13 SYMETRIE A ZÁKONY ZACHOVANIA

13.1 TRANSFORMÁCIE A SYMETRIE

V tejto kapitole zovšeobecníme formalizmus, ktorým sme v 11. kapitole opisovali rotácie fyzikálnej sústavy na prípad všeobecných transformácií. Pod transformáciou stavu sústavy si budeme, podobne ako pri rotáciách, predstavovať príslušnú transformáciu (napr. posunutie, otočenie, zrkadlové prevrátenie,…) prístroja „pripravujúceho uvažovaný stav“. Takejto transformácii stavu je priradený istý operátor[207] U. Stav $|\varphi'\rangle$ pripravený transformovaným prístrojom vyjadríme pomocou pôvodného stavu $|\varphi\rangle$ nasledovne

$$|\varphi\rangle \to |\varphi'\rangle = \mathsf{U}|\varphi\rangle \tag{1}$$

Veličina $\langle\psi|\varphi\rangle$ je amplitúdou pravdepodobnosti toho, že v stave $|\varphi\rangle$ nájdeme stav $|\psi\rangle$. Ak žiadame, aby sa táto veličina pri transformácii nemenila, prídeme prirodzene k opisu transformácií pomocou unitárnych operátorov.

Operátor U budeme nazývať *unitárnym,* ak je lineárny a ak preň platí

$$\mathsf{U}^+\mathsf{U} = \mathsf{U}\mathsf{U}^+ = \mathbf{1} \tag{2}$$

Ak sa stavy $|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle$ transformujú podľa

$$|\varphi\rangle \to |\varphi'\rangle = \mathsf{U}|\varphi\rangle, \quad |\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \mathsf{U}|\psi\rangle$$

potom pre ne zrejme platí

$$\langle\psi'|\varphi'\rangle = \langle\psi|\mathsf{U}^+\mathsf{U}|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle \tag{3}$$

a ako špeciálny prípad aj

$$\langle\varphi'|\varphi'\rangle = \langle\varphi|\varphi\rangle \tag{4}$$

čo hovorí, že norma stavu sa nemení pri transformácii. Súčasná transformácia všetkých stavov sústavy pomocou unitárneho operátora teda nemení skalárne súčiny stavových vektorov.

Predpokladajme teraz, v analógii s prípadom rotácií, že uvažovaná transformácia stavov sústavy je opísaná unitárnym operátorom U a pozrime sa na fyzikálny

[207] V tomto článku predpokladáme, že U je definovaný na celom Hilbertovom priestore stavov sústavy.

význam vzťahu (3). Nech sú stavy $|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle$ pripravené prístrojmi I, II. Stavy $|\varphi'\rangle$, $|\psi'\rangle$ sú pripravené transformovanými prístrojmi I′, II′. Vzťah (3) potom hovorí, že amplitúda $\langle\psi|\varphi\rangle$ odpovedajúca pôvodným prístrojom pripravujúcim stavy sa nezmení ak na oboch prístrojoch I, II prevedieme uvažovanú transformáciu a prejdeme tým od pôvodných stavov k transformovaným[208].

Operátor A' spojený s operátorom A transformáciou (1) definujeme vzťahom

$$\mathsf{A} \to \mathsf{A}' = \mathsf{U}\mathsf{A}\mathsf{U}^{+} \tag{5}$$

Pre takto definovaný operátor a dva ľubovoľné stavy zrejme platí

$$\langle\psi'|\mathsf{A}'|\varphi'\rangle = \langle\psi|\mathsf{U}^{+}\mathsf{U}\mathsf{A}\mathsf{U}^{+}\mathsf{U}|\varphi\rangle = \langle\psi|\mathsf{A}|\varphi\rangle \tag{6}$$

Vzťah (6) hovorí, že maticový element typu $\langle\psi|\mathsf{A}|\varphi\rangle$ sa nezmení, ak súčasne transformujeme stavy (t. j. prístroje, ktoré tieto stavy pripravujú) i prístroje, ktoré realizujú merania na týchto stavoch[209].

Predchádzajúca diskusia nebola logicky celkom dôsledná. Opis transformácií pomocou unitárnych operátorov sme totiž motivovali tým, že pri transformáciách typu (1), (2) sa nemenia skalárne súčiny ako $\langle\psi|\varphi\rangle$. V skutočnosti sú však priamo merateľné nie amplitúdy, ale pravdepodobnosti, t. j. veličiny typu $|\langle\psi|\varphi\rangle|^2$. Pri skúmaní transformácií by sme sa teda mohli obmedziť na transformácie spĺňajúce pre ľubovoľné dva stavy sústavy nie podmienku

$$\langle\psi'|\varphi'\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle$$

ale slabšiu podmienku

$$|\langle\psi'|\varphi'\rangle|^2 = |\langle\psi|\varphi\rangle|^2 \tag{7}$$

Podľa Wignerovej vety, ktorú tu nebudeme dokazovať, transformácie (1) spĺňajúce slabšiu podmienku (7) sú dané (až na výber fáz stavov) buď unitárnymi, alebo antiunitárnymi operátormi. V praktických aplikáciách sa s antiunitárnymi operátormi stretávame iba pri časovej inverzii. Zatiaľ sa teda obmedzíme iba na transformácie stavov pomocou unitárnych operátorov.

Doteraz sme sa zaujímali o transformácie stavov v určitom okamihu t_0. V kvantovej mechanike majú veľmi dôležitú úlohu tie transformácie, ktoré nemenia časový vývoj sústavy. Nazývame ich transformáciami symetrie, alebo stručnejšie,

---

[208] Striktne vzaté, ak uvažovaná transformácia nie je súčasne symetriou, nemáme fyzikálny dôvod žiadať, aby sa pri nej nemenili amplitúdy typu $\langle\psi|\varphi\rangle$. Z matematického hľadiska však vystačíme s požiadavkou, aby sa pri transformácii zachovávala norma $\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$ čo fyzikálne zodpovedá tomu, že normovanému stavu musí po transformácii zodpovedať opäť normovaný stav. Vo funkcionálnej analýze sa ukazuje, že lineárny operátor, ktorý zachováva normu (a je definovaný na celom Hilbertovom priestore) je unitárny, t. j. zachováva nielen normu, ale automaticky potom aj skalárny súčin.

[209] Porovnaj s diskusiou v článku 11.1.

symetriami. Pri týchto transformáciách sa pôvodný stav $|\varphi\rangle$ a transformovaný stav $|\varphi'\rangle = \mathsf{U}|\varphi\rangle$ vyvíjajú v čase podľa rovnakej pohybovej rovnice. Túto formuláciu možno upresniť:

Transformáciu danú od času nezávislým unitárnym operátorom U nazývame symetriou ak (v Schrödingerovom obraze) platí schéma

$$
\begin{array}{ccc}
|\varphi(t_0)\rangle & \xrightarrow{\mathsf{U}} & |\varphi'(t_0)\rangle \\
\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathsf{H}(t-t_0)/\hbar}\downarrow & & \downarrow \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathsf{H}(t-t_0)/\hbar} \\
|\varphi'(t)\rangle & \xrightarrow{\mathsf{U}} & |\varphi(t)\rangle
\end{array}
\tag{8}
$$

Fyzikálny obsah tejto schémy je nasledujúci. Ak zo stavu $|\varphi(t_0)\rangle$ prejdeme transformáciou U do stavu $|\varphi'(t_0)\rangle$ a stav $|\varphi'(t_0)\rangle$ necháme vyvíjať sa v čase podľa Schrödingerovej rovnice s hamiltoniánom H, dostaneme v čase t ten istý výsledný stav, ako keď necháme najprv stav $|\varphi(t_0)\rangle$ vyvíjať sa v čase a potom v čase t urobíme transformáciu U. Nájdeme teraz podmienku, ktorú musí spĺňať operátor U ak má byť uvažovaná transformácia symetriou. Podmienka daná schémou (8) zrejme hovorí:

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathsf{H}(t-t_0)/\hbar}\mathsf{U}|\varphi(t_0)\rangle = \mathsf{U}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathsf{H}(t-t_0)/\hbar}|\varphi(t_0)\rangle \tag{9}$$

pričom ľavá strana odpovedá postupu „doprava“ a „dolu“ podľa šipiek v (8) a pravá postupu „dolu“ a potom „doprava“. Pretože žiadame splnenie (9) pre ľubovoľné $|\varphi(t_0)\rangle$ musia sa rovnať operátory stojace pred $|\varphi(t_0)\rangle$ na oboch stranách rovnice. Pre infinitezimálne $\Delta t = t - t_0$ však platí

$$\exp(-\mathrm{i}\mathsf{H}\Delta t/\hbar) \doteq 1 - \mathrm{i}\mathsf{H}\Delta t/\hbar$$

a z (9) dostávame podmienku

$$[1 - \mathrm{i}\mathsf{H}\Delta t/\hbar]\mathsf{U} = \mathsf{U}[1 - \mathrm{i}\mathsf{H}\Delta t/\hbar]$$

ktorá je ekvivalentná požiadavke

$$[\mathsf{H}, \mathsf{U}] = 0 \tag{10}$$

Ekvivalentné odvodenie podmienky (10) dostaneme nasledujúcim spôsobom. Nech $|\varphi(t)\rangle$ je riešením Schrödingerovej rovnice

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle = \mathsf{H}|\varphi(t)\rangle \tag{11}$$

Násobením zľava operátorom U a vsunutím $\mathsf{U}^{+}\mathsf{U} = 1$ na pravú stranu dostaneme

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathsf{U}|\varphi(t)\rangle = \mathsf{U}\mathsf{H}\mathsf{U}^{+}\mathsf{U}|\varphi(t)\rangle \tag{12}$$

Výraz $\mathsf{U}|\varphi(t)\rangle = |\varphi'(t)\rangle$ označuje transformovaný stavový vektor, ktorý podľa (12) spĺňa rovnicu

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi'(t)\rangle = \mathsf{UHU}^{+}|\varphi'(t)\rangle \tag{13}$$

Ak žiadame – a to je len preformulovanie schémy (8) – aby $|\varphi'(t)\rangle$ spĺňalo tú istú SchR ako $|\varphi(t)\rangle$ dostaneme podmienku

$$\mathsf{H} = \mathsf{UHU}^{+} \tag{14}$$

Po vynásobení (14) operátorom U sprava dostaneme ihneď podmienku (10).

Transformácia vyjadrená operátorom U je teda symetriou práve vtedy, ak operátor U komutuje s hamiltoniánom H, alebo – čo vidno zo zápisu (10) v tvare (14) – ak sa hamiltonián pri tejto transformácii nemení.

Vo funkcionálnej analýze sa dokazuje, že každý unitárny operátor U možno vyjadriť v tvare[210]

$$\mathsf{U} = \exp(\mathrm{i}\mathsf{A}) \tag{15}$$

kde A je hermitovský operátor.

Ak U komutuje s H, potom bude s H komutovať aj A dané vzťahom (15), t. j.

$$[\mathsf{H}, \mathsf{A}] = 0 \tag{16}$$

Ak U je nezávislé od času, potom takým bude aj A. Hermitovský operátor A zodpovedá určitej fyzikálnej veličine. Pre jej strednú hodnotu v stave $|\psi(t)\rangle$ podľa článku 3.3.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{A} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|\mathsf{A}, \mathsf{H}|\psi(t)\rangle \tag{17}$$

a podmienka (16) ukazuje, že $\bar{A}$ sa s časom nemení. Hovoríme, že fyzikálna veličina A sa s časom zachováva, alebo že je integrálom pohybu.[211]

Vidíme teda, že každá symetria sústavy implikuje istý zákon zachovania. To je jedna z príčin, pre ktoré je určenie symetrií určitej fyzikálnej sústavy zvlášť dôležité. Často totiž možno vyriešiť danú úlohu iba na základe zákonov zachovania,

---

[210] Čitateľ si ľahko dokáže sám opačné tvrdenie: Ak A je hermitovský, potom U daný vzťahom (15) je unitárny.

[211] Platí aj silnejšie tvrdenie (dôkaz prenecháme čitateľovi): Ak sa v čase t_0 sústava nachádza s pravdepodobnosťou $p_n = |\langle\xi_n|\psi(t_0)\rangle|^2$ $\langle\varphi|\psi\rangle$ vo vlastnom stave $|\xi_n\rangle$ operátora A: $\mathsf{A}|\xi_n\rangle = A_n|\xi_n\rangle$, potom sa p_n s časom nemení. Pri dôkaze je vhodné najprv predpokladať nedegenerované spektrá operátorov A, H zapísať $p_n(t) = \langle\xi_n|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\xi_n\rangle$ a pri skúmaní časovej derivácie $p_n(t)$ využiť to, že A, H majú spoločné vlastné vektory. Potom možno prejsť k overeniu všeobecného prípadu.

bez toho, že by sme skúmali podrobnosti dynamiky študovaného problému. V praxi sa nezriedka stáva, že symetrie sústavy sú známe aj vtedy, ak mechanizmus interakcie nepoznáme (vieme, že H komutuje s určitými operátormi, bez toho, že by sme poznali presný tvar H). Výsledky vyplývajúce priamo z existencie symetrií sú potom oveľa spoľahlivejšie ako ďalšie predpovede založené napríklad na modeloch dynamického správania sa sústavy.

13.2 GRUPY TRANSFORMÁCIÍ A ICH REPREZENTÁCIE

V tejto učebnici sme sa doteraz zaoberali podrobnejšie iba s transformáciami sústavy pri rotáciách. Tieto transformácie fyzici najčastejšie používajú a pri hľadaní iných transformácií ich používajú ako model, alebo východisko pre zovšeobecnenie. Jednou z dôležitých vlastností rotácií je to, že tvoria grupu, t. j. zložením dvoch rotácií dostaneme transformáciu, ktorú môžeme opísať jedinou rotáciou. Všetky transformácie, s ktorými sa v aplikáciách stretávame tvoria tiež grupy. V tomto článku si preto najprv pripomenieme základné vlastnosti grúp, potom zavedieme pojem reprezentácie grupy a napokon doplníme niektoré tvrdenia, ktoré v prvej časti článku zámerne neformulujeme v najvšeobecnejšom tvare.

Z matematického hľadiska množinu G nazývame grupou[212], ak pre každé dva jej prvky je definovaný ich súčin, ktorý je tiež prvkom G a platí:

1. pre všetky $a, b, c \in G$ je násobenie asociatívne, t. j.

$$(ab)c = a(bc)$$

2. existuje jednotkový prvok $e \in G$ taký, že pre každé $a \in G$ platí

$$ea = ae = a$$

3. ku každému prvku $a \in G$ existuje inverzný prvok $a^{-1} \in G$ taký, že platí

$$aa^{-1} = a^{-1}a = e$$

Ako príklad možno uviesť grupu rotácií. Pod prvkom grupy chápeme maticu[213] typu 3×3 $\mathsf{R}(\boldsymbol{n}, \vartheta)_{ik}$; $i, k = 1, 2, 3$, kde $\boldsymbol{n}$ je os rotácie a ϑ je uhol rotácie, pričom súradnice určitého bodu (x_1, x_2, x_3) sa pri rotácii transformujú podľa vzťahu

$$x_i \to x_i' = \mathsf{R}(\boldsymbol{n}, \vartheta)_{ik} x_k$$

[212] Z teórie grúp existuje obsiahla literatúra. Z monografií orientovaných na aplikácie vo fyzike odporúčame napríklad Hammermeshovu knihu [21], alebo Barut, A. – Raczka, J. Theory of group representations and applications. PWN, Varšava 1977.

[213] Rotáciu možno opísať buď osou rotácie $\boldsymbol{n}$ a uhlom ϑ, alebo trojicou Eulerových uhlov α, β, γ. Predpokladáme, že čitateľ je už na základe kapitoly 11 spriatelený s obidvoma opismi.

a cez opakovaný index na pravej strane sčitujeme od 1 po 3. Pod zložením dvoch rotácií daných dvojicami ($\boldsymbol{n}_1$, ϑ_1), ($\boldsymbol{n}_2$, ϑ_2) chápeme transformáciu

$$x_i \to x''_i = \mathsf{R}(\boldsymbol{n}_2,\ \vartheta_2)_{ik}\mathsf{R}(\boldsymbol{n}_1,\ \vartheta_1)_{kn}x_n$$

Dá sa ukázať, že zloženie dvoch rotácií je možné vyjadriť ako jedinú rotáciu. Skladanie rotácií je vždy asociatívne, jednotkovým prvkom je identická transformácia a inverznou k danej rotácii $\mathsf{R}(\boldsymbol{n},\ \vartheta)$ je rotácia okolo tej istej osi o rovnaký uhol v opačnom smere, t. j. rotácia $\mathsf{R}(\boldsymbol{n}, -\vartheta)$.

Ešte jednoduchším príkladom je grupa rotácií v rovine, napr. grupa rotácií okolo osi z. Predpokladáme, že čitateľ sa sám presvedčí o tom, že všetky tri už uvedené požiadavky sú v tomto prípade splnené.

Ak G je určitá grupa transformácií sústavy, potom každému jej prvku $g \in G$ je priradený určitý unitárny operátor $\mathsf{U}(g)$ a stavy sústavy sa transformujú podľa vzťahu

$$|\varphi\rangle \to |\varphi'\rangle = \mathsf{U}(g)|\varphi\rangle \qquad (1)$$

Pri rotáciách je každý prvok g grupy rotácií daný napríklad trojicou Eulerových uhlov $g \equiv (\alpha, \beta, \gamma)$ a príslušný operátor $\mathsf{U}(g)$ má tvar

$$\mathsf{U}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-\mathrm{i}\alpha\mathsf{J}_z)\exp(-\mathrm{i}\beta\mathsf{J}_y)\exp(-\mathrm{i}\gamma\mathsf{J}_z)$$

Zloženiu dvoch transformácií zodpovedá vynásobenie príslušných operátorov: ak prvku $g_1 \in G$ je priradený operátor $\mathsf{U}(g_1)$ a prvku $g_2 \in G$ operátor $\mathsf{U}(g_2)$, potom zloženej transformácii (najprv g_1 a potom g_2) odpovedá

$$|\varphi\rangle \to |\varphi'\rangle = \mathsf{U}(g_1)|\varphi\rangle$$

$$|\varphi'\rangle \to |\varphi''\rangle = \mathsf{U}(g_2)|\varphi'\rangle$$

teda

$$|\varphi\rangle \to |\varphi''\rangle = \mathsf{U}(g_2)\mathsf{U}(g_1)|\varphi\rangle \qquad (2)$$

Súčinu g_1g_2 odpovedá ale prvok $h \in G$, $h = g_2g_1$ a tomuto je priradený unitárny operátor

$$\mathsf{U}(h) = \mathsf{U}(g_2g_1) \qquad (3)$$

Často sa stáva, že platí

$$\mathsf{U}(g_2g_1) = \mathsf{U}(g_2)\mathsf{U}(g_1) \qquad (4)$$

hoci fyzikálna interpretácia teórie pripúšťa aj všeobecnejší vzťah medzi $\mathsf{U}(g_2g_1)$,

$\mathsf{U}(g_2)$ a $\mathsf{U}(g_1)$. Zatiaľ budeme predpokladať platnosť (4) a k všeobecnému prípadu sa vrátime až na konci článku.

Ak platí vzťah (4), potom množina operátorov $\mathsf{U}(g)$ priradených všetkým prvkom $g \in G$ tvorí tiež grupu, o ktorej hovoríme, že je reprezentáciou grupy G. Jednotkovému prvku $e \in G$ je priradený jednotkový operátor $\mathsf{U}(e) = \mathbf{1}$, a prvku g^{-1} je priradený operátor $\mathsf{U}^{-1}(g)$. Ak sa obmedzíme iba na situácie, keď všetky operátory $\mathsf{U}(g)$ sú unitárne, hovoríme o unitárnych reprezentáciách. V aplikáciách sa ale spravidla stretávame iba s unitárnymi reprezentáciami a preto v ďalšom budeme pod reprezentáciou rozumieť iba unitárnu reprezentáciu.

Vo fyzike pojem reprezentácie chápeme obvykle v ešte užšom zmysle. Ak v Hilbertovom priestore stavov sústavy, v ktorom pôsobia operátory $\mathsf{U}(g)$ priradené prvkom grupy G zvolíme bázu $\{|\varphi_i\rangle\}$, potom sú operátorom U priradené matice

$$\langle \varphi_i|\mathsf{U}(g)|\varphi_k\rangle \tag{5}$$

Ak operátory $\mathsf{U}(g)$ tvoria reprezentáciu grupy G, t. j. ak zobrazenie

$$g \to \mathsf{U}(g) \tag{6}$$

zachováva grupové vlastnosti; potom aj matice $U_{ik}(g)$ dané vzťahom (5) tvoria pri priradení

$$g \to \mathsf{U}_{ik}(g) \tag{7}$$

reprezentáciu grupy G. Súčinu dvoch prvkov grupy G je priradený príslušný súčin matíc, t. j.

$$g_2g_1 \to \mathsf{U}_{is}(g_1)\mathsf{U}_{sk}(g_2) \tag{8}$$

S reprezentáciou grupy pomocou matíc sme sa už stretli pri rotáciách a pred tým, než by sme pokračovali ďalej si to pripomenieme. Nech $|j, m\rangle$ pri pevnom j a pri $m = -j, -j + 1, \ldots, j - 1, j$ sú vlastné vektory operátorov momentu hybnosti

$$\begin{aligned} \mathsf{J}^2|j, m\rangle &= j(j + 1)|j, m\rangle \\ \mathsf{J}_z|j, m\rangle &= m|j, m\rangle \end{aligned} \tag{9}$$

Rotácii danej Eulerovými uhlami (α, β, γ) je priradený operátor

$$\mathsf{U}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-\mathrm{i}\alpha\mathsf{J}_z)\exp(-\mathrm{i}\beta\mathsf{J}_y)\exp(-\mathrm{i}\gamma\mathsf{J}_z) \tag{10}$$

a tomuto je v báze $|j, m\rangle$ priradená rotačná matica

$$\mathscr{D}^j_{mm'}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle j, m|\mathsf{U}(\alpha, \beta, \gamma)|j, m'\rangle \tag{11}$$

Dvom po sebe idúcim rotáciám je priradený súčin príslušných rotačných matíc.

Teraz sa oboznámime s pojmom ireducibilnej reprezentácie, ale predtým si musíme ešte zaviesť pojem ekvivalentných reprezentácií.

Nech G je teda istá grupa s prvkami g_1, g_2, … a nech zobrazenie

$$g \to \mathsf{U}_{ik}(g) \qquad i, k = 1, 2, \ldots, n \tag{12}$$

je jej reprezentácia pomocou unitárnych matíc typu $n \times n$. Nech ďalej $\boldsymbol{S}$ je unitárna matica typu $n \times n$. Ľahko sa presvedčíme o tom, že zobrazenie

$$g \to U'_{ik}(g) = (S^{+})_{ij} U_{jr}(g) S_{rk} = (\boldsymbol{S}^{+}\boldsymbol{U}(g)\boldsymbol{S})_{ik} \tag{13}$$

je tiež reprezentáciou grupy G. Pretože v pôvodnom priradení je súčinu $g_1 g_2$ priradený súčin matíc $\boldsymbol{U}(g_1)\boldsymbol{U}(g_2)$, máme

$$g_1 g_2 \to \boldsymbol{S}^{+}\boldsymbol{U}(g_1)\boldsymbol{U}(g_2)\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^{+}\boldsymbol{U}(g_1)\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{+}\boldsymbol{U}(g_2)\boldsymbol{S} = \boldsymbol{U}'(g_1)\boldsymbol{U}'(g_2)$$

a vidíme, že aj v novom priradení je súčinu prvkov priradený súčin príslušných matíc. Podobne sa presvedčíme o tom, že jednotkovému prvku je podľa (13) priradená jednotková a inverznému prvku inverzná matica.

Prechod medzi reprezentáciami

$$\boldsymbol{U}(g) \to \boldsymbol{U}'(g) = \boldsymbol{S}^{+}\boldsymbol{U}(g)\boldsymbol{S} \tag{14}$$

nazývame podobnostnou transformáciou a reprezentácie $\boldsymbol{U}(g)$, $\boldsymbol{U}'(g)$ viazané vzťahom (14) nazývame ekvivalentnými.

Podobnostná transformácia má jednoduchý obsah. Uvažujme reprezentáciu (12), pričom matice $U_{ik}(g)$ dané výrazmi

$$U_{ik}(g) = \langle \varphi_i | \boldsymbol{U}(g) | \varphi_k \rangle \tag{15}$$

pričom $\{|\varphi_k\rangle\}$ je určitou bázou v priestore stavov. Ak v tomto priestore zvolíme novú bázu $\{|\varphi'_n\rangle\}$ viazanú so starou podľa

$$|\varphi'_n\rangle = S_{mn} |\varphi_m\rangle$$

kde $\boldsymbol{S}$ je unitárna matica; potom v tejto novej báze budú operátorom $\mathsf{U}(g)$ priradené matice

$$U'_{ik} = \langle \varphi'_i | \mathsf{U}(g) | \varphi'_k \rangle = S^{*}_{mi} \langle \varphi_m | \mathsf{U}(g) | \varphi_s \rangle S_{sk} = (\boldsymbol{S}^{+}\boldsymbol{U}(g)\boldsymbol{S})_{ik} \tag{16}$$

Podobnostná transformácia (14) teda odpovedá zmene bázy v uvažovanom priestore stavov.

Reprezentácie možno v istom zmysle aj skladať. Nech

$$g \to A_{ij}(g) \qquad i, j = 1, 2, \ldots, n$$

je reprezentáciou grupy G $n \times n$ rozmernými maticami a

$$g \to B_{rs}(g) \qquad r, s = 1, 2, \dots, m$$

je reprezentáciou pomocou $m \times m$ rozmerných matíc. Potom môžeme vytvoriť jednoducho novú reprezentáciu maticami typu $(m + n) \times (m + n)$, pričom každému prvku priradíme maticu[214]

$$\boldsymbol{C}(g) = \begin{array}{c} \left(\begin{array}{c|c} A(g) & 0 \\ \hline 0 & B(g) \end{array} \right) \begin{array}{l} n \\ m \end{array} \\ \begin{array}{cc} n & \quad m \end{array} \end{array} \tag{17}$$

Podobne by sme mohli postupovať ďalej a pridať ďalšiu reprezentáciu. Matica $\boldsymbol{C}(g)$ by sa potom skladala z blokových matíc, pričom nenulové by boli iba bloky v diagonále.

Ak (17) platí pre všetky prvky g, hovoríme, že reprezentácia $\boldsymbol{C}(g)$ sa redukuje na reprezentácie $\boldsymbol{A}(g)$ a $\boldsymbol{B}(g)$. Tu $\boldsymbol{C}(g)$ nazývame reducibilnou reprezentáciou.

Podstatnú vlastnosť reducibilnej reprezentácie vidno z nasledujúcej úvahy. Vektory bázy v priestore, v ktorom pôsobia matice $\boldsymbol{C}(g)$ možno vybrať v tvare

$$\begin{array}{ccccccc} \left(\begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ \\ \end{array}\right) & \left(\begin{array}{c} \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ \\ \end{array}\right) & \cdots & \left(\begin{array}{c} \vdots \\ 1 \\ \hline \vdots \\ \\ \\ \end{array}\right) & \left(\begin{array}{c} \vdots \\ \\ \hline 1 \\ \vdots \\ \end{array}\right) & \cdots & \left(\begin{array}{c} \vdots \\ \\ \hline \vdots \\ 1 \\ \end{array}\right) \\ \mathrm{e}_1 & \mathrm{e}_2 & & \mathrm{e}_n & \mathrm{e}_{n+1} & & \mathrm{e}_{n=m} \end{array}$$

kde bodky označujú nuly, vodorovná čiara oddeľuje prvých n miest (iný význam nemá) a pod každým vektorom sme napísali jeho „názov“. Transformácie bázy maticami $\boldsymbol{C}$(g) prevádzajú vektory $e_1, \dots, e_n$ (a ich lineárne kombinácie) zas iba na lineárne kombinácie týchto vektorov a rovnaké tvrdenie platí i pre vektory $e_{n+1}, \dots, e_{n+m}$. Celý priestor je takto rozdelený na dva podpriestory, ktoré sa pri pôsobení matíc $\boldsymbol{C}(g)$ navzájom „nemiešajú“.

Túto vlastnosť matíc $\boldsymbol{C}(g)$ možno „zamaskovať“ tým, že prejdeme od pôvodnej bázy $\{e_i\}$, k novej báze $\{e_i'\}$ tak, že e_i' budú lineárnymi kombináciami všetkých pôvodných vektorov e_i. Matice $\boldsymbol{C}'(g)$ už potom nebudú mať blokovo-diagonálny tvar (17). Takáto transformácia ale nezmení podstatnú vlastnosť matíc $\boldsymbol{C}(g)$ – priestor stavov bude stále rozdelený na dve časti, ktoré sa pri transformáciách maticami $\boldsymbol{C}'(g)$ nemiešajú, iba vyjadrenie báz pre tieto podpriestory (časti) bude

[214] Pre maticu $\boldsymbol{C}(g)$ platí $C_{ij} = A_{ij}$ pre $1 \le n, j \le n$ a $C_{ij} = B_{i-n, j-n}$ pre $n + 1 \le i, j \le n + m$. Ostatné prvky $\boldsymbol{C}$ sú nulové.

komplikovanejšie. Pojem reducibilnej reprezentácie preto zavádzame všeobecnejšie.

Nech $g \to \boldsymbol{D}(g)$ je reprezentácia grupy G maticami $\boldsymbol{D}(g)$. Ak možno pomocou podobnostnej transformácie $\boldsymbol{D}(g) \to \boldsymbol{S}^{+}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{S}$ previesť *všetky* matice $\boldsymbol{D}(g)$ na tvar (17), pričom $n \neq 0$, $m \neq 0$ hovoríme, že reprezentácia $\boldsymbol{D}(g)$ je reducibilná. Ak to nemožno urobiť, hovoríme, že $\boldsymbol{D}(g)$ je ireducibilnou reprezentáciou grupy G. Úloha, nájsť všetky ireducibilné reprezentácie istej grupy, je dobre definovaný matematický problém a jeho riešenie je známe pre širokú triedu grúp, dôležitú pre fyzikálne aplikácie.

Význam ireducibilných reprezentácií snáď najpriamejšie vidno pri analýze degenerácie energetického spektra v prípade symetrie istej fyzikálnej sústavy. Ak transformácia, ktorej sú priradené operátory $\mathsf{U}(g)$ je symetriou, potom U komutuje s hamiltoniánom (pozri (1.10)).

Ak je stav $|\psi\rangle$ vlastným stavom H

$$\mathsf{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{19}$$

potom aj stav

$$|\psi'\rangle = \mathsf{U}|\psi\rangle \tag{20}$$

bude vlastným stavom, prislúchajúcim tej istej vlastnej hodnote. Skutočne

$$\mathsf{H}|\psi'\rangle = \mathsf{HU}|\psi\rangle = \mathsf{UH}|\psi\rangle = \mathsf{U}E|\psi\rangle = E\mathsf{U}|\psi\rangle = E|\psi'\rangle \tag{21}$$

Vlastné vektory operátora H prislúchajúce danej vlastnej hodnote E tvoria podpriestor $\mathscr{H}_E$ Hilbertovho priestoru $\mathscr{H}$ všetkých stavov sústavy. Ak je sústava symetrická voči grupe symetrie G (t.j. operátory $\mathsf{U}(g)$ pre $g \in G$ komutujú s H), potom sa podľa (21) vektory z $\mathscr{H}_E$ transformujú opäť na vektory z $\mathscr{H}_E$. Ak v priestore $\mathscr{H}_E$ zavedieme bázu $\{|\psi_n\rangle\}$, potom pre ľubovoľné j $|\psi_n\rangle$ a pre každé g platí

$$\mathsf{U}(g)|\psi_n\rangle = |\psi_m\rangle\langle\psi_m|\mathsf{U}(g)|\psi_n\rangle = \mathsf{U}_{mn}|\psi_m\rangle \tag{22}$$

(suma cez opakované m) a matice $\mathsf{U}_{ij}(g)$ tvoria reprezentáciu grupy G. Ortogonálny systém vlastných vektorov H prislúchajúcich k danej vlastnej hodnote E takto tvorí bázu reprezentácie grupy symetrie, pričom reprezentácia je spravidla ireducibilná.[215]

Tento výsledok je dôležitý najmä v situáciách, keď nepoznáme presný tvar hamiltoniánu, ale máme informáciu o degenerácii energetických hladín. Z počtu

[215] Ak sa stane, že systém vlastných vektorov H príslušných k danej hodnote E tvorí bázu reducibilnej reprezentácie, potom to obvykle značí, že systém má v skutočnosti vyššiu symetriu. Toto je aj prípad atómu vodíka, ale bližšie sa tu s touto otázkou nebudeme zaoberať.

degenerovaných stavov možno často uhádnuť symetriu hamiltoniánu a toto je dôležitým vodidlom pri snahe o jeho presnejšie určenie.

Predchádzajúce úvahy, samozrejme, nenaznačujú, že každý vlastný stav hamiltoniánu musí byť viacnásobne degenerovaný. Každá grupa má totiž aj triviálnu jednorozmernú reprezentáciu, v ktorej každému $g \in G$ priradíme jednotku, t. j. maticu typu 1×1 a stav, ktorý sa podľa tejto reprezentácie transformuje nemá viacnásobnú degeneráciu. V prípade rotačnej grupy je takýmto stavom guľová funkcia $Y_{00}(\vartheta, \varphi) = (4\pi)^{-1/2}$, ktorá sa pri rotáciách nemení.

Upozorníme ešte, že v prípade, že daná hladina je nedegenerovaná, potom stav (vlnová funkcia) má takú istú symetriu ako hamiltonián. (Napríklad vlnová funkcia Y_{00} je sféricky symetrická.) Po formálnej stránke je to vyjadrené tým, že príslušný stav je vlastným stavom operátora symetrie.

Napokon sa vrátime ešte k otázke priradenia operátorov $\mathsf{U}(g)$ jednotlivým elementom grupy g. Pri diskusii na začiatku článku sme predpokladali, že pre ľubovoľný stav sústavy platí

$$\mathsf{U}(g_2 g_1)|\varphi\rangle = \mathsf{U}(g_2)\mathsf{U}(g_1)|\varphi\rangle \tag{23}$$

pričom na pravej strane máme výsledok dvoch postupne vykonaných transformácií odpovedajúcich elementom g_1, g_2 a na ľavej máme jedinú transformáciu odpovedajúcu súčinu $g_2 g_1$. V kvantovej mechanike je ale stav daný lúčom v Hilbertovom priestore, teda stavový vektor je určený s presnosťou na multiplikačný fázový faktor. Namiesto rovnice (4) teda stačí požadovať splnenie podmienky

$$\mathsf{U}(g_1 g_2) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(g_1, g_2)}\mathsf{U}(g_1)\mathsf{U}(g_2) \tag{24}$$

kde fáza $\alpha(g_1, g_2)$ závisí od elementov g_1, g_2. Vo väčšine prípadov možno vhodným výberom fáz stavov dosiahnuť to, aby sme od (24) prešli k (4). Potom, tak ako vyššie, hovoríme, že priradenie $g \to \mathsf{U}(g)$ je reprezentáciou grupy G. Ak platí len všeobecnejší vzťah (24), hovoríme o projektívnej reprezentácii.

Fázových faktorov $\exp(\mathrm{i}\alpha(g_1, g_2))$ sa v skutočnosti nemôžeme zbaviť ani pri reprezentáciách grupy rotácií odpovedajúcich poločíselnému spinu. Dve po sebe idúce rotácie okolo osi z o uhol π odpovedajú identickej transformácii. V prípade stavu so spinom 1/2 sú ale tieto dve rotácie opísané súčinom

$$\mathrm{e}^{-\pi\sigma_z/2}\,\mathrm{e}^{-\pi\sigma_z/2} = \mathrm{e}^{-\pi\sigma_z} = (\cos\pi)\mathbf{1} - \mathrm{i}\sigma_z \sin\pi = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Pri rotácii o 2π okolo osi z (alebo hociakej inej osi) sa teda zmení znamienko spinoru.[216]

[216] Reprezentácie, ktoré sme našli v kapitole o momente hybnosti, nie sú, presne povedané, reprezentáciami grupy rotácií, ak jej pokrývajúcej grupy $SU(2)$. O týchto veciach tu ale podrobnejšie hovoriť nebudeme.

13.3 LIEOVE GRUPY

Vo fyzikálnych aplikáciách patrí význačná úloha Lieovým grupám. Naznačíme tu stručne ich vlastnosti, nebudeme sa však snažiť ani o rigoróznosť ani o systematický výklad, pôjde nám viacmenej o intuitívne pochopenie podstaty problému.[217]

Lieove grupy sú nekonečné topologické grupy, v ktorých možno zaviesť diferencovateľné súradnice. Prakticky to znamená, že prvky grupy možno označiť pomocou niekoľkých reálnych parametrov (súradníc). Zadanie týchto parametrov určuje jednoznačne prvok grupy. Grupa je topologická, čo značí, že pre jej prvky sú definované pojmy ako limita postupnosti prvkov a podobne, pričom parametrizácia grupy je spojitá, čo znamená, že dva prvky, ktorých parametre sa málo odlišujú sú „blízke“ (v zmysle topológie na grupe). Ak ide o r-parametrickú grupu (čo značí, že prvok grupy je jednoznačne daný pomocou r reálnych parametrov), potom pre prvky grupy zavádzame označenie napr.

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_r) \in G \tag{1}$$

alebo skrátene

$$g(\alpha_i) \in G \tag{2}$$

Parametre prvku grupy, ktorý je súčinom iných dvoch prvkov môžeme vyjadriť pomocou parametrov týchto prvkov, t. j. ak

$$g(\gamma_1, \ldots, \gamma_r) = g(\alpha_1, \ldots, \alpha_r)g(\beta_1, \ldots, \beta_r) \tag{3}$$

potom

$$\gamma_i = f_i(\alpha_1, \ldots, \alpha_r, \beta_1, \ldots, \beta_r) \tag{4}$$

kde f_i sú funkcie, o ktorých predpokladáme, že sú spojité a (nekonečne) diferencovateľné.

V tomto článku sa ďalej obmedzíme iba na skúmanie grúp operátorov (reprezentácií grúp transformácií, o ktoré sa zaujímame). Skrátene budeme preto namiesto o reprezentácii grupy hovoriť jednoducho iba o grupe.

Na základe skúseností s momentom hybnosti a rotáciami vieme, že je užitočné študovať najprv infinitezimálne transformácie, t. j. také, ktoré sa len infinitezimálne líšia od transformácie totožnosti (od jednotkového operátora). Parametrizáciu prvkov grupy možno vždy vybrať tak, že jednotkovému operátoru odpovedajú nulové hodnoty všetkých parametrov, teda

$$\mathsf{U}(0, 0, 0, \ldots, 0) = \mathbf{1}$$

[217] O Lieových grupách existuje obsiahla matematická literatúra. Nie vždy sa však terminológia bežne používaná vo fyzikálnej literatúre kryje s tou, s ktorou sa možno stretnúť v matematických monografiách.

Pre infinitezimálnu transformáciu potom s presnosťou do prvého rádu máme

$$\mathsf{U}(\mathrm{d}\alpha_1, \ldots, \mathrm{d}\alpha_r) = \mathbf{1} - \sum_{i=1}^{r} \mathrm{i}\mathsf{A}_i \mathrm{d}\alpha_i \tag{5}$$

kde A_i sú vhodné operátory, ktoré nazývame generátormi grupy transformácií. Faktor *i* vo vzťahu (5) je konvenciou zvolenou preto, že pri takejto definícii sú generátory A_i hermitovskými operátormi. Vyplýva to z faktu, že operátor U musí byť unitárny. S presnosťou do prvého rádu musí platiť

$$\mathbf{1} = \mathsf{U}^{+}\mathsf{U} = \left(\mathbf{1} + \mathrm{i}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{r}} \mathsf{A}_i^{+}\mathrm{d}\alpha_i\right)\left(\mathbf{1} - \mathrm{i}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{r}} \mathsf{A}_i \mathrm{d}\alpha_i\right) = \mathbf{1} + \mathrm{i}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{r}} (\mathsf{A}_i - \mathsf{A}_i^{+})\mathrm{d}\alpha_i$$

a dostávame podmienku $\mathsf{A}_i = \mathsf{A}_i^{+}$.

Infinitezimálne transformácie v Lieovej grupe môžeme teda zapísať v tvare (5). Metódami diferenciálneho počtu sa dá ukázať, že podobne ako sme videli v prípade rotácií, aj vo všeobecnom prípade sa i konečné transformácie dajú parametrizovať (aspoň v istom okolí jednotkového prvku) v tvare[218]

$$\mathsf{U}(\alpha_1, \ldots, \alpha_r) = \exp(-\mathrm{i}\Sigma \mathsf{A}_i \alpha_i) \tag{6}$$

Podobným postupom ako v prípade rotácií možno na základe vzťahu (6) ukázať, že generátory spĺňajú komutačné vzťahy

$$[\mathsf{A}_i, \mathsf{A}_k] = \mathrm{i}\sum_l f_{ik}^{l} \mathsf{A}_l. \tag{7}$$

kde f_{ik}^{l} sú vhodné čísla a nazývajú sa štruktúrne konštanty. Dá sa ukázať, že pri zvolenej parametrizácii prvkov Lieovej grupy, štruktúrne konštanty nezávisia od konkrétnej reprezentácie a charakterizujú samotnú grupu.[219]

Pre klasifikáciu reprezentácií majú dôležitú úlohu kvadratické Casimirove operátory. Sú to operátory vytvorené ako „kvadratické kombinácie" generátorov, t. j. operátory typu

$$\mathsf{F} = \sum_{m,n} g_{mn} \mathsf{A}_m \mathsf{A}_n$$

kde g_{mn} sú vhodné koeficienty volené tak, aby operátor F komutoval so všetkými generátormi. Význam Casimirových operátorov spočíva v tom, že v rámci ireducibilnej reprezentácie sú úmerné jednotkovému operátoru, t. j. všetky vektory patriace

[218] Vzťah (6), samozrejme, platí iba pre určitú špeciálnu voľbu parametrov.

[219] Pritom viacero grúp, ktoré sú lokálne homomorfné môže mať rovnaké štruktúrne konštanty. Tieto grupy sa líšia topologickými vlastnosťami.

do danej reprezentácie prislúchajú k rovnakej vlastnej hodnote Casimirovho operátora. Ireducibilné reprezentácie potom možno klasifikovať pomocou vlastných hodnôt Casimirových operátorov. V prípade grupy rotácií s generátormi J_x, J_y, J_z je (i keď sme to tak nenazývali) Casimirovým operátorom $\mathsf{J}^2 = \mathsf{J}_x^2 + \mathsf{J}_y^2 + \mathsf{J}_z^2$.

Pre spojité grupy symetrií platia všetky tvrdenia, ktoré sme v predchádzajúcich článkoch tejto kapitoly uviedli pre prípad ľubovoľnej grupy. Zastavíme sa bližšie iba pri súvise symetrií so zákonmi zachovania, ktorý možno sformulovať nasledovne:

Ak hamiltonián sústavy je invariantný voči r-parametrickej grupe symetrií, potom pre sústavu platí r nezávislých zákonov zachovania, pričom zachovávajúcim sa veličinám odpovedajú (v kvantovomechanickom zmysle ako operátory priradené veličine) generátory grupy.

Dôkaz tohto tvrdenia je jednoduchý, ak si uvedomíme, že transformácie z grupy možno vyjadriť v tvare (6), čo je analogický výraz ako (1.15). Potom už ľahko prídeme k zákonom zachovania analogickým (1.17).

13.4 TRANSLÁCIE V ČASE A V PRIESTORE. ZACHOVANIE ENERGIE A HYBNOSTI

Jednoduchým príkladom transformácie fyzikálnej sústavy je jej translácia (posunutie) v priestore. Fyzikálne je táto transformácia definovaná tak, že prístroje, pripravujúce stavy, premiestnime (pri zachovaní ich orientácie) na iné miesto v priestore – posunieme ich o vektor $\boldsymbol{a}$. Našou úlohou je teraz „uhádnuť", aký operátor prislúcha takejto transformácii.[220] Odpoveď je takmer zrejmá v súradnicovej reprezentácii pre prípad jednej bezspinovej častice.

Uvažujme *pre* jednoduchosť posunutie o vzdialenosť ε v smere osi x. Ak bol stav pôvodnej sústavy daný vlnovou funkciou $\psi(x, y, z)$, potom posunutému stavu bude zodpovedať funkcia $\psi'(x, y, z)$, ktorá v bode (x, y, z) bude taká istá, aká bola funkcia ψ v bode $(x - \varepsilon, y, z)$. Platí teda

$$\psi'(x, y, z) = \psi(x - \varepsilon, y, z) \tag{1}$$

Pre infinitezimálne ε môžeme pravú stranu v (1) rozvinúť do Taylorovho radu a ponechať len lineárne členy. Dostaneme

$$\psi'(x, y, z) = \psi(x, y, z) - \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, y, z) = \left(1 - \mathrm{i}\frac{\varepsilon}{\hbar}\mathsf{p}_x\right) \psi(x, y, z) \tag{2}$$

[220] Translácie v priestore tvoria grupu: vykonanie dvoch translácií po sebe sa dá nahradiť jedinou transláciou.

kde $\mathsf{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ je operátor x-ovej zložky hybnosti. Transláciu o konečnú vzdialenosť v smere osi x si možno predstaviť ako zloženú z infinitezimálnych transformácií. Ak by sme postupovali obdobne ako pri rovniciach (11.2.13), dostali by sme pre transláciu o vzdialenosť a v smere osi x vyjadrenie

$$\psi'(x, y, z) = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{\varepsilon}{\hbar}\mathsf{p}_x\right)\psi(x, y, z) \tag{3}$$

V analógii so vzťahom (3) potom predpokladáme, že i vo všeobecnom prípade ľubovoľnej fyzikálnej sústavy platí pre jej transláciu o vektor $\boldsymbol{a}$:

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle \exp - \mathrm{i}\frac{\boldsymbol{a}.\hat{\boldsymbol{P}}}{\hbar}|\psi\rangle \tag{4}$$

kde $\hat{\boldsymbol{P}}$ je operátor celkovej hybnosti sústavy. Ak sústava je translačne invariantná, t. j. ak operátory hybnosti komutujú s hamiltoniánom, potom sa vektor hybnosti bude zachovávať. Zachovanie hybnosti teda súvisí bezprostredne s translačnou invariantnosťou.

Spomenieme na tomto mieste ďalší dôležitý zákon zachovania, a to zachovania energie, ktorý súvisí s invariantnosťou voči transláciám v čase. Translácie v čase sú transformácie, ktoré nezodpovedajú presne diskusii v prvom článku, kde sme uvažovali transformácie sústavy v danom okamihu. Fyzikálne si možno transláciu v čase názorne predstaviť tak, že prístroj pripravujúci stav sústavy „zapneme“ o dobu τ neskôr ako v pôvodnom prípade. Pre transformovaný stav potom platí

$$|\psi'(t)\rangle \to |\psi(t - \tau)\rangle \tag{5}$$

Operátor translácie v čase, definovaný vzťahom

$$|\psi'(t)\rangle \to \mathsf{U}|\psi(t)\rangle \tag{6}$$

nájdeme ľahko, ak si opäť všimneme infinitezimálnu transformáciu

$$|\psi'(t)\rangle \to |\psi(t - \varepsilon)\rangle = \left(1 - \varepsilon\frac{\partial}{\partial t}\right)|\psi(t)\rangle = \left(1 + \mathrm{i}\frac{\varepsilon}{\hbar}\mathsf{H}|\psi(t)\rangle\right) \tag{7}$$

kde sme využili Schrödingerovu rovnicu

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}|\psi(t)\rangle = \mathsf{H}|\psi(t)\rangle$$

Operátor translácie v čase bude (pre $\dfrac{\partial H}{\partial t} = 0!$)

$$\mathsf{U}(\tau) = \exp\left(+ \mathrm{i}\frac{\varepsilon}{\hbar}\mathsf{H}\tau \right)$$

Ak hamiltonián nezávisí explicitne od času, bude invariantnosti voči transláciám v čase (hamiltonián triviálne komutuje sám so sebou) zodpovedať zákon zachovania energie.

13.5 PRIESTOROVÁ A ČASOVÁ INVERZIA

Dôležitou symetriou mnohých kvantovomechanických sústav je priestorová inverzia. Názorná predstava o tranformácii priestorovej inverzie je o niečo ťažšia ako v doteraz diskutovaných prípadoch. Transformácie, ktoré sme zatiaľ skúmali sme si mohli predstaviť ako transformácie, ktoré vykonáme s (makroskopickými) prístrojmi „pripravujúcimi stavy“ ako s celkom (t.j. napríklad hotový prístroj „uchopíme“ a otočíme). Namiesto toho by sme však mohli skonštruovať (podľa rovnakého výrobného predpisu) identický prístroj v otočenej pozícii. Pri transformácii priestorovej inverzie môžeme použiť iba túto druhú predstavu, t. j. prístroj pripravujúci priestorovo inverzné stavy treba osobitne „skonštruovať“ podľa „výrobného predpisu“ zostaveného na základe výrobného predpisu pôvodného prístroja. Aby sme mohli tento „nový výrobný predpis“ špecifikovať (hoci len intuitívne), pozrieme sa napred, čo je to priestorová inverzia v klasickej fyzike, potom špecifikujeme jej kvantovomechanický význam a k transformácii prístrojov pripravujúcich stavy sa vrátime až na konci článku.

Uvažujme klasickú sústavu n bodových častíc bez vonkajších väzieb. Polohy častíc označíme $\boldsymbol{r}_i(x_i, y_i, z_i)$ a predpokladáme, že vzájomná interakcia i-tej a j-tej častice je daná potenciálom $V_{ij}(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|)$. Lagrangeova funkcia sústavy je:

$$L = \frac{1}{2}\sum_i m_i(\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2 + \dot{z}_i^2) - \frac{1}{2}\sum_i \sum_j{}' V_{ij}(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|) \tag{1}$$

kde $\sum_j{}'$ značí súčet s vynechaním člena $j = i$ a bodky znamenajú derivácie podľa času. Z Eulerových-Lagrangeových rovníc

$$m_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i = -\frac{1}{2}\nabla_i \sum_k \sum_i V_{kj}(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|) \qquad i = 1, 2, \ldots, n \tag{2}$$

vidno, že spolu s každým riešením $\{\boldsymbol{r}_i(t)\}_1^n$ bude riešením aj $\{\boldsymbol{r}_i'(t)\}_1^n$, ak

$$\boldsymbol{r}_i'(t) = -\boldsymbol{r}_i(t) \tag{3}$$

Hovoríme, že riešenie $\{\boldsymbol{r}_i'(t)\}_1^n$ vzniklo z pôvodného riešenia $\{\boldsymbol{r}_i(t)\}_1^n$ priestorovou inverziou a že sústava opísaná Lagrangeovou funkciou (1) je invariantná voči priestorovej inverzii.

Energia H, celková hybnosť $\boldsymbol{P}$ a celkový moment hybnosti $\boldsymbol{L}$ sú dané známymi vzťahmi

$$H = \frac{1}{2}\sum_i m_i \boldsymbol{v}_i^2 + \frac{1}{2}\sum_i \sum_j{}' V_{ij}(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|)$$

$$\boldsymbol{P} = \sum_i m_i \dot{\boldsymbol{r}}_i, \quad \boldsymbol{L} = \sum_i m_i \boldsymbol{r}_i \times \dot{\boldsymbol{r}}_i$$

Pri transformácii (3) sa uvedené veličiny zrejme transformujú podľa vzťahov

$$H \to H' = H, \quad \boldsymbol{P} \to \boldsymbol{P}' = -\boldsymbol{P}, \quad \boldsymbol{L} \to \boldsymbol{L}' = \boldsymbol{L} \tag{4}$$

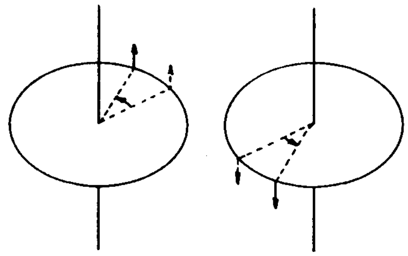
Výrazy H', $\boldsymbol{P}'$ a $\boldsymbol{L}'$ sú energia, hybnosť a moment hybnosti príslušné k riešeniu $\{\boldsymbol{r}_i'(t)\}$. Vektory, ktoré pri priestorovej inverzii menia znamienko, nazývame polárnymi vektormi (napr. $\boldsymbol{P}$), tie, ktoré znamienko nezmenia (napr. $\boldsymbol{L}$) nazývame axiálnymi. Transformáciu (3) si možno názorne predstaviť ako zrkadlenie, ale nie v obvyklom zmysle ako zrkadlenie voči rovine, ale voči bodu – začiatku súradnicovej sústavy. Pohyb transformovanej sústavy vyzerá ako zrkadlový (v uvedenom zmysle) obraz pohybu pôvodnej sústavy. Špeciálne je dobre si uvedomiť názorný význam vzťahu L' = L. Môžeme si predstaviť napríklad rotujúci disk a jeho priestorovo inverzný obraz (voči stredu disku). Na *obr. 13.1* je táto situácia nakreslená. Aby bol obrázok názornejší, na disku sú postavené dva predmety (šípky). Z toho, aká je poloha týchto predmetov na inverznom obraze vidno, že inverzný obraz rotuje v rovnakom zmysle ako pôvodný a odpovedá mu teda rovnaký moment hybnosti.

Pre úplnosť si ešte všimneme čo sa deje v prípade, že ide (stále o klasický) pohyb nabitých častíc vo vonkajšom elektromagnetickom poli. Pohybová rovnica jednej častice vo vonkajšom poli je daná vzťahom pre Lorentzovu silu

$$\mathrm{m}\ddot{\boldsymbol{r}} = q\boldsymbol{E} + q\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{5}$$

Ak (definitoricky) predpokladáme, že pri priestorovej inverzii sa náboj častice nemení, potom je podľa (5) zrejmé, že pohybové rovnice budú splnené aj po transformácii (3) ak súčasne transformujeme aj vonkajšie polia podľa vzťahu

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t) &\to \boldsymbol{E}'(\boldsymbol{r}, t) = -\boldsymbol{E}(-\boldsymbol{r}, t) \\ \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}, t) &\to \boldsymbol{B}'(\boldsymbol{r}, t) = +\boldsymbol{B}(-\boldsymbol{r}, t) \end{aligned} \tag{6}$$



Obr. 13.1

Čitateľ sa môže ľahko presvedčiť, že transformované polia $\boldsymbol{E}'$ *a* $\boldsymbol{B}'$ opäť spĺňajú Maxwellove rovnice, ak (v súlade s predpokladom o nemennosti náboja) na pravých stranách rovníc sa hustota náboja g nezmení a hustota prúdu $\boldsymbol{j}$ zmení pri priestorovej inverzii znamienko, t. j. $\rho'(\boldsymbol{r}, t) = \rho'(-\boldsymbol{r}, t)$, $\boldsymbol{j}'(\boldsymbol{r}, t) = -\boldsymbol{j}(-\boldsymbol{r}, t)$.

Na základe korešpondencie s klasickým prípadom potom priestorovou inverziou nazývame takú transformáciu sústavy

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \mathrm{U}_p|\psi\rangle \tag{7}$$

pri ktorej platia transformačné vzťahy typu (4), (6) pre stredné hodnoty. Pre bezspinovú časticu žiadame teda

$$\begin{aligned} \langle\psi'|\hat{\boldsymbol{r}}|\psi'\rangle &= -\langle\psi|\hat{\boldsymbol{r}}|\psi\rangle \\ \langle\psi'|\hat{\boldsymbol{p}}|\psi'\rangle &= -\langle\psi|\hat{\boldsymbol{p}}|\psi\rangle \\ \langle\psi'|\mathrm{H}|\psi'\rangle &= \quad\langle\psi|\mathrm{H}|\psi\rangle \\ \langle\psi'|\hat{\boldsymbol{L}}|\psi'\rangle &= \quad\langle\psi|\hat{\boldsymbol{L}}|\psi\rangle \end{aligned} \tag{8}$$

Pripomeňme pritom, že v pohybových rovniciach kvantovej mechaniky vystupujú namiesto intenzít elektromagnetického poľa príslušné potenciály. Transformácii (6) zodpovedajú transformácie potenciálov podľa vzťahu

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) &\rightarrow \boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r}, t) = -\boldsymbol{A}(-\boldsymbol{r}, t) \\ \varphi(\boldsymbol{r}, t) &\rightarrow \varphi'(\boldsymbol{r}, t) = +\varphi(-\boldsymbol{r}, t) \end{aligned} \tag{9}$$

Dve po sebe nasledujúce priestorové inverzie sú ekvivalentné transformácii identity, preto žiadame, aby platilo

$$\mathrm{U}_P\mathrm{U}_P = 1 \tag{10}$$

Okrem podmienky (10) predpokladáme, že operátor U_P je unitárny, t. j. platí

$$\mathsf{U}_P\mathsf{U}_P^+ = \mathsf{U}_P^+\mathsf{U}_P = \mathbf{1} \tag{11}$$

Na základe (10) sa možno ľahko presvedčiť o tom, že vlastnými hodnotami operátora U_P môže byť len +1 alebo −1. Naozaj ak pre stav $|\psi\rangle$ platí

$$\mathsf{U}_P|\psi\rangle = \eta|\psi\rangle$$

potom podľa (10)

$$|\psi\rangle = \mathsf{U}_P\mathsf{U}_P|\psi\rangle = \mathsf{U}_P\eta|\psi\rangle = \eta\mathsf{U}_P|\psi\rangle = \eta^2|\psi\rangle$$

a odtiaľ dostaneme $\eta^2 = 1$.

Zo vzťahov (10) a (11) je súčasne vidieť, že platí $\mathsf{U}_P = \mathsf{U}_P^+$ teda operátor U_P je hermitovský. Zodpovedá preto určitej fyzikálnej veličine (nemajúcej klasický analóg), ktorú voláme priestorová parita. V prípade, že transformácia priestorovej inverzie je symetriou sústavy, priestorová parita sa zachováva.

Tvar operátora priestorovej parity treba spravidla v každom konkrétnom prípade osobitne preskúmať. Ako príklad si uvedieme prípad jednej bezspinovej častice[221] v skalárnom vonkajšom potenciáli. Všimneme si pritom iba súradnicovú reprezentáciu; stav teda bude reprezentovať vlnová funkcia

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle \tag{12}$$

Explicitným výpočtom sa možno presvedčiť o tom, že podmienky (8), (10), (11) spĺňa operátor U_P definovaný vzťahom

$$\psi'(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\psi'\rangle = \langle\boldsymbol{r}|\mathsf{U}_P|\psi'\rangle = \psi(-\boldsymbol{r}) \tag{13}$$

Všimnime si bližšie prípad sféricky symetrického potenciálu.

Príslušné vlnové funkcie majú tvar

$$\Phi_{nlm}(\boldsymbol{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \tag{14}$$

kde $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ sú sférické funkcie. Pri inverzii $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$ sa sférické súradnice zmenia nasledovne

$$\vartheta \to \pi - \vartheta, \quad \varphi \to \varphi + \pi, \quad r \to r$$

Z definície sférických funkcií vyplýva (pozri článok 4.9)

$$Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \tag{15}$$

[221] S vnútornou paritou rovnou +1 (pozri diskusiu nižšie).

a preto platí

$$\Phi_{nlm}(-\boldsymbol{r}) = (-1)^l \Phi_{nlm}(\boldsymbol{r})$$

Parita stavu s orbitálnym momentom hybnosti l je teda $(-1)^l$.

Niekedy je užitočné považovať sústavy zložené z viacerých častíc za jedinú „časticu", najmä vtedy, keď sa štruktúra častice neprejavuje (napríklad pri opise rozptylu α-častíc na jadrách v Rutherfordovom experimente).

V prípadoch, keď sa štruktúra častice navonok bezprostredne neprejavuje, môžeme pozorovať dôsledky vnútorného (orbitálneho) pohybu subčastíc ako vnútorný moment hybnosti (spin) častice. Tento fakt sa potom odrazí aj na transformačných vlastnostiach vlnovej funkcie častice pri rotáciách. Podobne sa musí prejaviť i parita súvisiaca s orbitálnym pohybom subčastíc pri transformáciách priestorovej inverzie. Hovoríme potom o vnútornej parite opisovanej zloženej častice. Podľa toho, či vnútorná parita je +1 alebo −1 transformuje sa vlnová funkcia podľa vzťahov

$$\psi(\boldsymbol{r}) \to \psi'(\boldsymbol{r}) = +\psi(-\boldsymbol{r}) \tag{16}$$

alebo

$$\psi(\boldsymbol{r}) \to \psi'(\boldsymbol{r}) = -\psi(-\boldsymbol{r})$$

Upozornime však, že v prípade zápornej vnútornej parity nemôžeme ešte z tohto faktu usudzovať na „zloženosť" častice, môže ísť o „pravú" vnútornú paritu −1.

Vráťme sa ešte k problému fyzikálnej realizácie priestorovoinverzného stavu.[222] Takýto stav budeme musieť pripraviť pomocou prístroja, ktorý je skonštruovaný ako inverzný („zrkadlový") obraz pôvodného prístroja pripravujúceho stavy, t. j. napríklad namiesto skrutiek s pravotočivým závitom treba použiť skrutky s ľavotočivým závitom a pod. Treba si však uvedomiť, že nie v každej situácii vystačíme s takýmito „zmenami vo výrobnom postupe" na makroskopiskej úrovni. V niektorých situáciách môže byť podstatné, aby napríklad organické molekuly, ktoré stáčajú rovinu polarizovaného svetla doľava, boli nahradené (chemicky) rovnakými molekulami, ktoré stáčajú túto rovinu doprava. Niet apriórneho dôvodu predpokladať, že sa to vždy (aspoň teoreticky) dá realizovať. V skutočnosti to ani nie je vždy možné: napríklad neutrína vyskytujúce sa v prírode sú len „ľavotočivé" (t. j. priemet spinu na smer ich pohybu je −1/2). Ak vo funkcii uvažovaného „prístroja" majú podstatnú úlohu neutrína, potom príslušný inverzný prístroj nemožno skonštruovať, lebo by sme museli použiť pravotočivé neutrína, ktoré

[222] Nasledujúcu diskusiu treba chápať ako jednoduchý „myšlienkový experiment".

neexistujú.[223] Znamená to potom, že transformácia priestorovej inverzie hoci matematicky sformulovateľná, sa nedá fyzikálne realizovať. V tomto prípade priestorová inverzia neexistuje ani ako transformácia, a teda nemôže byť ani symetriou.

Skutočnosť, že svet nie je úplne symetrický voči zámene ľavého na pravé sa prejavuje navonok ako nezachovanie parity v slabých interakciách. Tento fakt bol teoreticky predpovedaný T. D. Leeom a C. N. Yangom a experimentálne overený v pokusoch C. S. Wu v roku 1956. Peknú diskusiu o nezachovaní parity možno nájsť v už viackrát citovaných Feynmanových prednáškach.

Na záver si všimneme ešte jednu zaujímavú symetriu – časovú *inverziu*. Tento názov už je ustálený, ale výstižnejšie by bolo hovoriť o obrátení pohybu. Začneme s diskusiou obrátenia pohybu v klasickej mechanike.

Riešenie pohybových rovníc (2) je jednoznačne určená zadaním začiatočných podmienok

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}_i(t=0) &= \boldsymbol{r}_{i0} \\ \dot{\boldsymbol{r}}_i(t=0) &= \boldsymbol{v}_{i0} \end{aligned} \tag{17}$$

pričom toto riešenie je určené jednoznačne tak pre časy $t > 0$ ako pre časy $t < 0$.

Ak namiesto podmienok (17) zvolíme začiatočné podmienky

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}_i'(t=0) &= \boldsymbol{r}_{i0} \\ \dot{\boldsymbol{r}}_i'(t=0) &= -\boldsymbol{v}_{i0} \end{aligned} \tag{18}$$

dostaneme zas jednoznačne určené riešenie rovníc (2). Toto riešenie označíme ako $\boldsymbol{r}_i'(t)$. Riešenia $\boldsymbol{r}_i(t)$ a $\boldsymbol{r}_i'(t)$ navzájom súvisia vzťahom

$$\boldsymbol{r}_i'(t) = \boldsymbol{r}_i(-t) \tag{19}$$

Vzťah (19) je dôsledkom nasledujúcej vlastnosti rovníc (2): ak $\boldsymbol{r}_i(t)$ je riešením (2), potom aj $\boldsymbol{r}_i'(t) = \boldsymbol{r}_i(-t)$ je riešením (2). Formálne to vidno z toho, že rovnice (2) sa nezmenia pri zámene[224] $t \to t' = -t$.

Názorná interpretácia vzťahu (19) je jednoduchá. Predstavme si, že priebeh riešenia $\boldsymbol{r}_i(t)$ pre $-t_1 < t < 0$ máme zachytený na filme. Ak tento film pustíme v obrátenom smere (od konca k začiatku) uvidíme presne to isté ako keby sme pustili filmový záznam riešenia $\boldsymbol{r}_i'(t)$ pre $0 < t < t_1$. *Riešenie* $\boldsymbol{r}_i'(t)$ nazývame časovou inverziou riešenia $\boldsymbol{r}_i(t)$.

[223] Prinajmenej neboli doteraz pozorované a nevystupujú ani v teórii slabých interakcií, ktorá je považovaná za štandardnú. To pravda, neznamená, že neexistujú teórie špekulatívnejšieho charakteru, v ktorých sa vyskytujú pravotočivé neutrína.

[224] Hovoríme tiež, že pohybové rovnice (2) sú invariantné voči inverzii času. Fyzikálnym vyjadrením tejto formálnej skutočnosti je vzťah (19) medzi riešeniami $\boldsymbol{r}_i(t)$ a $\boldsymbol{r}_i'(t)$.

Vzťah medzi riešeniami $\boldsymbol{r}_i(t)$ a $\boldsymbol{r}_i'(t)$ môžeme opísať aj nasledujúcim spôsobom, podobným tomu, ktorý použijeme neskôr v kvantovej mechanike. Stav sústavy častíc v klasickej mechanike je daný súradnicami a hybnosťami všetkých častíc. Výraz $(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{p}_i)$ budeme na chvíľu nazývať stavom sústavy. T-obráteným (alebo T-invertovaným) stavom k $(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{p}_i)$ nazveme stav $(\boldsymbol{r}_i', \boldsymbol{p}_i')$, pričom

$$(\boldsymbol{r}_i', \boldsymbol{p}_i') \equiv T(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{p}_i) = (\boldsymbol{r}_i, -\boldsymbol{p}_i) \tag{20}$$

Ak riešenie $\boldsymbol{r}_i(t)$ pohybových rovníc (2) prebieha istou postupnosťou stavov, potom riešenie $\boldsymbol{r}_i'(t)$ viazané s $\boldsymbol{r}_i(t)$ vzťahom (19) prebieha v opačnom poradí postupnosťou T-obrátených stavov. Stručne je to znázornené v nasledujúcej schéme

$$\begin{array}{lll}
(\boldsymbol{r}_i(\tau),\ \boldsymbol{p}_i(\tau)) & (\boldsymbol{r}_i'(\tau),\ \boldsymbol{p}_i'(\tau)) & = T(\boldsymbol{r}_i(-\tau),\ \boldsymbol{p}_i(-\tau)) \\
\vdots & & \\
(\boldsymbol{r}_i(0),\ \boldsymbol{p}_i(0)) & (\boldsymbol{r}_i'(0),\ \boldsymbol{p}_i'(0)) & = T(\boldsymbol{r}_i(0),\ \boldsymbol{p}_i(0)) \\
\vdots & & \\
(\boldsymbol{r}_i(-\tau),\ \boldsymbol{p}_i(-\tau)) & (\boldsymbol{r}_i'(-\tau),\ \boldsymbol{p}_i'(-\tau)) & = T(\boldsymbol{r}_i(\tau),\ \boldsymbol{p}_i(\tau))
\end{array}$$

kde na ľavej strane máme postupnosť stavov, ktorou smerom odspodu nahor prebieha riešenie $\boldsymbol{r}_i(t)$, napravo máme postupnosť stavov, ktorou tiež smerom odspodu nahor prechádza riešenie $\boldsymbol{r}_i'(t)$. Pri každom zo stavov riešenia $\boldsymbol{r}_i'(t)$ sme zapísali aj stav, s ktorým je $\boldsymbol{r}_i(t)$, $\boldsymbol{r}_i'(t)$ združený T-obrátením.

Vzťah riešení $\boldsymbol{r}_i(t)$, $\boldsymbol{r}_i'(t)$ spĺňajúcich (19) má dôležitú vlastnosť, ktorú možno povýšiť na definíciu invariantnosti sústavy voči obráteniu pohybu (invariantnosť voči inverzii času). Táto vlastnosť je znázornená v nasledujúcej schéme

$$\begin{array}{ccc}
(\boldsymbol{r}_i(0), \boldsymbol{p}_i(0)) & \xrightarrow{T} & (\boldsymbol{r}_i'(0), \boldsymbol{p}_i'(0)) = T(\boldsymbol{r}_i(0), \boldsymbol{p}_i(0)) \\
\Big\uparrow \text{ pohybové rovnice (2)} & & \Big\downarrow \text{ pohybové rovnice (2)} \\
(\boldsymbol{r}_i(-\tau), \boldsymbol{p}_i(-\tau)) & \xrightarrow{T} & (\boldsymbol{r}_i'(\tau), \boldsymbol{p}_i'(\tau)) = T(\boldsymbol{r}_i(-\tau), \boldsymbol{p}_i(-\tau))
\end{array} \tag{21}$$

Nech v čase $t = -\tau$ je stavom sústavy $(\boldsymbol{r}_i(-\tau), \boldsymbol{p}_i(-\tau))$. Tento stav dáva určité začiatočné podmienky pre rovnice (2). Rovnice (2) spolu s týmito začiatočnými podmienkami určujú jednoznačne riešenie $\boldsymbol{r}_i(t)$. Sledujúc časový vývoj riešenia (ľavá strana schémy) prídeme v čase $t = 0$ k stavu $(\boldsymbol{r}_i(0), \boldsymbol{p}_i(0))$. Pomocou T-obrátenia stavu prejdeme od $(\boldsymbol{r}_i(0), \boldsymbol{p}_i(0))$ k stavu $(\boldsymbol{r}_i'(0), \boldsymbol{p}_i'(0))$. Tento stav určuje isté začiatočné podmienky pre rovnice (2). Príslušné riešenie označíme ako $\boldsymbol{r}_i'(t)$. Po čase τ týmto riešením prídeme k stavu $(\boldsymbol{r}'_i(\tau), \boldsymbol{p}'_i(\tau))$. Ak je tento stav rovný T-invertovanému začiatočnému stavu $(\boldsymbol{r}_i(-\tau), \boldsymbol{p}_i(-\tau))$ hovoríme, že sústava je invariantná voči obráteniu pohybu (invariantná voči inverzii času). V klasickej mechanike je táto požiadavka splnená. Poznamenajme, že schéma (21) je len formálnym prepisom toho, čo sme vraveli o vzťahu riešení $\boldsymbol{r}_i(t)$ a $\boldsymbol{r}_i'(t)$ v texte medzi rovnicami (19) a (20) v ktorom sme hovorili o púšťaní filmov s obidvoma riešeniami.

V kvantovej mechanike postupujeme pri skúmaní obrátenia pohybu analogicky. Budeme sa zaoberať len tým najjednoduchším prípadom – jednou bezspinovou časticou v poli s potenciálnou energiou $V(\boldsymbol{r})$. Najprv zavedieme operátor T prevádzajúci ľubovoľný stav $|\psi\rangle$ na stav $|\psi'\rangle$, ktorý je T-obrátením stavu $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \mathsf{T}|\psi\rangle \tag{22}$$

V analógii s (20) žiadame, aby pre ľubovoľný stav $|\psi\rangle$ platilo

$$\begin{aligned} \langle \psi'|\hat{\boldsymbol{r}}|\psi'\rangle &= \langle \psi|\hat{\boldsymbol{r}}|\psi\rangle \\ \langle \psi'|\hat{\boldsymbol{p}}|\psi'\rangle &= -\langle \psi|\hat{\boldsymbol{p}}|\psi\rangle \end{aligned} \tag{23}$$

Po dosadení (22) do (23) dostávame pre operátor T podmienky

$$\begin{aligned} \mathsf{T}^{+}\hat{\boldsymbol{r}}\mathsf{T} &= \hat{\boldsymbol{r}} \\ \mathsf{T}^{+}\hat{\boldsymbol{p}}\mathsf{T} &= -\hat{\boldsymbol{p}} \end{aligned} \tag{24}$$

Navyše žiadame, aby operátor T nemenil absolútnu hodnotu skalárneho súčinu

$$|\langle \mathsf{T}\psi_1|\mathsf{T}\psi_2\rangle| = |\langle \psi_1|\psi_2\rangle| \tag{25}$$

pre ľubovoľné $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$. Vďaka (25) sa nemení pri T-obrátení ani norma stavu: $\langle \mathsf{T}\psi|\mathsf{T}\psi\rangle = \langle \psi|\psi\rangle$.

Najprirodzenejšie by bolo tak ako pri iných symetriách aj tu žiadať, aby T bolo unitárnym lineárnym operátorom. Ale to nie je možné. Predpokladajme, že existuje lineárny unitárny operátor T, spĺňajúci podmienky (24). Násobme vzťah

$$\mathsf{x}\mathsf{p}_x - \mathsf{p}_x\mathsf{x} = \mathrm{i} \tag{26}$$

zľava T^+ a sprava T. Dostaneme tak

$$\mathsf{T}^+\mathsf{x}\ \mathsf{T}\mathsf{T}^+\mathsf{p}_x\mathsf{T} - \mathsf{T}^+\mathsf{p}_x\mathsf{T}\mathsf{T}^+\mathsf{x}\mathsf{T} = \mathsf{T}^+\mathrm{i}\mathsf{T} \tag{27}$$

Po využití (24) a $\mathsf{T}^+\mathrm{i}\mathsf{T} = \mathrm{i}$ máme z (27)

$$-\mathsf{x}\mathsf{p}_x + \mathsf{p}_x\mathsf{x} = \mathrm{i} \tag{28}$$

čo protirečí (26).

Na uvedené protirečenie nenarazíme, ak za T volíme antiunitárny operátor. Uveďme si najprv niekoľko vlastností takýchto operátorov. Operátor T nazývame antilineárnym ak platí

$$\mathsf{T}\alpha|\psi\rangle = \alpha^*\mathsf{T}|\psi\rangle$$

$$\mathsf{T}(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = \mathsf{T}|\psi\rangle + \mathsf{T}|\varphi\rangle$$

pre ľubovoľné stavy $|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle$ a ľubovoľné komplexné číslo a. Pre antilineárne operátory môžeme prirodzene definovať operáciu hermitovského združenia. Operátor T^+ nazývame hermitovsky združeným k antilineárnemu operátoru T ak pre ľubovoľné stavy $|\psi\rangle$, $|\Phi\rangle$ platí

$$\langle\Phi'|\psi\rangle = \langle\Phi|\mathsf{T}^+|\psi\rangle^* \quad \text{kde } |\Phi'\rangle = \mathsf{T}|\psi\rangle$$

Ľahko sa dá ukázať, že operátor T^+ je opäť antilineárny. Antilineárny operátor T sa nazýva antiunitárny ak platí

$$\mathsf{T}\mathsf{T}^+ = \mathsf{T}^+\mathsf{T} = 1$$

Ľahko vidno, že pre antiunitárny operátor T ostáva vzťah (25) v platnosti. Ak predpokladáme, že operátor T-inverzie je antiunitárny, potom na pravej strane vo vzťahu (27) dostaneme

$$\mathsf{T}^+\mathrm{i}\mathsf{T} = \mathsf{T}^+\mathsf{T}\mathrm{i}^* = -\mathrm{i}$$

a namiesto vzťahu (28) dostaneme už konzistentne

$$-\mathsf{x}\mathsf{p}_x + \mathsf{p}_x\mathsf{x} = -\mathrm{i}$$

V x-reprezentácii operátor T-obrátenia definujeme vzťahom

$$\psi'(\boldsymbol{r}) = \mathsf{T}\psi(\boldsymbol{r}) = \psi^*(\boldsymbol{r})$$

a podľa predchádzajúcej definície platí $\mathsf{T}^+ = \mathsf{T}$. Ľahko sa presvedčíme, že tento operátor spĺňa všetky požadované vlastnosti. Zmena znamienka v druhej z rovníc (24) pochádza z toho, že v x-reprezentácii $\mathsf{p}_i = -i\hbar\partial/\partial x$, a $\mathsf{T}^+\mathrm{i}\mathsf{T} = -\mathrm{i}$. Pre skalárny súčin nájdeme

$$\langle\mathsf{T}\Phi|\mathsf{T}\psi\rangle = \int(\mathsf{T}\Phi)^*\mathsf{T}\psi\,\mathrm{d}x = \int\Phi\psi^*\,\mathrm{d}x = \langle\psi|\Phi\rangle = \langle\Phi|\psi\rangle^*$$

Teraz sformulujeme kritérium invariantnosti kvantovomechanickej sústavy voči T-inverzii. Nech v čase $t = -\tau < 0$ je sústava v stave $|\psi(-\tau)\rangle$. Necháme sústavu vyvíjať sa v čase podľa Schrödingerovej rovnice do času $t = 0$ a prídeme tak k stavu $|\psi(0)\rangle = \exp(-\mathrm{i}\mathsf{H}\tau/\hbar)|\psi(-\tau)\rangle$. Teraz urobme T-inverziu stavu a dostaneme tým stav $|\psi'(0)\rangle = \mathsf{T}|\psi(0)\rangle$. Tento stav sa bude s časom meniť podľa Schrödingerovej rovnice a v čase $t = \tau$ budeme mať stav

$$|\psi'(\tau)\rangle = \exp(-\mathrm{i}\mathsf{H}\tau/\hbar)|\psi'(0)\rangle$$

Ak je tento stav T-inverziou stavu $|\psi(-\tau)\rangle$, z ktorého sme vyšli a ak toto platí pre každý stav $|\psi(-\tau)\rangle$, hovoríme, že sústava je invariantná voči *T*-inverzii. Postup je znázornený v nasledujúcej schéme

$$\begin{array}{ccc} |\psi(0)\rangle & \xrightarrow[T]{} & |\psi'(0)\rangle = \mathsf{T}|\psi(0)\rangle \\ e^{-i\mathsf{H}\tau/\hbar} \uparrow & & \downarrow e^{-i\mathsf{H}\tau/\hbar} \\ |\psi(-\tau)\rangle & \xrightarrow[T]{} & |\psi'(-\tau)\rangle = e^{-i\mathsf{H}\tau/\hbar}|\psi(-\tau)\rangle \end{array} \tag{30}$$

Ak je sústava invariantná voči *T*-inverzii musíme dostať postupom: (začíname vľavo dolu) „nahor, doprava, dolu" rovnaký výsledok ako jediným krokom doprava.

Schéma (30) je analógiou podobnej schémy v klasickej mechanike (21) a je blízka k všeobecnej schéme (1.8). Fyzika za touto schémou je rovnaká ako príklad s púšťaním filmov. V kvantovej mechanike však vývoj stavu nemôžeme „filmovať" lebo hocijaké meranie by menilo stav sústavy.

Požiadavka invariantnosti sústavy voči *T*-inverzii je podľa predchádzajúceho ekvivalentná podmienke

$$|\psi'(-\tau)\rangle \equiv e^{-i\mathsf{H}\tau/\hbar}\mathsf{T}e^{-i\mathsf{H}\tau/\hbar}|\psi(-\tau)\rangle = \mathsf{T}|\psi(-\tau)\rangle$$

a pretože to má platiť pre každé $|\psi(-\tau)\rangle$ máme odtiaľ po elementárnej úprave

$$\mathsf{T}^{+}e^{-i\mathsf{H}\tau/\hbar}\mathsf{T}e^{-i\mathsf{H}\tau/\hbar} = \mathbf{1} \tag{31}$$

Pretože $\mathsf{T}^{+}i\mathsf{H}\mathsf{T} = -i\mathsf{T}^{+}\mathsf{H}\mathsf{T}$ môžeme prepísať (31) do tvaru

$$e^{+i(\mathsf{T}^{+}\mathsf{H}\mathsf{T})\tau/\hbar}e^{-i\mathsf{H}\tau/\hbar} = \mathbf{1} \tag{31$'$}$$

z čoho máme hneď (stačí vziať infinitezimálne τ)

$$\mathsf{T}^{+}\mathsf{H}\mathsf{T} = \mathsf{H} \tag{32}$$

Ak platí (32) potom je (31′) splnené pri ľubovoľnom τ.

Pre jedinú časticu v poli s potenciálnou energiou $V(\boldsymbol{r})$ je stav častice daný vlnovou funkciou $\psi(\boldsymbol{r})$ a T je operátorom komplexného združenia $\mathsf{T}\psi(\boldsymbol{r}) = \psi^*(\boldsymbol{r})$. Výraz $\mathsf{T}^{+}\mathsf{H}\mathsf{T} = \mathsf{H}$ je operátorom komplexne združeným k H. Požiadavka (32) potom vedie k $\mathsf{H}^* = \mathsf{H}$. Pre uvažovaný prípad jednej častice

$$\mathsf{H} = -\frac{\hbar}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r}) \tag{33}$$

a skutočne platí $\mathsf{H}^* = \mathsf{H}$. Sústava je teda invariantná voči *T*-inverzii.

Ak $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ je riešením Schrödingerovej rovnice

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = \left\{-\frac{\hbar}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r})\right\}\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{34}$$

potom riešením, ktoré prebieha v opačnom poradí postupnosť T-inverzných stavov je

$$\psi'(\boldsymbol{r}, t) \equiv \mathsf{T}\psi(\boldsymbol{r}, -t) = \psi^*(\boldsymbol{r}, -t) \tag{35}$$

Ľahko sa presvedčíme o tom, že $\psi^*(\boldsymbol{r}, -t)$ je skutočne riešením Schrödingerovej rovnice (34). Stačí urobiť komplexné združenie (34) a formálnu zámenu $t \to t' = -t$.

Vzťah medzi riešeniami $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ a $\psi'(\boldsymbol{r}, t) = \psi^*(\boldsymbol{r}, -t)$ je takto rovnaký ako vzťah medzi riešeniami $\boldsymbol{r}_i(t)$ a $\boldsymbol{r}_i'(t) = \boldsymbol{r}_i(-t)$ v klasickej fyzike.

13.6 ZHRNUTIE

Transformácii fyzikálnej sústavy zodpovedá v Hilbertovom priestore stavov transformácia stavového vektora

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \mathsf{U}|\psi\rangle$$

kde U je unitárny (resp. antiunitárny) operátor transformácie. V prípade, že operátor transformácie komutuje s hamiltoniánom

$$[\mathsf{U}, \mathsf{H}] = 0$$

hovoríme, že transformácia je symetriou sústavy. Prítomnosť symetrie vedie na zákon zachovania veličiny A definovanej vzťahom

$$\mathsf{U} = \exp(\mathrm{i}\mathsf{A})$$

V prípade, že uvažujeme grupu transformácií, potom operátory U priradené jednotlivým transformáciám tvoria reprezentáciu grupy na Hilbertovom priestore stavov.

V prípade grupy symetrie stacionárne stavy prislúchajúce určitej vlastnej hodnote energie tvoria bázu reprezentácie tejto grupy.

V prípade Lieovej grupy môžeme príslušné operátory parametrizovať v tvare

$$\mathsf{U}(\alpha_1, \ldots, \alpha_r) = \exp(-\mathrm{i}\Sigma \mathsf{A}_i \alpha_i)$$

kde α_i sú parametre Lieovej grupy a hermitovské operátory A_i sú generátory grupy, spĺňajúce komutačný vzťah

$$[\mathsf{A}_i, \mathsf{A}_j] = \mathrm{i}\sum_l f^l_{ij} \mathsf{A}_l$$

kde f^l_{ij} sú štruktúrne konštanty grupy.

Symetria voči r-parametrickej Lieovej grupe vedie na r zákonov zachovania veličín A_i.

13.7 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Ukážte, že ak lineárny operátor zachováva normu vektorov, potom zachováva aj skalárny súčin
N á v o d: preskúmajte transformáciu vektorov typu $|\Phi\rangle + \lambda|\psi\rangle$ kde λ je vhodne číslo.

2. Ukážte, že spinové stavy dvoch častíc so spinom 1/2 v báze $|s_1, s_{z1}, s_2, s_{z2}\rangle$ tvoria reducibilnú reprezentáciu grupy rotácií. Ukážte, že v báze $|j, m, s_1, s_2\rangle$ sa táto reprezentácia rozpadne na dve ireducibilné reprezentácie. Určte ich rozmer.
N á v o d: pripomeňte si článok o CG koeficientoch z 11 kapitoly.

3. Ukážte, že ireducibilná reprezentácia abelovskej grupy (t. j. grupy, v ktorej grupová operácia je komutatívna) je nevyhnutne jednorozmerná.

4. Ak je sústava invariantná voči priestorovej inverzii a jej hamiltonián má nedegenerované spektrum, potom všetky stacionárne stavy majú určitú paritu Dokážte toto tvrdenie.

5. Sústava je opísaná hamiltoniánom invariantným voči rotáciám okolo osi z. Nech v tejto sústave existuje stacionárny stav $|\psi\rangle$ s energiou E Ukážte, že sústava má aj stacionárny stav s rovnakou energiou s nulovým priemetom momentu hybnosti na os z.
N á v o d: symbolom $\mathsf{R}_z(\varphi)|\psi\rangle$ označme stav, ktorý dostaneme zo stavu $|\psi\rangle$ rotáciou o uhol φ okolo osi z. Preskúmajte stav

$$|\Phi\rangle = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \, \mathsf{R}_z(\varphi)|\psi\rangle$$

6. Ukážte, že štruktúrne koeficienty grupy rotácii ε_{ijk} môžeme chápať ako generátory určitej (trojrozmernej) reprezentácie tejto grupy v tomto zmysle:
Zaveďme tri matice J_1, J_2, J_3 s maticovými elementmi

$$(\mathsf{J}_i)_{jk} = \varepsilon_{ijk}$$

potom sa dá ukázať, že matice J_i spínajú príslušne komutačné vzťahy.

7. V klasickej mechanike sa ťažisko izolovanej sústavy viacerých (interagujúcich) častíc pohybuje rovnomerne priamočiaro Sformulujte a dokážte kvantovomechanický analóg tohto tvrdenia.
N á v o d: Využite Ehrenfestove vety a fakt, že takáto sústava je translačne invariantná.

8. Ukážte, že Maxwellove rovnice sú invariantné voči transformácii priestorovej parity danej vzťahmi (5.6).

9. Helicita častice je definovaná ako priemet spinu častice do smeru jej hybnosti – po formálnej stránke je jej teda v p-priestore priradený operátor

$$\mathsf{h} = \boldsymbol{S}.\boldsymbol{p}/|\boldsymbol{p}|$$

Ako sa helicita transformuje pri P-inverzii?

10. Aká je „vnútorná parita“ častice s „vnútorným“ momentom hybnosti 1, ak ide v skutočnosti o viazaný stav
a) dvoch bezspinových častíc,
b) dvoch častíc so spinom 1/2 v tripletnom stave,
c) dvoch častíc so spinom 1/2 v singletnom stave.

11. Interakciu dvoch neutrónov pri nízkych energiách možno opísať potenciálom, ktorý je skalár voči rotáciám sústavy a závisí od vzájomnej vzdialenosti $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ dvoch neutrónov, od ich spinov $\boldsymbol{\sigma}_1$, $\boldsymbol{\sigma}_2$ a od orbitálneho momentu hybnosti $\boldsymbol{L}$. Niektoré členy, ktoré by mohli prispievať k takémuto potenciálu sú

$$V_1(\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2).\boldsymbol{L}V_2(\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2).\boldsymbol{L}V_3(\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2).\boldsymbol{r}\, V_4(\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_1.\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2.\boldsymbol{r})V_5(\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_1.\boldsymbol{\sigma}_2)V_6(\boldsymbol{r})$$

Ktoré z potenciálov $V_i(\boldsymbol{r})$ musia byť nulové, ak sú silné interakcie invariantné voči P-inverzii?

12. V klasickom experimente profesorky Wu a spolupracovníkov (prvé experimentálne potvrdenie nezachovania parity v slabých interakciách) bol študovaný rozpad jadra $^{60}_{27}Co$ v silnom vonkajšom magnetickom poli pri nízkej teplote. Toto jadro má spin 5/2 a pomerne veľký magnetický moment. Nízke teploty sú potrebné na to, aby istá časť jadier bola orientovaná. Elektróny z rozpadu

$$^{60}_{27}\mathrm{Co} \rightarrow ^{60}_{28}\mathrm{Ni} + e^- = \bar{\nu}$$

vyletovali prevažne proti smeru vonkajšieho magnetického poľa. Tento fakt dokázal neinvariantnosť slabých interakcií voči priestorovej inverzii. Prečo?