U(1)^{-1}$$

a navíc

$$V(\sigma) = S_N V'(\sigma) S_N^{-1} = \sum_{\rho=0}^{N-1} \omega_N^{\sigma\rho} E(\rho). \tag{2.6}$$

Čili obdrželi jsme dvě reprezentace, mezi nimiž existuje přechod pomocí diskrétní Fourierovy transformace. Weylovu formu kanonických komutačních relací

$$e^{isP} e^{itQ} - e^{ist} e^{itQ} e^{isP} = 0$$

můžeme nyní nahradit Weylovým systémem (U, V), jako analogií spojitého případu, splňujícím

$$U(j)V(\sigma) = \omega_N^{j\sigma} V(\sigma)U(j).$$

V následujícím budeme pro zjednodušení používat značení

$$P_N := U(1), \quad Q_N := V(1).$$

2.2 Shrnutí dosavadních výsledků

Jak už jsme uvedli výše, jako konfigurační prostor uvažujeme cyklickou grupu

$$Z_N = \{0, 1, \ldots, N-1\}.$$

Potom prostor stavů nad konfiguračním prostorem Z_N je N-dimenzionální Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ s ortonormální bází

$$B = \{|\mathit{0}\rangle, |\mathit{1}\rangle \ldots |N - \mathit{1}\rangle\}.$$

Prvku $\rho \in Z_N$ odpovídá stav $|\rho\rangle \in B$.

Přirozená akce Z_N na Z_N je definována jako sčítání modulo N. Ta je reprezentována unitárními operátory $U(k) = P_N^k$, jejichž akce na vektory $|\rho\rangle$ z báze B je dána vztahem

$$U(k)|\rho\rangle = P_N^k|\rho\rangle = |\rho - k(modN)\rangle.$$

Na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ je definovaná dvojice Weylových unitárních operátorů

Q_N, P_N vztahy

$$Q_N|\rho\rangle = \omega_N^\rho|\rho\rangle, \tag{2.7}$$
$$P_N|\rho\rangle = |\rho - \mathit{1}(modN)\rangle. \tag{2.8}$$

V bázi B, čili v souřadnicové reprezentaci, jsou operátory P_N a Q_N reprezentovány maticemi

$$Q_N = diag(1, \omega_N, \omega_N^2, \ldots, \omega_N^{N-1})$$

a

$$P_N = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Tyto operátory splňují

$$P_N Q_N = \omega_N Q_N P_N \tag{2.9}$$

a

$$\omega_N P_N = P_N \omega_N, \quad \omega_N Q_N = Q_N \omega_N, \quad P_N^N = Q_N^N = I_N, \quad \omega_N^N = 1, \tag{2.10}$$

kde I_N je jednotková matice typu $N \times N$. Diskrétní Fourierova transformace diagonalizuje operátor P_N

$$S_N^{-1} P_N S_N = Q_N. \tag{2.11}$$

2.3 Konečný kvantový fázový prostor

V této podkapitole rozebereme úzký vztah mezi *konečným fázovým prostorem*

$$\Gamma_N := Z_N \times Z_N$$

a konečnou Heisenbergovou grupou Π_N.

Definice 2. Konečná grupa generovaná operátory ω_N, Q_N, P_N skládající se z N^3 prvků

$$\Pi_N = \{\omega_N^l Q_N^i P_N^j | l, i, j = 0, 1, 2, \ldots, N-1\} \tag{2.12}$$

se nazývá *konečná Heisenbergova grupa* nebo též *Pauliho grupa*.

Množina N^2 unitárních matic $\{Q_N^i P_N^j | i, j = 0, 1, 2, \ldots, N-1\}$ tvoří, jak je ukázáno v [15], bázi Hilbertova prostoru všech komplexních $N \times N$ matic. Prvky báze jsou ortogonální ve smyslu vnitřního součinu

$$Tr((Q_N^a P_N^b)(Q_N^c P_N^d)) = N\delta_{ac}\delta_{bd} \quad \forall a,b,c,d \in Z_N.$$

Centrum Heisenbergovy grupy $Z(\Pi_N)$ je množina takových prvků z Π_N, které komutují se všemi prvky Π_N

$$Z(\Pi_N) = \{\omega_N^l Q_N^0 P_N^0 | l = 0,1,\ldots,N-1\} = \{\omega_N^l | l = 0,1,\ldots,N-1\}$$

Protože centrum každé grupy je normální podgrupa, můžeme přejít k faktorové grupě $\Pi_N/Z(\Pi_N)$. Třídy $\Pi_N/Z(\Pi_N)$ označme jako Q^iP^j, $i,j = 0,1,\ldots,N-1$. Protože existuje izomorfismus Φ mezi $\Pi_N/Z(\Pi_N)$ a $\Gamma_N = Z_N \times Z_N$

$$\Phi : \Pi_N/Z(\Pi_N) \mapsto \Gamma_N : Q^iP^j \mapsto (i,j)$$

můžeme faktorovou grupu ztotožnit s fázovým prostorem

$$\Pi_N/Z(\Pi_N) = \Gamma_N.$$

Přesvědčme se ještě, že Φ je opravdu homomorfismus:

$$\begin{aligned}&\Phi\left((Q^iP^j)\left(Q^{i'}P^{j'}\right)\right) = \Phi\left(Q^{i+i'}P^{j+j'}\right) = (i+i', j+j') = (i,j) + (i',j') = \\ &= \Phi\left(Q^iP^j\right) + \Phi\left(Q^{i'}P^{j'}\right).\end{aligned}$$

O izomorfismus se jedná zřejmě z toho důvodu, že jádrem Φ je třída $Q^0P^0 = Z(\Pi_N)$. Díky tomuto ztotožnění můžeme nyní značit prvky (i,j) fázového prostoru Γ_N jako Q^iP^j, kde

$$Q^iP^j = \{\omega_N^l Q_N^i P_N^j | l = 0,1,\ldots,N-1\}.$$

Zaměřme se nyní na grupu automorfismů fázového prostoru Γ_N. V [14] byly místo faktorových tříd a jejich automorfismů studovány 1-dimenzionální podprostory Pauliho gradace Lieovské algebry $gl(N,\mathbb{C})$ a jejich automorfismy. Podgrupa vnitřních automorfismů byla indukována akcí

$$\Psi_X(A) = X^{-1}AX, \quad X \in GL(N,\mathbb{C}). \tag{2.13}$$

Stejně se budeme i my zabývat vnitřními automorfismy typu (2.13) působícími na prvky Π_N. Operátory X indukující tyto automorfismy jsou unitární. Vnitřní automorfismy jsou ekvivalentní, jestliže definují stejné transformace rozkladových tříd

$\Pi_N/Z(\Pi_N)$:

$$\psi_X \sim \psi_Y \Longleftrightarrow X^{-1}Q^iP^jX = Y^{-1}Q^iP^jY \quad \forall (i,j) \in Z_N \times Z_N.$$

Protože faktorgrupa $\Pi_N/Z(\Pi_N)$ má jenom dva generátory P_N a Q_N, stačí se zaměřit jenom na automorfismy tříd Q a P. Pro každý automorfismus ψ_X musí existovat $a, b, c, d \in Z_N$ taková, že

$$X^{-1}QX = Q^aP^b \quad \text{a} \quad X^{-1}PX = Q^cP^d.$$

Tedy každé třídě ekvivalentních vnitřních automorfismů je přiřazena čtveřice (a, b, c, d) prvků Z_N. V [14] bylo dokázáno následující velmi užitečné tvrzení.

Věta 2. Existuje izomorfismus Φ mezi množinou tříd ekvivalence vnitřních automorfismů ψ_X a grupou $SL(2, Z_N)$ matic 2×2 s determinantem rovným 1 modulo N,

$$\Phi(\psi_X) = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad a, b, c, d \in Z_N.$$

Akce těchto automorfismů na $\Pi_N/Z(\Pi_N)$ je dána pravou akcí $SL(2, Z_N)$ na fázovém prostoru $\Gamma_N = Z_N \times Z_N$

$$(i', j') = (i, j) \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

Zmiňme ještě lemma, které využijeme až v poslední kapitole.

Lemma 1. Pravá akce $\mathrm{SL}(2, Z_N)$ na fázovém prostoru $Z_N \times Z_N$ nezmění determinant matice složené z komponent dvou vektorů ze $Z_N \times Z_N$.

Důkaz. Uvažme dva vektory (i, j) a (k, l) ze $Z_N \times Z_N$ a matici $\begin{pmatrix} i & j \\ k & l \end{pmatrix}$. Akce $A \in \mathrm{SL}(2, Z_N)$ je dána $(i', j') = (i, j)A$ a $(k', l') = (k, l)A$. Pro determinat platí $\det A = 1$. Potom

$$\det \begin{pmatrix} i' & j' \\ k' & l' \end{pmatrix} = \det \left(\begin{pmatrix} i & j \\ k & l \end{pmatrix} A \right) = \det \begin{pmatrix} i & j \\ k & l \end{pmatrix} \det A = \det \begin{pmatrix} i & j \\ k & l \end{pmatrix}.$$

□

Kapitola 3

Konečněrozměrný analog volné částice

3.1 Operátory polohy a hybnosti

Ve spojitém případě, jestliže dvě jednoparametrické grupy $U(t)$ a $V(s)$ splňují vztah

$$U(t)V(s) = e^{ist}V(s)U(t)$$

a další podmínky jako diferencovatelnost v nule, potom jejich generátory určené Stoneovou větou, vyhovují kanonickým komutačním relacím.

V analogii se spojitým případem definujeme operátory polohy q a hybnosti p jako

$$U(k) = \exp(i\frac{2\pi}{N}kp) \quad V(\sigma) = \exp(i\frac{2\pi}{N}\sigma q)$$

v souřadnicové reprezentaci.

Spektrální rozklad V (2.6) ukazuje, že vlastní hodnoty q musí být $q_\rho = \rho(modN)$, takže operátor q můžeme zvolit jako

$$q = diag(0, 1, \dots, N-1). \tag{3.1}$$

Podobně vztah (2.5) udává, že vlastní hodnoty p' musí být $p'_j = j(modN)$. Opět volíme, že

$$p' = S_N^{-1} p S_N = diag(0, 1, \dots, N-1). \tag{3.2}$$

V souřadnicové reprezentaci má operátor p tvar

$$(p)_{\rho\sigma} = \begin{cases} \frac{N-1}{2} & \rho = \sigma, \\ \\ \frac{1}{\omega_N^{\rho-\sigma}-1} & \rho \neq \sigma. \end{cases}$$

3.2 Evoluční operátory

Časový vývoj kvantového systému je určen silně spojitou jednoparametrickou grupou operátorů $\hat{L}(t)|t \in \mathbb{R}$ na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$. Vzhledem ke Stoneovu teorému existuje právě jeden samosdružený operátor $\hat{H}$ takový, že

$$\hat{L}(t) = \exp(-i\frac{t}{\hbar}(\hat{H} + \hat{V})), \quad t \in \mathbb{R}, \tag{3.3}$$

kde $\hat{V}$ je operátor násobení reálnou konstantou V.

V N-dimenzionálním Hilbertově prostoru mohou být Hamiltonovské časové vývoje kompletně klasifikovány, protože každý z nich odpovídá jednoparametrické podgrupě grupy $U(N)$. Každá taková podgrupa je generována hermitovskou maticí, která je až na unitární podobnostní transformace určena N reálnými vlastními hodnotami

$$E_0, E_1, \ldots, E_{N-1} \in \sigma(H).$$

Čili obecný tvar evolučního operátoru je

$$L(t) = Ye^{-i\frac{t}{\hbar}(H_0 + VI_N)}Y^{-1}, \tag{3.4}$$

kde I_N je jednotková matice řádu N, $Y \in U(N)$ a $H_0 = diag(E_0, E_1, \ldots, E_{N-1})$.

3.3 Časový vývoj volné kvantové částice

V této podkapitole se budeme zabývat analogií volné kvantové částice na konfiguračním prostoru Z_N.

Hamiltonián volné částice na $\mathbb{R}$ má tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

Dosazením tohoto Hamiltoniánu do vztahu pro evoluční operátor (3.3) dostáváme

$$\hat{L}(t) = \exp(-i\frac{t}{\hbar}(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V})) \quad t \in \mathbb{R}. \tag{3.5}$$

Jak jsme odvodili na začátku této kapitoly, operátor hybnosti má v N-dimenzionálním Hilbertově prostoru tvar

$$p|k\rangle = k|k\rangle,$$

kde $|k\rangle$ je vlastní vektor odpovídající hybnosti k. Předpokládejme, že vztah (3.5) popisuje časový vývoj i na N-dimenzionálním Hilbertově prostoru. Dosazením (3.2) operátoru hybnosti do evolučního operátoru dostáváme

$$L(t)|k\rangle = e^{-i\frac{t}{\hbar}(\frac{k^2}{2m}+V)}|k\rangle \quad t \in \mathbb{R}.$$

Tento časový vývoj má několik zajímavých vlastností:

1. Jestliže omezíme konstantu V na hodnoty $V = \frac{1}{2m}\xi$, kde $\xi \in \mathbb{Z}$, dostaneme $L(t)$ periodickou s periodou $\tau = 4\pi\hbar m$. Čili dostáváme

$$L(\tau)\psi = \psi \quad \forall\psi \in \mathcal{H}.$$

2. Namísto spojitého časového parametru $t \in \mathbb{R}$ zavedeme také diskretizaci v čase. Zvolíme velikost jednoho kroku časového vývoje jako $\frac{\tau}{N} = \frac{4\pi\hbar m}{N}$. Potom získáváme hodnoty diskrétního času $t_s = \frac{\tau}{N}s$, $s \in \mathbb{Z}$. Vývoj se po každých N krocích opakuje. Zavedeme operátor $T(s)$ vztahem

$$T(s) = L(t_s) = e^{-i\frac{2\pi}{N}s(k^2+\xi I_N)}$$

3. Zobrazení $s \to T(s)$ je unitární reprezentace Z_N, protože

$$T(s) = T(1)^s, s = 1, 2, \ldots, N-1, \quad T(1)^N = T(0) = 1.$$

4. Pro matici diskrétního časového vývoje $T(s)$ v souřadnicové reprezentaci dostáváme

$$\begin{aligned} T(s)_{\rho\sigma} &= \langle\rho|T(s)|\sigma\rangle = \langle\rho|j\rangle\langle j|T(s)|k\rangle\langle k|\sigma\rangle = \\ &= \sum_{j=0}^{N-1} e^{-\frac{2\pi i}{N}s(k^2+\xi)}(S_N)_{\rho j}\delta_{jk}(S_N^{-1})_{k\sigma} = \\ &= \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} e^{-\frac{2\pi i}{N}s(k^2+\xi)}e^{\frac{2\pi i}{N}(\rho k - k\sigma)} = \\ &= \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} \omega_N^{-[(k^2+\xi)s+(\sigma-\rho)k]}, \end{aligned}$$

kde opět ω_N je N-tá odmocnina z jednotky.

5. Schrödingerova rovnice pro volnou částici pohybující se v diskrétním čase přejde na tvar diferenční rovnice

$$\psi(s+1) - \psi(s) = (T(1) - 1)\,\psi(s).$$

Zavedeme operátor C_N vztahem $T(1) = \omega_N^{-\xi} C_N$. V hybnostní reprezentaci nabývá diagonálního tvaru

$$\langle j|C_N|k\rangle = \omega_N^{-k^2}\delta_{jk}. \tag{3.6}$$

V souřadnicové reprezentaci dostáváme

$$(C_N)_{\rho\sigma} = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-k^2+(\rho-\sigma)k}. \tag{3.7}$$

Tvrzení 1. Operátor C_N splňuje následující komutační vztahy

$$P_N C_N = C_N Q_N, \quad Q_N C_N = \omega_N^{-1} P_N^2 C_N Q_N.$$

Důkaz. Dokážeme rovnost maticových elementů. Poznamenejme ještě, že číslování maticových elementů probíhá od nuly do $N-1$, tj. elementy libovolné matice A typu $N \times N$ označujeme

$$A_{\rho\sigma}, \quad \text{kde } \rho = 0, 1, \ldots, N-1, \sigma = 0, 1, \ldots, N-1.$$

$$(P_N C_N)_{\rho\sigma} = (P_N)_{\rho\alpha}(C_N)_{\alpha\sigma} = \delta_{\rho,\alpha-1}\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-k^2+(\alpha-\sigma)k} = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-k^2+(\rho+1-\sigma)k}$$

$$(C_N P_N)_{\rho\sigma} = (C_N)_{\rho\alpha}(P_N)_{\alpha\sigma} = \delta_{\alpha,\sigma-1}\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-k^2+(\rho-\alpha)k} = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-k^2+(\rho+1-\sigma)k}$$

Tedy opravdu platí rovnost $P_N C_N = C_N P_N$. Nyní dokažme ještě druhý komutační vztah:

$$\begin{aligned}
(Q_N C_N)_{\rho\sigma} &= (Q_N)_{\rho\alpha}(C_N)_{\alpha\sigma} = \omega_N^{\rho}\delta_{\rho\alpha}\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-k^2+(\alpha-\sigma)k} = \\
&= \frac{1}{N}\omega_N^{\rho}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-k^2+(\rho-\sigma)k} = \frac{1}{N}\omega_N^{\rho}\sum_{k=0}^{N-1}e^{\pi i(-2k^2+2(\rho-\sigma)k)/N} = \\
&= \frac{1}{N}\omega_N^{\rho}\sqrt{\frac{N}{2}}e^{-\pi i(2N-4(\rho-\sigma)^2)/8N}\sum_{n=0}^{N-1}e^{\pi i(Nn^2+2(\rho-\sigma)n)/2} = \\
&= \sqrt{\frac{1}{2N}}e^{-\pi i/4}\omega_N^{\rho}e^{\pi i\frac{(\rho-\sigma)^2}{2N}}\left[1 + e^{\pi i(\frac{N}{2}+(\rho-\sigma))}\right]
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
(P_N^2 C_N Q_N)_{\rho\sigma} &= (P_N^2 C_N)_{\rho\alpha}(Q_N)_{\alpha\sigma} = \frac{1}{N}\omega_N^{\sigma}\delta_{\alpha\sigma}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-k^2+(\rho-\alpha+2)k} = \\
&= \frac{1}{N}\omega_N^{\sigma}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-k^2+(\rho-\sigma+2)k} = \frac{1}{N}\omega_N^{\sigma}\sum_{k=0}^{N-1}e^{\pi i(-2k^2+2(\rho-\sigma+2)k)/N} = \\
&= \frac{1}{N}\omega_N^{\sigma}\sqrt{\frac{N}{2}}e^{-\pi i(2N-4(\rho-\sigma+2)^2)/8N}\sum_{n=0}^{N-1}e^{\pi i(Nn^2+2(\rho-\sigma+2)n)/2} = \\
&= \sqrt{\frac{1}{2N}}e^{-\pi i/4}\omega_N^{\sigma}e^{\pi i\frac{(\rho-\sigma+2)^2}{2N}}\left[1+e^{\pi i(\frac{N}{2}+(\rho-\sigma+2))}\right] = \\
&= \sqrt{\frac{1}{2N}}e^{-\pi i/4}e^{\pi i\frac{2}{N}\sigma}e^{\pi i(\frac{(\rho-\sigma)^2}{2N}+\frac{2}{N}(\rho-\sigma)+\frac{2}{N})}\left[1+e^{\pi i(\frac{N}{2}+(\rho-\sigma))}\right] = \\
&= \sqrt{\frac{1}{2N}}e^{-\pi i/4}\omega_N^{\rho+1}e^{\pi i\frac{(\rho-\sigma)^2}{2N}}\left[1+e^{\pi i(\frac{N}{2}+(\rho-\sigma))}\right]
\end{aligned}
$$

Zde jsme dvakrát využili Siegelovu formuli reciprocity (viz Příloha A). Tedy opravdu platí vztah

$$Q_N C_N = \omega_N^{-1} P_N^2 C_N Q_N.$$

□

Pomocí matematické indukce můžeme tyto vztahy zobecnit na

$$P_N^j C_N^s = C_N^s P_N^j, \quad Q_N^{\rho} C_N^s = \omega_N^{-\rho^2 s} P_N^{2\rho s} C_N^s Q_N^{\rho}$$

pro libovolná $j, s, \rho \in \mathbb{N}$. Za pomoci vztahu

$$P_N Q_N = \omega_N Q_N P_N$$

můžeme ještě komutační vztahy přepsat do tvaru

$$C_N^{-1} P_N C_N = P_N, \quad C_N^{-1} Q_N C_N = \omega_N Q_N P_N^2,$$

odkud vidíme, že C_N indukuje vnitřní automorfismus fázového prostoru. Provede následující přiřazení

$$P \mapsto P, \quad Q \mapsto QP^2.$$

Nejjednodušší geometrická interpretace konečněrozměrné kvantové kinematiky je představa, že konečný diskrétní konfigurační prostor je tvořen konečným uzavřeným řetízkem. Konečněrozměrný analog volné částice jsme definovali jako diskrétní galileovskou evoluci podél tohoto řetízku popsanou operátorem C_N, který působí jako jednokrokový operátor časového vývoje, tj. poskytuje vývoj systému pouze o jeden krok diskrétního času $\frac{4\pi\hbar m}{N}$.

3.4 Modifikace operátoru časového vývoje $\mathrm{C_N}$

V článku [4] byl však tento operátor drobně opraven z důvodu, že vnitřní automorfismus fázového prostoru Γ_N indukovaný operátorem C_N přiřazuje prvku $(1,0)$ fázového prostoru prvek $(1,2)$. Přirozenější však je, aby prvku $(1,0)$ přiřadil prvek $(1,1)$. Jako vysvětlení vezměme příklad časového vývoje na fázovém prostoru $\mathbb{R}^2$ popsaného translací podél souřadnicové osy q s konstantní rychlostí

$$q(t) = q(0) + \frac{p(0)}{m}t, \quad p(t) = p(0).$$

Provedeme tedy úpravu, aby v analogii k uvedenému časovému vývoji vnitřní automorfismus fázového prostoru Γ_N provedl přiřazení

$$Q \mapsto QP \quad P \mapsto P.$$

To je ale podle Věty 2 ekvivalentní $SL(2,\mathbb{Z}_N)$ transformaci fázového prostoru

$$(1,1) = (1,0)\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (0,1) = (0,1)\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Takovýto automorfismus fázového prostoru je indukován zobrazením

$$C_{N1}|k\rangle = \omega_N^{-\frac{1}{2}k^2}|k\rangle,$$

kde opět $|k\rangle$ značí vlastní vektor hybnosti. Tento operátor splňuje komutační vztahy

$$\begin{aligned} C_{N1}^{-1}Q_N C_{N1} &= \omega_N^{\frac{1}{2}} Q_N P_N, \\ C_{N1}^{-1}P_N C_{N1} &= P_N, \\ C_{N1}^{-1}Q_N^{\rho} P_N^{j} C_{N1} &= \omega_N^{\frac{1}{2}\rho^2 s} Q_N^{\rho} P_N^{\rho s + j}. \end{aligned}$$

Důkaz by se provedl stejně jako v Tvrzenín 1.

Kapitola 4

N $\times$ N aproximace jednorozměrných kvantových systémů

V této kapitole chceme na kvantovou mechaniku na reálné ose použít $N \times N$ aproximaci. Čili pokusíme se nahradit operátory na $L^2(\mathbb{R}, dq)$ maticemi $N \times N$ odvozenými pro konečnědimenzionální kvantovou mechaniku, tedy operátory na prostoru $l^2(Z_N)$.

V podkapitole 3.1 jsme odvodili, že operátor polohy v konečněrozměrné kvantové mechanice nabývá v souřadnicové reprezentaci podobu multiplikativního operátoru

$$q|\rho\rangle = \rho|\rho\rangle.$$

To samé platí pro operátor hybnosti vyjádřený v hybnostní reprezentaci

$$p|k\rangle = k|k\rangle.$$

Těmto operátorům na řetízku chceme přiřadit matice řádu N, které budou aproximovat kvantovou mechaniku na reálné ose. K tomu zavedeme pomocný faktor

$$\eta_N = \sqrt{\frac{2\pi}{N}}.$$

Dále zavedeme jednotku délky a a jí odpovídající jednotku hybnosti $\hbar/a$. Zavedení těchto dvou jednotek bude obzvláště výhodné při aproximaci Feynmanova integrálu. Faktor η_N jsme zavedli po vzoru Husstada [17], který se inspiroval nápadem Schwingera [16]. Schwinger ztotožnil Z_N s mřížkou na reálné ose. Pro lichá N definoval v Z_N posloupnost mřížek

$$L_N = \{a\eta_N\rho | \rho = -(N-1)/2, \ldots, -2, -1, 0, 1, 2, \ldots, (N-1)/2\}.$$

Tato posloupnost mřížek je velmi zajímavá z toho důvodu, že v limitě $N \to \infty$ se mřížky roztahují po celé reálné ose a zároveň se body na nich zahušťují. Odpovídající aproximace operátorů polohy a hybnosti zavedeme novým způsobem:

$$q_N|\rho\rangle = a\eta_N \rho|\rho\rangle, \tag{4.1}$$

$$p_N|k\rangle = \frac{\hbar}{a}\eta_N k|k\rangle. \tag{4.2}$$

Zobrazeni $\mathcal{I}$ definované jako

$$\mathcal{I} : l^2(Z_N) \mapsto L^2(\mathbb{R}, dq) : |\rho\rangle \mapsto \phi_\rho(q) = a^{-\frac{1}{2}}\eta_N^{-\frac{1}{2}}\chi_{[a\eta_N(\rho-\frac{1}{2}), a\eta_N(\rho+\frac{1}{2})]}(q), \tag{4.3}$$

kde χ_S je charakteristická funkce množiny $S \subset \mathbb{R}$. Toto zobrazení slouží jako izometrické vnoření Hilbertova prostoru $l^2(Z_N)$ do Hilbertova prostoru $L^2(\mathbb{R}, dq)$. Vlastní vektory polohy $|\rho\rangle$ takto zobrazíme na úzké normalizované vlnové funkce $\phi_\rho(q)$ na reálné ose vystředované okolo bodů mřížky. Tyto funkce se v limitě $N \to \infty$ zužují. Vektor $|\psi\rangle = \sum_\rho \psi_\rho|\rho\rangle$ se při zobrazení $\mathcal{I}$ zobrazí na $(\mathcal{I}\psi)(q) = \sum_\rho \psi_\rho \phi_\rho(q)$. Dostáváme vztah mezi normalizacemi vektorů $|\psi\rangle$ a $(\mathcal{I}\psi)(q)$

$$|\psi_\rho|^2 = a\eta_N|(\mathcal{I}\psi)(a\eta_N\rho)|^2.$$

4.1 Souvislost s modifikací operátoru diskrétního časového vývoje $\mathrm{C_N}$

Jednoparametrická grupa evolučních operátorů volné částice hmoty m ve spojitém fázovém prostoru je zřejmě

$$\hat{L}(t) = \exp{(-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}t)}, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Její $N \times N$ aproximace má tvar

$$T(s) = \exp{(-\frac{i}{\hbar}\frac{p_N^2}{2m}s\epsilon)}, \quad s \in \mathbb{Z},$$

kde zavádíme diskretizaci v čase pomocí jednotky času ϵ. Tedy čas t je omezen pouze na celočíselné násobky ϵ. Dosadíme-li za operátor p_N ze vztahu (4.2), obdržíme

$$T(s)|j\rangle = \exp{(-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{a}\eta_N j)^2 s\epsilon)}|j\rangle, \quad s \in \mathbb{Z}.$$

Jestliže zvolíme velikost časové jednotky v souladu s fyzikální představou

$$\epsilon = \frac{ma^2}{\hbar} \quad \text{nebo} \quad m\frac{a}{\epsilon} = \frac{\hbar}{a},$$

dostaneme

$$T(s)|j\rangle = \omega_N^{-\frac{1}{2}j^2 s}|j\rangle, \quad s \in \mathbb{Z},$$

což pro $s = 1$ přesně odpovídá opravě operátoru C_N

$$C_{N1}|j\rangle = T(1)|j\rangle = \omega_N^{-\frac{1}{2}j^2}.$$

Čili úpravy provedené na operátoru diskrétního časového vývoje byly naprosto v souladu s fyzikální intuicí. Dokonce právě naopak, tato fyzikální intuice nás přivádí k tvaru operátoru C_{N1}.

Kapitola 5

$\mathrm{N} \times \mathrm{N}$ aproximace Feynmanova integrálu a emergence Lagrangiánu v kvantové mechanice

Uvažujme jednorozměrný systém s Hamiltoniánem H, např. částici na přímce. Nechť $|q_0, t_0\rangle$ označuje počáteční stav částice v čase t_0 a $|q_f, t_f\rangle$ konečný stav částice v čase t_f. Evoluční amplitudu budeme počítat pomocí Feynmanova integrálu

$$\langle q_f, t_f | q_0, t_0 \rangle = \int e^{\frac{i}{\hbar} S[q]} \mathcal{D}q(t).$$

Pro tento účel se zavádí diskretizace v čase. Zde za jednotku času pokládáme $\epsilon = (t_f - t_0)/n$. Potom pro amplitudu časové evoluce dostaneme

$$\begin{aligned} \langle q_f, t_f | q_0, t_0 \rangle &= \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \langle q_f | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon} | q_{n-1} \rangle \dots \langle q_1 | e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon} | q_0 \rangle dq_{n-1} \dots dq_1, \end{aligned}$$

kde $q_l = q(l\epsilon)$. Každý faktor v integrálu, propagátor pro krátký časový úsek ϵ, nazvěmě ho *elementární propagátor (short-time propagator)*, lze identifikovat s exponenciálou akce počítané na tomto krátkém časovém úseku, která již zahrnuje vhodnou aproximaci Lagrangiánu, tj.

$$\langle q_{i+1} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon} | q_i \rangle = \frac{1}{A} e^{\frac{i}{\hbar} L(q_{j+1}, q_j)\epsilon}.$$

Takto se objevuje (emerge) Lagrangián v kvantové mechanice.

Jako příklad předpokládejme nerelativisticku částici hmotnosti m s Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(q).$$

Potom pro jednotlivé elementární propagátory dostaneme

$$\begin{aligned}
\langle q_{j+1}|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}|q_j\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}(\frac{p_j^2}{2m}+V(q_j))}\langle q_{j+1}|p_j\rangle\langle p_j|q_j\rangle dp_j = \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{i\epsilon}{\hbar}(p_j\frac{q_{j+1}-q_j}{\epsilon} - \frac{p_j^2}{2m} - V(q_j))\right) dp_j = \\
&= \left(\frac{2\pi i\epsilon\hbar}{m}\right)^{-1/2} \exp\left(\frac{i\epsilon}{\hbar}(\frac{m}{2}(\frac{q_{j+1}-q_j}{\epsilon})^2) - V(q_j)\right). \qquad (5.1)
\end{aligned}$$

Pro tento případ tedy získáváme výsledky:

$$L(q_{j+1}, q_j) = \frac{m}{2}\left(\frac{q_{j+1}-q_j}{\epsilon}\right)^2 - V(q_j) \quad \text{a} \quad A = \left(\frac{2\pi i\epsilon\hbar}{m}\right)^{1/2}.$$

5.1 N × N aproximace Feynmanova integrálu

Nyní se pokusíme aplikovat $N \times N$ aproximaci na Feynmanův integrál. Budeme opět uvažovat volnou nerelativistickou částici, využijeme operátoru časového vývoje C_{N1} odvozeného v kapitole 3. Víme, že vlastní hodnoty polohy jsou $q_j = a\eta_N\rho_j$. Pomocí zobrazení (4.3) vnoříme vlastní funkce odpovídající vlastním hodnotám polohy do Hilbertova prostoru $L^2(\mathbb{R}, dq)$, zde tyto vlastní funkce označíme jako $|q_j\rangle$. Potom bude platit

$$\begin{aligned}
&\langle q_{j+1}, \epsilon|q_j, 0\rangle = \langle q_{j+1}|e^{-\frac{i}{\hbar}H\epsilon}|q_j\rangle = \\
&= \frac{1}{a\eta_N}\langle\rho_{j+1}|C_{N1}|\rho_j\rangle = \frac{1}{a\eta_N}\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-\frac{1}{2}k^2+(\rho_{j+1}-\rho_j)k}
\end{aligned}$$

Pro τ časových kroků dostáváme

$$\begin{aligned}
\langle\rho_\tau, \tau\epsilon|\rho_0, 0\rangle &= \langle\rho\tau|C_{N1}^\tau|\rho_0\rangle = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-\frac{1}{2}k^2\tau+(\rho_\tau-\rho_0)k} = \\
&= \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} e^{\pi i(-j^2\frac{\tau}{N}+j\frac{2}{N}(\rho_\tau-\rho_0))}.
\end{aligned}$$

Mírně modifikujeme výsledek pro $\tau = 1$ na tvar

$$\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-\frac{1}{2}k(k-1)+(\rho_{j+1}-\rho_j)k},$$

což není nic jiného než zápis následujícího operátoru v souřadnicové reprezentaci

$$C_{N2}|k\rangle = \omega_N^{-\frac{1}{2}k(k-1)}|k\rangle,$$

kde $|k\rangle$ je vlastní vektor hybnosti.

Použitím Siegelovy formule pro gaussovské sumy (viz Příloha A), v níž položíme $a = -1, b = 1 + 2\rho$, kde $\rho = \rho_{j+1} - \rho_j$, $c = N$, N sudé, $n = k$, získáme výsledek

$$\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\omega_N^{-\frac{1}{2}k(k-1)+(\rho_{j+1}-\rho_j)k} = \frac{1}{\sqrt{iN}}\omega_N^{\frac{1}{2}(\rho_{j+1}-\rho_j+\frac{1}{2})^2}.$$

Tento modifikovaný operátor splňuje jednodušší komutační relace než operátor C_{N1}

$$\begin{aligned} P_N C_{N2} &= C_{N2} P_N \\ Q_N C_{N2} &= C_{N2} Q_N P_N \\ Q_N^\rho P_N^j C_{N2}^s &= C_{N2}^s Q_N^\rho P_N^{\rho s+j}. \end{aligned}$$

Podle Siegelovy formule má C_{N2} v souřadnicové reprezentaci tvar

$$\langle\rho_{j+1}|C_{N2}|\rho_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{iN}}\omega_N^{\frac{1}{2}(\rho_{j+1}-\rho_j+\frac{1}{2})^2}. \tag{5.2}$$

5.2 Emergence Lagrangiánu v kvantové mechanice

Vztah (5.2) lze interpretovat jako *emergenci bezrozměrného Lagrangiánu* $\mathcal{L}_N$,

$$\langle\rho_{j+1}|C_{N2}|\rho_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{iN}}\omega_N^{\mathcal{L}_N(q_{j+1},q_j)}, \quad \mathcal{L}_N = \frac{1}{2}(\rho_{j+1}-\rho_j+\frac{1}{2})^2.$$

Jestliže využijeme vztah z podkapitoly 4.1 pro velikost časového kroku

$$\epsilon = \frac{ma^2}{\hbar},$$

dostaneme pro vývoj ve spojitém prostoročase:

$$\langle q_{j+1}, \epsilon | q_j, 0\rangle = \frac{1}{a\eta_N}\langle \rho_{j+1}|C_{N2}|\rho_j\rangle =$$
$$= \frac{1}{a\eta_N}\frac{1}{\sqrt{iN}}\omega_N^{\frac{1}{2}(\rho_{j+1}-\rho_j+\frac{1}{2})^2} = (\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m})^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}m(\frac{q_{j+1}-q_j+\frac{a\eta_N}{2}}{\epsilon})^2\epsilon}.$$

To můžeme ještě přepsat do tvaru

$$\frac{1}{\sqrt{iN}}\omega_N^{\mathcal{L}_N(\rho_{j+1},\rho_j)} = (\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m})^{-\frac{1}{2}}\omega_N^{\frac{i}{\hbar}L_N(q_{j+1},q_j)\epsilon} a\eta_N.$$

Předchozí můžeme interpretovet jako *emergenci lokálního Lagrangiánu*

$$L_N = \frac{1}{2}m(\frac{q_{j+1} - q_j + \frac{a\eta_N}{2}}{\epsilon})^2.$$

V limitě $N \to \infty$ je $\eta_N = \sqrt{2\pi/N} \to 0$ a lokální Lagrangián L_N přechází do obvyklé podoby pro volnou nerelativistickou částici a tedy i celý elementární propagátor přechází do obvyklé podoby.

Na závěr spočítejme propagátor pro nerelativistickou částici pohybující se v potenciálu $V(q)$. Propagátor je určen rovnicí (5.1). Jestliže chceme získat jeho $N \times N$ aproximaci, musíme určit potenciál $V(q)$ v bodech $q_j = a\eta_N\rho_j$, $\rho_j = -(N-1)/2, \ldots, (N-1)/2$. Jestliže chceme transformovat $V(q_j)$ do bezrozměrného tvaru, měl by být vyjádřen v jednotkách

$$\frac{1}{m}(\eta_N\frac{\hbar}{a})^2 = \frac{2\pi}{N}\frac{\hbar}{\epsilon},$$

které převedly kinetickou energii na tvar $k^2/2$. Tedy

$$V(q_j) = V(a\eta_N\rho_j) = \frac{2\pi}{N}\frac{\hbar}{\epsilon}w_j.$$

Nyní je potenciál reprezentován N bezrozměrnými konstantami w_j. Pro propagátor dostáváme

$$\langle q_{j+1,\epsilon}|q_j, 0\rangle = \frac{1}{a\eta_N}\langle\rho_{j+1}|C_{N2}\omega_N^{-w_j}|\rho_j\rangle =$$
$$= \frac{1}{a\eta_N}\frac{1}{\sqrt{iN}}\omega_N^{\frac{1}{2}(\rho_{j+1}-\rho_j+\frac{1}{2})^2 - w_j} =$$
$$= (\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m})^{-\frac{1}{2}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}[\frac{1}{2}m(\frac{q_{j+1} - q_j + \frac{a\eta_N}{2}}{\epsilon})^2 + V(q_j)]\epsilon\right).$$

Kapitola 6

Elementární kroky časového vývoje a vzájemně komplementární báze

Definice 3. Dvě pozorovatelné A a B kvantového systému s Hilbertovým prostorem konečné dimenze N nazveme *komplementární*, jestliže jsou jejich vlastní hodnoty nedegenerované a každé dva vlastní vektory $|u_i\rangle \in \sigma(A)$ a $|v_j\rangle \in \sigma(B)$ spňují

$$|\langle u_i|v_j\rangle| = \frac{1}{\sqrt{N}}. \tag{6.1}$$

Jestliže se systém nachází ve vlastním stavu $|u_i\rangle \in \sigma(A)$, potom všechny vlastní hodnoty $b_1, \ldots, b_N$ operátoru B budou měřeny se stejnou pravděpodobností a naopak.

Definice 4. Nechť $\{|u_i\rangle | i = 1, 2, \ldots, N\}$ a $\{|v_j\rangle | j = 1, 2, \ldots, N\}$ jsou ortonormální báze N-dimenzionálního komplexního Hilbertova prostoru. Řekneme, že jsou *vzájemně komplementární (mutually unbiased)*, jestliže platí

$$|\langle u_i|v_j\rangle| = \frac{1}{\sqrt{N}} \quad \forall i \in \{1, 2. \ldots, N\}, \forall j \in \{1, 2, \ldots, N\}. \tag{6.2}$$

Mezi pojmy komplementarita a vzájemně komplementární báze tedy existuje velmi úzký vztah.

V [18] bylo dokázáno velmi zajímavé tvrzení týkající se maximálního počtu vzájemně komplementárních bází.

Věta 3. V N-dimenzionálním Hilbertově prostoru nemůže existovat více než $N + 1$ vzájemně komplementárních bází.

Nyní vyvstává otázka, zda a za jakých okolností je možné dosáhnout maximálního počtu vzájemně komplementárních bází. V [18] byla jejich existence dokázána pro N mocninu prvočísla.

Odvození tvaru vzájemně komplementárních bází pro N prvočíslo bylo dáno v článku [20], kde byla dokázána věta:

Věta 4. Nechť N je prvočíslo. Potom báze tvořené vlastními vektory $N+1$ operátorů

$$Q_N, P_N, P_N Q_N, \dots, P_N Q_N^{N-1}$$

jsou po dvou vzájemně komplementární a tvoří proto maximální množinu vzájemně komplementárních bází.

Tuto větu v průběhu této kapitoly také dokážeme.

6.1 Konstrukce maximální množiny vzájemně komplementárních bází pro N prvočíslo

Konečný kvantový fázový prostor $\Gamma_N = Z_N \times Z_N$ a jeho automorfismy tvaru (2.13) vytváří algebraickou strukturu, která umožňuje dokázat existenci $N+1$ vzájemně komplementárních bází pro Hilbertův prostor prvočíselné dimenze N. Důležitou roli hraje Věta 2. Klíčovým okamžikem konstrukce je fakt, že pro N prvočíslo je množina Z_N tělesem, tj. množina $Z_N^* = Z_N \backslash \{0\}$ je multiplikativní grupa s násobením modulo N.

Konečný fázový prostor Γ_N lze rozložit do tříd ekvivalence $[(i,j)]$ pomocí následující relace ekvivalence: $(i,j) \sim (i',j')$, jestliže existuje $r \in Z_N^*$ takové, že $(i',j') = (ri, rj)$. Násobení je samozřejmě myšleno modulo N.

Pro N prvočíslo má pravá akce SL$(2, Z_N)$ na fázový prostor Γ_N dvě orbity. Jednou je bod $\{(0,0)\}$ a druhou je $\mathcal{O}_N = Z_N \times Z_N \backslash \{(0,0)\}$.

Orbitu $\mathcal{O}_N$ lze rozložit do $N+1$ rozkladových tříd $[(1,0)]$ a $[(i,1)]$, kde $i = 0, 1, \dots, N-1$. Každý prvek orbity $\mathcal{O}_N$ bude jistě zařazen do nějaké rozkladové třídy. Prvky typu $(i,0), i = 1, \dots, N-1$ spadnou do rozkladové třídy $[(1,0)]$, prvky $(0,i), i = 1. \dots, N-1$ do rozkladové třídy $(0,1)$. Prvky typu $(i,j), i,j = 1, \dots, N-1$ budou přiřazeny do rozkladové třídy $[(k,1)]$, kde $k \in \{1, 2, \dots, N-1\}$ je řešením rovnice $kj = i(\mathrm{mod} N)$. Existence a jednoznačnost takového k je zaručena tím, že pro N prvočíslo tvoří Z_N těleso.

Každý prvek (i,j) fázového prostoru Γ_N odpovídá třídě $Q^i P^j$ (viz podkapitola 2.3). Prvky třídy $Q^i P^j$ se vzájemně liší pouze o násobky komplexních čísel. Každý násobek (ri, rj) prvku (i,j), $r = 1, \dots, N-1$ odpovídá třídě $Q^{ri} P^{rj}$. Kvůli vztahu

$$P_N Q_N = \omega_N Q_N P_N$$

patří operátory $(Q^i P^j)^r$ a $Q^{ri} P^{rj}$ do stejné třídy. Důležitým důsledkem je, že prvky (ri, rj), $r = 1, \dots, N-1$, odpovídají komutujícím operátorům se stejnými vlastními vektory. Předchozí můžeme shrnout do lemmatu:

Lemma 2. Jestliže N je prvočíslo, potom existuje právě $N+1$ rozkladových tříd orbity $\mathcal{O}_N = Z_N \times Z_N \backslash \{(0,0)\}$, každá obsahuje $N-1$ prvků. Prvky stejné třídy odpovídají komutujícím operátorům se stejnými vlastními vektory.

Proces konstrukce vzájemně komplementárních bází vrcholí následující větou dokázanou v [5].

Věta 5. Nechť N je prvočíslo a nechť (a,b) a (c,d) jsou dva prvky orbity $\mathcal{O}_N = Z_N \times Z_N \backslash \{(0,0)\}$ příslušející různým rozkladovým třídám $[(a,b)] \neq [(c,d)]$. Potom báze složené z vlastních vektorů odpovídajících tříd $Q^a P^b$ a $Q^c P^d$ jsou vzájemně komplementární.

Důkaz. Nejdříve dokážeme, že báze tvořené vlastními vektory operátorů P_N a Q_N jsou vzájemně komplementární. Ze vztahu

$$S_N^{-1} P_N S_N = Q_N$$

plyne

$$P_N S_N |\rho\rangle = S_N Q_N |\rho\rangle = \omega_N^{\rho} S_N |\rho\rangle,$$

kde $|\rho\rangle$ je vlastní vektor operátoru Q_N a tudíž $S_N|\rho\rangle$ je vlastní vektor operátoru P_N. Víme, že

$$\langle\sigma|S_N|\rho\rangle = \frac{\omega_N^{\sigma\rho}}{\sqrt{N}}.$$

Pro absolutní hodnotu skalárního součinu $|\sigma\rangle$ a $S_N|\rho\rangle$ potom platí

$$|(|\sigma\rangle, S_N|\rho\rangle)| = |\langle\sigma|S_N|\rho\rangle| = \left|\frac{\omega_N^{\sigma\rho}}{\sqrt{N}}\right| = \frac{1}{\sqrt{N}}. \tag{6.3}$$

Tedy báze tvořené vlastními vektory operátorů odpovídajících rozkladovým třídám $[(1,0)]$ a $[(0,1)]$ jsou vzájemně komplementární, protože jsou tvořeny vlastními vektory operátorů Q_N a P_N.

Nyní uvažujme dva různé prvky orbity $\mathcal{O}_N$. Díky rozdělení do tříd stačí uvažovat prvky $(a,1)$ a $(b,1)$ pro $a,b \in \{1,2,\ldots,N-1\}$, $a \neq b$. Ukážeme, že báze tvořené vlastními vektory operátorů $Q_N^a P_N$ a $Q_N^b P_N$ jsou vzájemně komplementární. Víme, že to samé bude platit i pro mocniny těchto operátorů. Podle Věty 2 je unitárnímu automorfismu X, který permutuje třídy ekvivalence Heisenbergovy grupy

$$X^{-1} Q^i P^j X = Q^{i'} P^{j'},$$

přiřazena matice z $\mathrm{SL}(2, Z_N)$. Naopak matici z $\mathrm{SL}(2, Z_N)$ je přiřazena třída ekvivalentních unitárních operátorů, které indukují stejné permutace tříd ekvivalence Heisenbergovy grupy.

Ukážeme, že jestliže je $a \neq b$, potom existuje matice $A \in \mathrm{SL}(2, Z_N)$ taková, že

$$(a,1)A = (\tilde{a}, 0) \quad (b,1)A = (0, \tilde{b}).$$

Jestliže najdeme takovouto matici, pak existuje unitární operátor X takový, že

$$X^{-1}Q^a P X = Q^{\tilde{a}}, \quad X^{-1}Q^b P X = P^{\tilde{b}}.$$

Potom budeme moci vyjádřit vlastní vektory $Q^a P$ resp. $Q^b P$ jako $X|\sigma\rangle$ resp. $X S_N|\rho\rangle$. Podle (6.3) bude potom platit

$$|(X|\sigma\rangle, X S_N|\rho\rangle)| = |(|\sigma\rangle, S_N|\rho\rangle)| = \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

Tedy tyto báze budou vzájemně komplementární.

Pro důkaz existence a jednoznačnosti matice $A \in \mathrm{SL}(2, Z_N)$ využijeme Lemma 1, čímž získáme

$$\det \begin{pmatrix} a & 1 \\ b & 1 \end{pmatrix} = a - b \,(\mathrm{mod} N) = \det \begin{pmatrix} \tilde{a} & 0 \\ 0 & \tilde{b} \end{pmatrix} = \tilde{a}\tilde{b} \,(\mathrm{mod} N)$$

Ekvivalentně hledáme matici $C = A^{-1} \in \mathrm{SL}(2, Z_N)$ pro inverzní transformaci

$$(\tilde{a}, 0)C = (\tilde{a}, 0) \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} = (a, 1),$$
$$(0, \tilde{b})C = (0, \tilde{b}) \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} = (b, 1).$$

Dostaneme systém rovnic pro prvky matice C

$$\tilde{a}\beta = 1 \,(\mathrm{mod} N), \tag{6.4}$$
$$\tilde{a}\alpha = a \,(\mathrm{mod} N), \tag{6.5}$$
$$\tilde{b}\gamma = b \,(\mathrm{mod} N), \tag{6.6}$$
$$\tilde{b}\delta = 1 \,(\mathrm{mod} N). \tag{6.7}$$

Protože Z_N je těleso pro N prvočíslo, má každá z těchto rovnic právě jedno řešení v Z_N. Nyní zbývá ověřit, zda matice C náleží $\mathrm{SL}(2, Z_N)$. Vynásobením rovnic (6.5) a (6.7) a odečtením součinu rovnic (6.4) a (6.6) dostaneme

$$\tilde{a}\tilde{b}(\alpha\delta - \beta\gamma) = a - b \,(\mathrm{mod} N).$$

Protože $\tilde{a}\tilde{b} = a - b$ (mod$N$), dostáváme

$$\det C = \alpha\delta - \beta\gamma = 1 \ (\mathrm{mod} N).$$

Tedy C opravdu náleží SL$(2, Z_N)$. Inverzní matice $A = C^{-1} = \begin{pmatrix} \delta & -\beta \\ -\gamma & \alpha \end{pmatrix}$ potom provádí transformaci

$$(a,1)C^{-1} = (\tilde{a}, 0), \quad (b,1)C^{-1} = (0, \tilde{b}).$$

Pro dokončení důkazu zbývá ukázat existenci a jednoznačnost matic z SL$(2, Z_N)$ pro páry $(b,1)$, $(1,0)$ a $(b,1)$, $(0,1)$, $b = 1, 2, \ldots, N-1$. Snadno lze ověřit, že existují jednoznačně určené matice z SL$(2, Z_N)$ takové, že

$$(b,1)A_1(b) = (0,1), \quad (1,0)A_1(b) = (1,0) \Longrightarrow A_1(b) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -b & 1 \end{pmatrix}$$

a

$$(b,1)A_2(b) = (b,0), \quad (0,1)A_2(b) = (0,1) \Longrightarrow A_2(b) = \begin{pmatrix} 1 & b^{-1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Odtud plyne, že báze tvořené vlastními vektory operátorů Q^bP, Q resp. Q^bP, P jsou vzájemně komplementární.

□

Našli jsme tedy $N+1$ vzájemně komplementárních bází v Hilbertově prostoru prvočíselné dimenze N. Tyto báze jsou tvořeny vlastními vektory $N+1$ operátorů

$$Q_N, P_N, Q_N P_N, Q_N^2 P_N, \ldots, Q_N^{N-1} P_N. \tag{6.8}$$

Tímto jsme také dokázali Větu 4, neboť k operátorům v ní uvedeným lze snadno přejít pomocí vztahu

$$P_N Q_N = \omega_N Q_N P_N.$$

Uvedeme ještě postup, jak z kanonické báze $\mathcal{B}$ zkonstruovat všechny tyto vzájemně komplementární báze. Označme báze tvořené vlastními vektory operátorů (6.8) jako

$$\mathcal{B} = \mathcal{B}_{(1,0)}, \mathcal{B}_{(0,1)}, \mathcal{B}_{(1,1)}, \mathcal{B}_{(2,1)}, \ldots, \mathcal{B}_{(N-1,1)}.$$

Nechť $|\rho\rangle$, $\rho = 0, 1, \ldots, N-1$ je vlastní vektor operátoru Q_N, potom v důsledku vztahu

$$S_N^{-1} P_N S_N = Q_N$$

platí

$$P_N S_N|\rho\rangle = S_N Q_N|\rho\rangle = \omega_N^j S_N|\rho\rangle.$$

Tedy $S_N|\rho\rangle$, $\rho = 0, 1, \ldots, N-1$ je vlastním vektorem operátoru P_N, tj. přechod od báze $\mathcal{B}_{(1,0)}$ k bázi $\mathcal{B}_{(0,1)}$ je implementován unitárním operátorem S_N. Nyní chceme určit matici z SL$(2, Z_N)$, která by odpovídala trynsformaci $\mathcal{B}_{(0,1)} \to \mathcal{B}_{(1,1)}$ a současně ponechávala $\mathcal{B}_{(1,0)}$ neměnnou. Takovou maticí očividně je

$$A_1(-1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathrm{SL}(2, Z_N).$$

Jako unitární transformace, která odpovídá matici $A_1(-1)$, může být vzata transformace D_N převzatá z [14], která splňuje

$$D_N^{-1} Q_N D_N = Q_N, \quad D_N^{-1} P_N D_N = \varepsilon_N^{-1} Q_N P_N. \tag{6.9}$$

$$D_N = \mathrm{diag}(d_0, d_1, \ldots, d_{N-1}),$$

kde $d_j = \varepsilon_N^{-1} \omega_N^{\binom{j}{2}}$, $\varepsilon_N = 1$, když N je liché, $\varepsilon_N = \sqrt{\omega_N}$, když N je sudé. Jestliže $|k\rangle$ je vlastní vektor operátoru P_N, potom díky (6.9) dostaneme

$$\varepsilon_N^{-1} Q_N P_N D_N^{-1}|k\rangle = D_N^{-1} P_N|k\rangle = \omega_N^k D_N^{-1}|k\rangle,$$

tj. vektor $D_N^{-1}|k\rangle$ je vlastním vektorem operátoru $Q_N P_N$. Od báze $\mathcal{B}_{(0,1)}$ přejdeme k bázi $\mathcal{B}_{(1,1)}$ pomocí operátoru D_N^{-1}. Iterace tohoto operátoru vygenerují všechny další báze. Dostáváme posloupnost zobrazení

$$\mathcal{B}_{(1,0)} \xrightarrow{S_N} \mathcal{B}_{(0,1)} \xrightarrow{D_N^{-1}} \mathcal{B}_{(1,1)} \xrightarrow{D_N^{-1}} \mathcal{B}_{(2,1)} \xrightarrow{D_N^{-1}} \cdots \xrightarrow{D_N^{-1}} \mathcal{B}_{(N-1,1)}.$$

Složený operátor $D_N^{-b} S_N$, $b = 0, 1, \ldots, N-1$, vytvoří z kanonické báze všechny ostatní.

6.2 Souvislost s elementárními kroky časového vývoje

Uvědomme si, že orbitu $\mathcal{O}_N = Z_N \times Z_N \backslash \{0\}$, kde N je prvočíslo, jsme namísto rozkladových tříd $(a, 1)$, $a = 1, 2, \ldots, N-1$, mohli rozkládat do tříd $(1, a)$. Potom by vzájemně komplementární báze byly tvořeny vlastními vektory operátorů

$$Q_N, P_N, Q_N P_N, Q_N P_N^2, \ldots, Q_N P_N^{N-1}.$$

Konstrukce těchto bází by proběhla stejně jako v minulé podkapitole. Zde však místo operátoru D_N použijeme operátor elementárního časového vývoje C_{N2}, který splňuje

$$C_{N2}^{-1} Q_N C_{N2} = Q_N P_N, \quad C_{N2}^{-1} P_N C_{N2} = P_N.$$

Pro $|\rho\rangle$ vlastní vektor operátoru Q_N dostaneme

$$Q_N P_N C_{N2}^{-1} |\rho\rangle = C_{N2}^{-1} Q_N |\rho\rangle = \omega_N^k C_{N2}^{-1} |\rho\rangle,$$

tj. vektor $C_{N2}^{-1}|\rho\rangle$ je vlastním vektorem operátoru $Q_N P_N$. Dostaneme posloupnost bází

$$\mathcal{B}_{(0,1)} \stackrel{S_N^{-1}}{\rightarrow} \mathcal{B}_{(1,0)} \stackrel{C_{N2}^{-1}}{\rightarrow} \mathcal{B}_{(1,1)} \stackrel{C_{N2}^{-1}}{\rightarrow} \mathcal{B}_{(1,2)} \stackrel{C_{N2}^{-1}}{\rightarrow} \cdots \stackrel{C_{N2}^{-1}}{\rightarrow} \mathcal{B}_{(1,N-1)}.$$

Složený operátor $C_{N2}^{-b} S_N^{-1}$, $b = 0, 1, \ldots, N-1$, vytvoří z báze operátoru P_N zbylých N bází.

Příloha A

Důležité vzorce

Při odvozeních jsme používali několik důležitých vzorců

1. Vzorec pro gaussovské integrály

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-ax^2 + bx\right) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right)$$

2. Siegelova formule reciprocity pro zobecněné gaussovské sumy [21],[22]

$$\sum_{n=0}^{|c|-1} e^{\pi i(an^2+bn)/c} = \sqrt{|\frac{c}{a}|} e^{\pi i(|ac|-b^2)/(4ac)} \sum_{n=0}^{|a|-1} e^{-\pi i(cn^2+bn)/a},$$

   kde $a, b, c \in \mathbb{Z}, ac \neq 0, ac + b$ liché.

Literatura

[1] Feynman, R. P. *Space time approach to non-relativistic quantum mechanics*. Rev. Mod. Phys., Vol. 20, No. 2, 1948.

[2] Feynman, R. P., Hibbs, A. R. *Quantum mechanics and path integrals*. McGraw-Hill, New York, 1965.

[3] Šťovíček, P., Tolar, J. *Quantum mechanics in a discrete spacetime*. Rep. Math. Phys., Vol. 20, No. 2, 1984.

[4] Chadzitaskos, G., Tolar, J. *Feynman's path integral and mutually unbiased bases*. J. Phys. A: Math. Theory, 42, 245306 (11 pp.), 2009.

[5] Šulc, P., Tolar, J. *Group theoretical construction of mutually unbiased bases in Hilbert spaces of prime dimensions*. J. Phys. A: Math. Theor., 40, 15099-15111, 2007.

[6] Pytlíček, J. *Lineární algebra a geometrie*. Vydavatelství ČVUT, Praha, 2005.

[7] Hlavatý, L. *Slabikář kvantové mechaniky*. skripta ČVUT, nevydáno, 2007.

[8] Štoll, I., Tolar, J. *Teoretická fyzika*. Vydavatelství ČVUT, Praha, 2004.

[9] Formánek, J. *Úvod do kvantové teorie*. Academia, Praha, 2004.

[10] Blank, J., Exner, P., Havlíček, M. *Lineární operátory v kvantové fyzice*. Karolinum, Praha, 1993.

[11] Novotný, J. *Vybrané partie z teorie kvantovaných polí*. text přednášky, MFF UK.

[12] Mackey, G. W. *Induced representations and quantum mechanics*. Benjamin, New York, 1970.

[13] Weyl, H. *The theory of groups and quantum mechanics*. Dover, New York, 1950.

[14] Havlíček, M., Patera, J., Pelantová, E., Tolar, J. *Automorphisms of the fine grading of sl*$(n, \mathbb{C})$ *associated with the generalized Pauli matrices*, J. Math. Phys., Vol. 43, No. 2, 2002; arXiv: math-ph/0311015.

[15] Schwinger, J. *Unitary operator bases*. Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A., 46, 1960, s.570-579.

[16] Schwinger, J. *The special canonical group*. Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A., 46, 1960, s.1401-1415.

[17] Husstad, E. *Approximation theory for quantum kinematics*. NTNU Trondheim, PhD Thesis.

[18] Wootters, W. K., Fields, B. D. *Optimal state-determination by mutually unbiased measurements*. Ann. Phys. (N.Y.), 191, 1989, s.363-381.

[19] Doebner, H. D., Šťovíček, P., Tolar, J. *Quantization of kinematics on configuration manifolds*. Rev. Math. Phys., Vol. 13, No. 4, 2001.

[20] Bandyopadhyay, S., Boykin, P. O., Rotchowdhury, V., Vatan, F. *A new proof for the existence of mutually unbiased bases*. Algorithmica, 34, 2002, s.512-528.

[21] Berndt, B. C., Evans, R. J. *The determination of Gauss sums*. Bull. Amer. Math. Soc. (New Series), 5, s.107-129 [formula (2.8)], 1981

[22] Berndt, B. C., Evans, R. J., Williams, K. S. *Gauss and Jacobi sums*. Canadian Mathematical Society, Series of Monographs and Advanced Texts, Vol.21 (Wiley/Interscience Publication) [Theorem 1.2.2.], 1998.