

Lieovy grupy ve fyzice

Gerardus 't Hooft^{1*}

1. Úvod.....	2
2. Kvantová mechanika a rotační invariance	7
3. Grupa rotací ve třech dimenzích	16
4. Více o reprezentacích	24
5. Žebříkové operátory	34
6. Grupa $SU(2)$	39
7. Spin a amplituda rozptylu.....	47
8. Isospin	54
9. Vodíkový atom.....	57
10. Grupa $SU(3)$	64
11. Reprezentace $SU(N)$; Youngovy diagramy	71
A. Přehled některých vlastností matic	72
B. Derivování matic	74
C. Funkce matic	75
D. Campbellova – Bakerova – Hausdorfova formule	76
E. Skalární součin, unitární a hermiteovské matice.....	81

¹ Tento text je založen na poznámkách M. Veltmana, později v některých částech upravených G. 't Hooftem a B. de Wittem. Po roce 1987/88 byl kurs dále rozšířen.

* Z textu přednášek Lie-Groepen in de Fysica pro Instituut voor Theoretische Fysica, Universiteit Utrecht, Faculteit Natuur- en Sterrenkunde přeložil Michal Lenc.

1. Úvod

Mnoho systémů, které studujeme v přírodních vědách vykazuje určitý druh symetrie, a řada „přírodních zákonů“, které známe, je invariantní vůči jistým transformacím. Množina všech možných transformací určité symetrie vytváří to, co matematici nazývají „grupa“. Tak zrcadlení v rovině vytváří grupu, která má dva prvky: zrcadlení a identitu. Ale také množina trojrozměrných rotací, množina Lorentzových transformací nebo množina trojrozměrných translací jsou grupy, které ale nyní sestávají z nekonečného množství prvků. Ze zřejmých důvodů se grupy s konečným počtem prvků nazývají diskrétní; grupy transformací, které spojitě závisí na řadě parametrů se nazývají spojité grupy.

Symetrie systému vede k určitým vztahům mezi pozorovatelnými veličinami, které jsou splněny s nekonečně vysokou přesností a které nezávisí na povaze sil působících v tomto systému. V atomu vodíku například zjištění, že energie některých různých stavů jsou přesně stejné je důsledkem rotační invariance tohoto systému. Často se také stává, že symetrie fyzikálního systému se realizuje pouze přibližně. Nekonečně rozlehlý krystal je například invariantní vůči translaci o násobek mřížkové vzdálenosti atomů. Ve skutečnosti má krystal konečné rozměry, což narušuje zmíněnou translační symetrii. Nicméně, obsahuje-li krystal dostatečně velký počet atomů, má toto narušení jen malý vliv na ty jeho vlastnosti, které nesouvisí právě s povrchovou strukturou.

Jiné příklady symetrie, které platí pouze přibližně se najdou ve fyzice elementárních částic. Tzv. Δ^+ částice, jeden z excitovaných stavů nukleonu, se rozpadá na nukleon a další částí, π meson, stručně pion. Existují dva druhy nukleonů, proton a neutron, a tři druhy π mesonů, elektricky nabitě piony π^+ a π^- a neutrální pion π^0 . Protože elektrický náboj se při rozpadu Δ^+ musí zachovávat, jsou možné dva různé způsoby rozpadu:

$$\Delta^+ \rightarrow n\pi^+ \text{ nebo } \Delta^+ \rightarrow p\pi^0 . \quad (1.1)$$

Je nápadné, že druhý způsob rozpadu se vyskytuje dvakrát častěji než první, skutečnost, kterou nelze vysvětlit rozdílem v elektrickém náboji produktů rozpadu. Přirozené vysvětlení faktoru 2 plyne ze symetrie. Není to tak podivné, jak se zdá na první pohled, protože protony a neutrony mají téměř stejnou hmotnost, stejně jako zmíněné tři druhy pionů a také čtyři druhy Δ částic, které se vyskytují v přírodě (viz Tabulka 1). Tuto shodu hmotností, a jak uvidíme později i faktor

2 ve dvou způsobech rozpadu (1.1), je možno vysvětlit za předpokladu, že příroda je invariantní vůči tzv isospinové transformaci. Termín isobarický spin, zkráceně isospin, zavedl v roce 1932 Heisenberg, který byl zaujat skutečností, že proton a neutron mají skoro stejnou hmotnost a až na různý elektrický náboj jsou shodné i jejich další vlastnosti. Nukleony tedy tvoří dublet, podobně jako dvě možné orientace spinu elektronu tvoří dublet (odtud název isobarický spin). Později se ukázalo, že obecně elementární částice s téměř shodnými hmotnostmi mohou být zařazeny do tzv isospinových multiplétů. Tak nukleony tvoří isospinový dublet, piony isospinový triplet a Δ částice isospinový kvadruplet.

Tabulka 1: Hmotnosti nukleonů, pionů a Δ částic v MeV/c^2 .

nukleony	Π mesony	Δ částice
$m_p \approx 938 \text{ MeV}/c^2$	$m_{\pi^+} \approx 140 \text{ MeV}/c^2$	$m_{\Delta^{++}} \approx 1231 \text{ MeV}/c^2$
$m_p \approx 939 \text{ MeV}/c^2$	$m_{\pi^0} \approx 135 \text{ MeV}/c^2$	$m_{\Delta^+} \approx 1232 \text{ MeV}/c^2$
	$m_{\pi^-} \approx 140 \text{ MeV}/c^2$	$m_{\Delta^0} \approx 1233 \text{ MeV}/c^2$
		$m_{\Delta^-} \approx 1235 \text{ MeV}/c^2$

Částice v daném multiplétu mají všechny přibližně stejnou hmotnost, ale různý elektrický náboj. Náboje jsou uvedeny v tabulce: žádné dvě částice v multiplétu nemají stejný náboj a částice mohou být vždy seřazeny tak, že se dvě sousední částice v multiplétu liší právě o jeden elementární náboj.

Je zřejmé, že isospinová invariance může být přinejlepším přibližná, protože hmotnosti nukleonů, pionů a Δ částic nějakým způsobem závisí na elektrickém náboji částic. Rozdíly hmotností uvnitř multiplétu jsou pouze v řádu několika procent, což je obecně stupeň přesnosti, který očekáváme od teoretických odhadů založených na invarianci isospinu.

Předchozí příklad se týká aplikace teorie grup ve fyzice elementárních částic, ale invariantní vlastnosti hrají velkou roli skoro v každé oblasti fyziky. V atomové fyzice často musíme uvažovat o důsledcích rotační invariance, v jaderné fyzice počítat s rotační a isospinovou invariancí, ve fyzice pevných látek s invariancí při diskretních translacích a rotacích. Také v teorii pole hrají transformace symetrie velkou roli. Na zvláštní druh transformací narazíme například v elektrodynamice. Zde můžeme elektrické a magnetické pole vyjádřit pomocí tzv

vektorového potenciálu $A_\mu(x)$, který píšeme v relativistickém čtyřvektorovém značení ($\mu=0,1,2,3$)

$$A_\mu = \left(\frac{\Phi}{c}, -\vec{A} \right) , \quad x^\mu = (ct, \vec{x}) , \quad (1.2)$$

kde Φ je skalární potenciál a \vec{A} je trojrozměrný vektorový potenciál; c je rychlost světla. Elektrické a magnetické pole je definováno vztahy

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} , \quad (1.3)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} . \quad (1.4)$$

Jednoduše lze ukázat, že \vec{E} a \vec{B} se nezmění při tzv kalibračních transformacích

$$\vec{A}(x) \rightarrow \vec{A}(x) - \vec{\nabla}\Lambda(x) , \quad (1.5)$$

$$\Phi(x) \rightarrow \Phi(x) + \frac{\partial\Lambda(x)}{\partial t} , \quad (1.6)$$

neboli ve čtyřvektorovém značení ($\partial_\mu \equiv \partial/\partial x^\mu$)

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) + \partial_\mu \Lambda(x) . \quad (1.7)$$

Charakteristickou vlastností kalibračních transformací je, že závisí na libovolné funkci $\Lambda(x)$ v prostoru a času. Skutečnost, že \vec{E} a \vec{B} se nemění při kalibračních transformacích znamená, že elektromagnetické jevy jsou kalibračně invariantní.

Zapišme teď tyto transformace jinak, a to

$$A_\mu \rightarrow i e^{i\Lambda} (\partial_\mu - i A_\mu) e^{-i\Lambda} , \quad (1.8)$$

takže dostáváme fázový faktor $\exp\{i\Lambda(x)\}$ závislý na prostoru a času. Fázové faktory definují grupu nazývanou $U(1)$: je to grupa unitárních matic dimenze 1×1 . V tomto případě jde o prostou grupu, ale ukazuje se, že máme teorie založené na jiných (spojitých) grupách, které jsou mnohem méně prosté. Takovým teoriím říkáme kalibrační teorie a pole A_μ se nazývá kalibrační pole. Pro obecnější grupy se ukazuje, že potřebujeme různá taková kalibrační pole. Lze ukázat, že kalibrační teorie hrají důležitou roli při sjednocení základních interakcí mezi elementárními částicemi. Elektrodynamika, kalibrační teorie $U(1)$, je nejjednodušší variantou této třídy teorií.

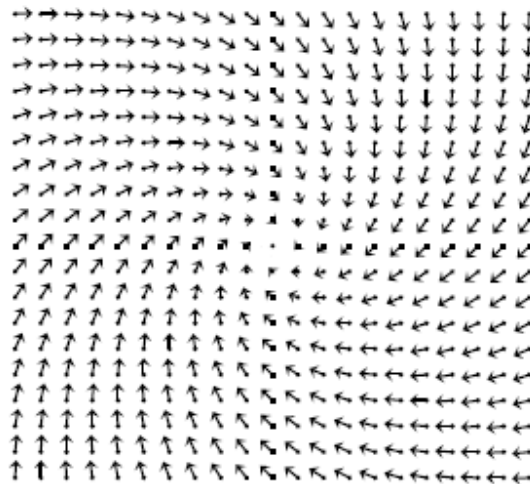
Dostí překvapivé je, že také teorie gravitace, Einsteinova obecná teorie relativity, je kalibrační teorií, i když trochu jiného typu. Na tuto teorii můžeme nahlížet jako na kalibrační teorii obecných transformací souřadnic, daných obecnou změnou parametrizace prostoru a času

$$x^\mu \rightarrow x^\mu + \xi^\mu(x) \quad . \quad (1.9)$$

Kalibračním polem je nyní gravitační pole, vyjádřené pomocí metriky, která umožňuje definovat vzdálenosti a úhly ve čtyřrozměrném prostoročase.

Skutečnost, že kalibrační transformace jsou spojeny s abstraktní grupou a současně závisí na prostoročase, může vést k zajímavým topologickým jevům. Příklady takových jevů jsou uspořádání toku v supravodiči, Aharonovův – Bohmův jev v kvantové mechanice a magnetické monopóly. Abychom ilustrovali význam topologie, podíváme se ještě jednou na grupu $U(1)$ kalibračních transformací, ale nyní v dvourozměrném prostoru (neboli na případ, který nezávisí na čase a závisí jen na dvou ze tří prostorových souřadnic). Buď $\psi(x,y)$ komplexní funkce, která se transformuje vzhledem k transformacím z grupy jako

$$\psi(x,y) \rightarrow e^{i\Lambda(x,y)} \psi(x,y) \quad . \quad (1.10)$$



Obrázek 1 Fázový úhel $\psi(x,y)$ je ukázán jako šipka, jejíž délka není podstatná, ale pro určitost ji volíme jako $|\psi(x,y)|$. Funkce má nulovou hodnotu v počátku.

Příkladem takové funkce je vlnová funkce v kvantové mechanice. Z toho, že v každém bodě lze fázi ψ změnit pomocí kalibrační transformace by se mohlo dovodit, že fáze ψ je ve skutečnosti pro popis systému nepodstatná. Přesto tomu tak není. Podívejme se např. na funkci, která je

v počátku rovna nule. Vezměme nyní uzavřenou křivku v rovině x - y a všimněme si, jak se podél této křivky mění fáze funkce $\psi(x,y)$. Po proběhnutí celé křivky nemusí fáze nabývat téže hodnoty jako počáteční, když předpokládáme jednoznačnost funkce $\psi(x,y)$, musí však být tento fázový rozdíl roven $2\pi n$, kde n je libovolné celé číslo. Toto číslo se nazývá index bodu ke křivce (dále jen index). Příklad pro index $n=1$ je uveden na Obr. 1; fázový úhel se změní o 2π , když sledujeme funkci podél křivky popisující úplné obkroužení počátku v rovině x - y . Snadno si můžeme představit situaci s jiným indexem. Příklad $n=0$ nastává tehdy, je-li fáze funkce $\psi(x,y)$ konstantní. Měníme-li funkci $\psi(x,y)$ spojitě, pak by měl index zůstat stejný. Proto se index bodu ke křivce nazývá topologickým invariantem. To také znamená, že se index nezmění při globálně (na celé ploše) definovaných kalibračních transformacích (1.10). Všimněme si, že hodnota indexu nezávisí na volbě uzavřené křivky kolem počátku (pokud ovšem vnitřek křivky neobsahuje další nulové body funkce $\psi(x,y)$). Z toho všeho plyne, že ačkoliv můžeme lokálně, tedy v jednom bodě a jeho nejbližším okolí, položit fázi funkce rovnu nule, globálně to lze provést pouze tehdy, pokud je index roven nule.

Taková situace se vyskytuje u vektorového potenciálu. Podívejme se znovu na dvourozměrnou rovinu a předpokládejme, že máme statické magnetické pole, které je všude nulové, až na omezenou oblast okolo počátku. V této oblasti by potenciál \vec{A} neměl být roven nule vzhledem k (1.4). Naopak ve vnější oblasti, kde pole \vec{B} je nulové, není žádný důvod pro to, aby i potenciál \vec{A} nemohl být nulový. Můžeme ukázat, že pomocí vhodné kalibrační transformace lze položit \vec{A} roven nule v libovolném bodě. Tento výsledek ale platí jen lokálně, jak můžeme vidět z následujícího křivkového integrálu

$$\Phi[C] = \oint_C A_i dx^i \quad , \quad (1.11)$$

kde C je daná (uzavřená) křivka. Je snadné ukázat, že $\Phi[C]$ se nemění při kalibrační transformaci (1.5). Na druhé straně víme z teorie magnetického pole, že $\Phi[C]$ musí být rovno magnetickému toku plochou, ohraničenou křivkou C . Použijme této skutečnosti na námi diskutovaný případ. Vezměme uzavřenou křivku C kolem počátku ale vedenou v oblasti, kde \vec{B} je rovno nule. Celkový magnetický tok oblastí ohraničenou křivkou C není však nutně roven

nule, tj. $\Phi[C]$ nemusí být nutně rovno nule. Pak nemůžeme \vec{A} vynulovat pomocí kalibrační transformace v celé vnější oblasti, i když to můžeme provést lokálně.² Všimněme si, že magnetický tok zde hraje stejnou roli jako index bodu ke křivce v předchozím. Opravdu existují situace, kdy tyto dvě veličiny na sobě lineárně závisí. Pak mluvíme o kvantování toku. Příkladem tohoto jevu jsou tzv. vortexová řešení v supravodičích a magnetické monopóly. Podrobnější studium těchto jevů by nás ale zavedlo příliš daleko od našeho předmětu.

V předchozím jsme alespoň naznačili roli, kterou hraje teorii grup ve fyzice. V těchto přednáškách se budeme hlavně věnovat grupě rotací, a to především v kontextu kvantové mechaniky. Na tomto případě se dá vysvětlit mnoho nejdůležitějších základních prvků, a pojednání může přitom zůstat transparentní, názorné a matematicky nepříliš komplikované. V žádném případě se nesnažíme o úplné matematické pojednání; cílem je ukázat co nejpřesvědčivěji význam teorie grup. Budeme se v dalším ve větší šířce věnovat fyzikálním aplikacím. Grupa rotací je příkladem tzv. kompaktní Lieovy grupy. Ve většině aplikací půjde o reprezentace této grupy. Teorie reprezentací takových grup je matematicky dobře prozkoumána. Pro porozumění je třeba přiměřená znalost lineární algebry (matice, skalární součin, stopa, funkce a derivace matic apod.). Pro pohodlí jsou některé nejdůležitější vlastnosti matic shrnuty v dodatcích.

2. Kvantová mechanika a rotační invariance

Kvantová mechanika říká, že každý fyzikální systém je popsán (obecně komplexní) vlnovou funkcí. Tato vlnová funkce je řešením diferenciální rovnice (např. Schrödingerovy rovnice v případě, kdy můžeme použít nerelativistického přiblížení) s okrajovými podmínkami danými fyzikální situací. Nebudeme se zde zabývat obecnými problémy nalezení vlnové funkce, ale soustředíme se na ty její vlastnosti, které jsou dány symetrií popisovaného systému.

Jednou za symetrií, které se v projevují v běžném životě, je invariance objektů vzhledem k rotacím v třírozměrném prostoru. Experimentátor zjišťuje, že výsledky jeho měření jsou nezávislé na orientaci měřicího zařízení v prostoru, pokud ovšem nedochází k interakci zařízení

² Toto způsobuje zajímavý kvantově mechanický jev pro elektrony, nacházející se vně magnetického pole, tzv. Aharonovův – Bohmův jev.

s okolím. Takže časový údaj hodin není závislý na orientaci hodin v prostoru, stejně jako výsledek výpočtů počítače nezávisí na jeho natočení. Rotační symetrii proto nacházíme v základních rovnicích fyziky: Newtonovy, Maxwellovy a Schrödingerova rovnice jsou příklady rotačně invariantních vztahů. Přesněji řečeno: přírodní zákony jsou invariantní vzhledem k rotacím trojrozměrného prostoru.

Ted' jde o to, jaké jsou důsledky rotační invariance vlnové funkce. Z klasické mechaniky víme, že rotační invariance soustavy, která neinteraguje s okolím, vede k zachování momentu impulsu: pro takovou soustavu je vektor momentu impulsu konstantou pohybu. Zákony zachování, které nejsou závislé na konkrétním charakteru silového působení, ale plynou z velmi obecných příčin, se mohou projevovat, i když v jiné podobě, také v kvantové mechanice. Očekáváme proto, že ve vlnové funkci nalezneme nějaký obraz momentu impulsu, zachovávající se v čase. Všimněme si tedy, jak se vlnová funkce chová při rotacích a jak to souvisí s momentem impulsu.

Vlnová funkce je závislá na řadě proměnných, ale obecně je vždy řešením lineární diferenciální rovnice

$$\mathcal{D} \psi = 0 \quad . \quad (2.1)$$

Skutečný tvar operátoru \mathcal{D} není podstatný, pouze požadujeme, aby \mathcal{D} byl invariantní vůči rotacím. Příkladem může být Schrödingerova rovnice pro pohyb těžiště volné částice

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) + i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \psi(\vec{x}, t) = 0 \quad . \quad (2.2)$$

Ukážeme, že je tato rovnice rotačně invariantní. Polohový vektor \vec{x} přejde po rotaci soustavy do \vec{x}' se souřadnicemi x'_i , které jsou dány vztahem

$$x'_i = \sum_j R_{ij} x_j \quad . \quad (2.3)$$

Rotace je charakterizovaná maticí 3×3 R , která je ortogonální a má determinant roven 1 (ortogonální matice s determinantem rovným -1 popisují rotaci a zrcadlení). Podmínkou ortogonalit pro R je

$$R^T R = R R^T = 1 \quad \text{neboli} \quad \sum_i R_{ij} R_{ik} = \delta_{jk} \quad ; \quad \sum_j R_{ij} R_{kj} = \delta_{ik} \quad , \quad (2.4)$$

kde R^T je matice transponovaná k matici R .

Není obtížné ukázat, že rovnice (2.2) je rotačně invariantní. Nejprve uvažme, že

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\vec{x}', t) = \sum_j \frac{\partial x'_j}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x'_j} \psi(\vec{x}', t) = \sum_j R_{ji} \frac{\partial}{\partial x'_j} \psi(\vec{x}', t) \quad , \quad (2.5)$$

.kde jsme využili vztah (2.3). Dále pokračujme stejně, tedy

$$\begin{aligned} \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\vec{x}', t) &= \sum_{i,j,k} R_{ji} R_{ki} \frac{\partial}{\partial x'_j} \frac{\partial}{\partial x'_k} \psi(\vec{x}', t) = \\ &= \sum_i \frac{\partial}{\partial x'_i} \frac{\partial}{\partial x'_i} \psi(\vec{x}', t) \quad , \end{aligned} \quad (2.6)$$

při zjednodušení jsme užili vztahu (2.4). Z tohoto výsledku plyne, že rovnice (2.2) je invariantní vzhledem k rotacím: je-li $\psi(\vec{x}, t)$ řešením rovnice (2.2), pak také $\psi(\vec{x}', t)$ jejím řešením.

Později budeme podrobněji studovat řadu vlastností rotací. Teď uijeme jen toho, že rotace mohou být representovány reálnými maticemi R dimenze 3×3 s determinantem rovným 1, které splňují relace ortogonality $RR^T = 1$. Libovolné natočení ve třech rozměrech můžeme charakterizovat třemi úhly (což přesněji uvedeme ve třetí části). Jsou-li R_1 a R_2 matice odpovídající nějakým rotacím, pak také jejich součin, tj. matice $R_3 = R_1 R_2$ představuje rotaci. Jinak řečeno: dvě po sobě následující natočení mohou být chápány jako jediné natočení. Důkaz je prostý: předpokládejme, že R_1 a R_2 jsou ortogonální matice s determinantem rovným 1.

S použitím vztahu

$$R_1^T = R_1^{-1} \quad , \quad R_2^T = R_2^{-1} \quad (2.7)$$

můžeme ukázat, že také $R_3 = R_1 R_2$ je ortogonální matice:

$$R_3^T = (R_1 R_2)^T = R_2^T R_1^T = R_2^{-1} R_1^{-1} = (R_1 R_2)^{-1} = R_3^{-1} \quad . \quad (2.8)$$

Dále platí

$$\det R_3 = \det(R_1 R_2) = \det R_1 \det R_2 = 1 \quad , \quad (2.9)$$

a to bylo třeba dokázat. Povšimněme si, že ačkoliv součin $R_4 = R_2 R_1$ je také natočení, nemusí být obecně R_3 a R_4 identické. Jinak řečeno: rotace v trojrozměrném prostoru nejsou komutativní; to jest operace provedené v různém pořadí nevedou obecně k témuž výsledku.

Nyní ukážeme, že rotace tvoří takzvanou grupu. Grupa je G množina (v našem případě množina reálných matic R dimenze 3×3 s determinantem rovným jedné a vlastností ortogonality

$R^T R=1$), na níž je definovaná binární operace (násobení) $G \times G \ni (R_1, R_2) \rightarrow R_1 R_2 \in G$ s následujícími vlastnostmi:

- (1) Násobení je asociativní: $(R_1 R_2) R_3 = R_1 (R_2 R_3)$.
- (2) Existuje jednotkový prvek (v našem případě jednotková matice 1) takový, že $1R = R1 = R$ pro všechny prvky (matice) z grupy.
- (3) Ke každému prvku existuje inverzní prvek (v našem případě ke každé matici R z grupy inverzní matice R^{-1}) takový, že $R^{-1} R = R R^{-1} = 1$.

Vidíme, že množina reálných matic R dimenze 3×3 s determinantem rovným jedné a vlastností ortogonality $R^T R=1$ má všechny vlastnosti grupy.

Každá grupa je plně charakterizována strukturou násobení, souvislostí prvků danou pravidly násobení. Pojem „struktura“ v dalším pojednání upřesníme a vyjádříme ve vzorcích. Teď jenom zdůrazněme, že v grupě nemáme žádné „sčítání“ a „odečítání“, ale pouze „násobení“. V grupě také není žádný „nulový prvek“.

Obecně je velmi užitečné, pokud všechny možné transformace invariance soustavy tvoří grupu. Ke dvěma transformacím invariance můžeme přidat hned třetí, tak že transformace po sobě necháme působit vždy na příslušné veličiny, pomocí nichž je teorie definována. Vůči výsledné transformaci musí být teorie samozřejmě také invariantní. Pak je splněna první z předchozích vlastností grup, další vlastnosti jsou většinou přirozené.

Nyní upřesněme způsob, jak se funkce ψ transformuje při rotacích. Při rotaci se změjí souřadnice \vec{x} na nové \vec{x}' , dané vztahem

$$x_i \rightarrow x'_i = \sum_j R_{ij}^{-1} x_j \quad . \quad (2.10)$$

Označení R^{-1} místo R je věcí konvence, neboť R zatím nijak nespécifikujeme. Rotace (2.10) může odpovídat změně fyzikální situace. Například částice, která se původně nacházela v bodě \vec{x} je přemístěna do bodu \vec{x}' . Rotace však také může odpovídat změně souřadné soustavy. Pevný vektor, který měl v původní soustavě souřadnice x_i bude v nové soustavě popsán souřadnicemi x'_i . Oba pohledy jsou komplementární, alespoň pokud neexistuje nějaký přednostní směr. My budeme rotace uvažovat ve smyslu změny souřadné soustavy.³ Taková rotace souřadné soustavy

³ Tato volba bývá nazývána pasivní transformací.

indukuje změnu souřadnic a tedy také funkcí souřadnic. Funkce ψ přechází po rotaci do nové funkce ψ' takovým způsobem, že hodnota funkce ψ' v nových souřadnicích x'_i je rovna hodnotě funkce ψ v původních souřadnicích x_i . Mezi oběma funkcemi platí tedy vztah

$$\psi'(\vec{x}') = \psi(\vec{x}) \quad . \quad (2.11)$$

Po dosažení z (2.10) máme novou funkci vyjádřenu jako

$$\psi'(\vec{x}') = \psi(R\vec{x}') \quad . \quad (2.12)$$

Nyní popíšeme působení dvou po sobě následujících rotací. První rotaci souřadné soustavy popíšeme maticí R a po ní následující rotaci maticí S . Souřadnice se po druhé rotaci změni na

$$x_i'' = \sum_j S_{ij}^{-1} x'_j = \sum_{j,k} S_{ij}^{-1} R_{jk}^{-1} x_k = \sum_j (RS)_{ij}^{-1} x_j \quad . \quad (2.13)$$

Odpovídající změny funkcí při kombinovaném působení dvou rotací je dáno vztahem

$$\psi''(\vec{x}'') = \psi'(S\vec{x}'') = \psi(RS\vec{x}'') \quad , \quad (2.14)$$

přičemž věnujme pozornost tomu, že pořadí matic R a S v posledním členu je opačné oproti pořadí, ve kterém následují odpovídající rotace souřadné soustavy. Protože proměnná na obou stranách (2.14) je \vec{x}'' , můžeme v takovém vztahu psát místo x_i'' prostě x_i . Dvě po sobě následující rotace, nejprve R a potom S , měni funkci $\psi(\vec{x})$ nejprve na $\psi'(R\vec{x}) = \psi(R\vec{x})$ a potom na $\psi''(RS\vec{x}) = \psi(RS\vec{x})$. Jinými slovy, při každé rotaci je x_i v argumentu funkce nahrazeno $\sum_j R_{ij} x_j$, kde R_{ij} je odpovídající matice rotace. Můžeme to ještě jednou přehledně znázornit jako

$$\psi(\vec{x}) \xrightarrow{R} \psi'(R\vec{x}) = \psi(R\vec{x}) \xrightarrow{S} \psi''(RS\vec{x}) = \psi(RS\vec{x}) \quad . \quad (2.15)$$

Nyní využijeme toho, že je \mathcal{D} , diferenciální operátor v rovnici (2.1) rotačně invariantní. To neznámá, že také řešení rovnice ψ musí být rotačně invariantní. Jako příklad uvažme řešení, kdy vlnová funkce popisuje částici, která se pohybuje ve směru od východu na západ. Po rotaci o $\pi/2$ se částice pohybuje ze severu k jihu, a to je jiná situace s jinou vlnovou funkcí. Ve skutečnosti, je-li \mathcal{D} rotačně invariantní, musí řešení rovnice ψ po rotaci přejít na jiné řešení ψ' . Takže po rotaci o $\pi/2$ vlnová funkce odpovídající částici, která se pohybuje ve směru od

východu na západ přejde na jinou vlnovou funkci, popisující částici při pohybu ze severu k jihu, ale obě vlnové funkce jsou řešením téže rovnice. Ještě jinak řečeno: možná fyzikální situace (popsaná vlnovou funkcí ψ_1 , která je řešením uvažované rovnice) přejde po rotaci do jiné možné fyzikální situace, popsané funkcí ψ_2 . Konkrétně, mohou-li se pohybovat částice od východu k západu, musí stejně dobře mít možnost pohybovat se od severu k jihu. Kdyby tomu tak nebylo, nebyla by fyzikální situace rotačně invariantní.

Mějme různá řešení rovnice (2.1) ψ_1 a ψ_2 , kde jedno nevzniklo z druhého rotací,

$$\mathcal{D} \psi_1 = 0 \quad , \quad \mathcal{D} \psi_2 = 0 \quad . \quad (2.16)$$

Protože je rovnice (2.1) lineární v ψ , musí být každá lineární kombinace $\lambda \psi_1 + \mu \psi_2$ také řešením, tj.

$$\mathcal{D} (\lambda \psi_1 + \mu \psi_2) = \lambda \mathcal{D} \psi_1 + \mu \mathcal{D} \psi_2 = 0 \quad . \quad (2.17)$$

Obecně: jsou-li ψ_1, \dots, ψ_n řešením rovnice (2.1), je také libovolná lineární kombinace

$$\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 + \dots + \lambda_n \psi_n \quad (2.18)$$

řešením této rovnice.

Pokud jde o chování při rotacích, můžeme rozlišit dva případy. Buď je vlnová funkce rotačně invariantní, tj. ψ přechází při rotaci sama na sebe

$$\psi'(\vec{x}) = \psi(\vec{x}) \quad \Leftrightarrow \quad \psi(\vec{x}') = \psi(\vec{x}) \quad , \quad (2.19)$$

nebo přejde na lineární kombinaci (lineárně nezávislých) řešení ψ_1, \dots, ψ_n , které samy při rotacích přecházejí na lineární kombinace z nich vytvářené. Jako příklad druhé možnosti vezměme soubor řešení pro částici pohybující se všemi možnými směry. V tomto případě obsahuje množina ψ_1, \dots, ψ_n nekonečný počet řešení. S ohledem na to, abychom se vyvarovali komplikací souvisících s nekonečností jmenované množiny, můžeme se omezit na částice v klidu nebo alespoň se zanedbatelně malou hybností. Částice v klidu přechází při rotaci sama na sebe, ale vnitřní struktura se eventuálně může změnit. Množina vlnových funkcí, které spolu souvisí přes rotaci pak obecně obsahuje konečný počet řešení. Když se částice nachází v základním stavu, pak je příslušná vlnová funkce obvykle rotačně invariantní; množina obsahuje tedy pouze jedinou vlnovou funkci. Když se částice nachází v excitovaném stavu, pak mohou různé excitované stavy přecházet jeden do druhého pomocí rotace.

Vezměme tedy množinu ψ_1, \dots, ψ_n vlnových funkcí, souvisejících prostřednictvím rotace.

Po rotaci tedy přechází ψ_1 na lineární kombinaci funkcí ψ_1, \dots, ψ_n :

$$\psi'_1(\vec{x}) \equiv \psi_1(R\vec{x}) = d_{11}\psi_1(\vec{x}) + d_{12}\psi_2(\vec{x}) + \dots + d_{1n}\psi_n(\vec{x}) \quad , \quad (2.20)$$

a podobně pro ψ_2, \dots, ψ_n . Obecně můžeme psát

$$\psi'_A(\vec{x}) = \sum_B d_{AB} \psi_B(\vec{x}) \quad , \quad A, B = 1, \dots, n \quad . \quad (2.21)$$

Koeficienty d_{AB} vytvářejí matici $D(R)$, takže můžeme psát

$$\Psi'(\vec{x}) = \Psi(R\vec{x}) = D(R)\Psi(\vec{x}) \quad ,$$

$$\Psi'(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi'_1(\vec{x}) \\ \dots \\ \psi'_n(\vec{x}) \end{pmatrix}, D(R) = \begin{pmatrix} d_{11} & \dots & \dots & d_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ d_{n1} & \dots & \dots & d_{nn} \end{pmatrix}, \Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \dots \\ \psi_n(\vec{x}) \end{pmatrix} \quad . \quad (2.22)$$

Matice $D(R)$ ve (2.21) a (2.22) jsou dány nejen maticemi R , které popisují určitou rotaci v trojrozměrném prostoru, ale také volbou řešení ψ_A , ze kterých vytváříme lineární kombinace. Můžeme jít ještě dál. Určitá rotace může být provedena najednou, nebo v několika po sobě jdoucích krocích. Ve výsledku to přirozeně není vidět. Například rotace o $\pi/2$ mohla vzniknout přímo, nebo jako rotace o π následovaná rotací o $-\pi/2$. Tato skutečnost se musí odrazit ve způsobu, jak jsou příslušné matice $D(R)$ násobeny. Abychom to ukázali, vezměme dvě po sobě následující rotace R a S (viz (2.15)). Ať rotaci R přísluší matice $D(R)$, rotaci S matice $D(S)$, tj. vyjádřeno vzorci

$$\begin{aligned} \Psi(R\vec{x}) &= D(R)\Psi(\vec{x}) \quad , \\ \Psi(S\vec{x}) &= D(S)\Psi(\vec{x}) \quad . \end{aligned} \quad (2.23)$$

Přirozeně pak složené rotaci RS odpovídá matice $D(RS)$, pro kterou platí

$$\Psi(RS\vec{x}) = D(RS)\Psi(\vec{x}) \quad . \quad (2.24)$$

Výraz $\Psi(RS\vec{x})$ ovšem můžeme počítat i podle (2.23) (zaměníme proměnnou $\vec{x} \rightarrow S\vec{x}$ v první rovnici a na pravé straně pak dosadíme z druhé rovnice):

$$\Psi(RS\vec{x}) = D(R)\Psi(S\vec{x}) = D(R)D(S)\Psi(\vec{x}) \quad . \quad (2.25)$$

Musí tedy být

$$D(R)D(S) = D(RS) \quad . \quad (2.26)$$

Matice $D(R)$ musí mít tedy stejnou strukturu pravidla násobení jako samy matice R . Z tohoto důvodu říkáme, že matice $D(R)$ tvoří reprezentaci grupy rotací v trojrozměrném prostoru.

Obecněji: množinu matic nazýváme reprezentací grupy, jestliže platí:

- (1) Každému prvku a grupy přísluší matice A .
- (2) Součinu dvou prvků přísluší součin odpovídajících matic, tj. přísluší-li prvkům grupy a, b, c matice A, B, C a je-li $c=ab$, pak $C=AB$.

Zjistili jsme v předchozím, že při rotacích v trojrozměrném prostoru se vlnové funkce fyzikální soustavy transformují pomocí lineárního zobrazení, které tvoří reprezentaci grupy rotací ve třech dimenzích.

Jako jednoduchý příklad vezměme tři funkce

$$\psi_1(\vec{x}) = x_1 \quad , \quad \psi_2(\vec{x}) = x_2 \quad , \quad \psi_3(\vec{x}) = x_3 \quad . \quad (2.27)$$

Při transformacích rotace se tyto tři funkce transformují maticí $D(R)$, která je přímo rovna matici R . Podmínka (2.26) je přitom splněna triviálně.

Avšak ne vždy jsou předchozí závěry správné. Z kvantové mechaniky víme, že nemůžeme rozlišit vlnové funkce lišící se pouze (reálným) fázovým faktorem. Proto vlnové funkce ψ a $\exp(i\lambda)\psi$ popisují (při reálném λ) stejnou situaci. Proto je možné, že se tato nejednoznačnost projeví při definici matic $D(R)$. Vztah (2.26) by bylo možné v principu zaměnit slabším vztahem

$$D(R)D(S) = \exp\{i\alpha(R,S)\}D(RS) \quad , \quad (2.28)$$

kde $\alpha(R,S)$ je (reálný) fázový faktor, závisící na R a S . Matice $D(R)$ s netriviálním fázovým faktorem v (2.28) představují tzv. projektivní reprezentaci. Projektivní reprezentace jsou ve fyzice potřebné. Mohou se vyskytnout případy, kdy každé matici R přísluší dvě matice $D(R)$ a $D'(R)$, které se liší fázovým faktorem, přesněji faktorem -1 . Takže platí $D'(R) = -D(R)$. To je přípustné, neboť vlnové funkce ψ a $-\psi$ popisují tutéž situaci. Uvedená nejednoznačnost ukazuje, že vztah (2.26) platí až na znaménko, protože fázový faktor v (2.28) nabývá hodnoty 0 a π . Částice popsané vlnovou funkcí, která se transformuje podle projektivní reprezentace nemají analogii v klasické mechanice. Příkladem takových částic jsou elektron, proton a neutron.

Příslušné vlnové funkce se transformují jinak, než je dáno vztahem (2.12). Později se k tomu ještě vrátíme.

Existuje ještě jedna podmínka, kterou musí matice $D(R)$ splňovat. Tato podmínka plyne z fyzikální interpretace kvantové mechaniky. V kvantové mechanice vyžadujeme existenci skalárního součinu přiřazujícímu každým dvěma vlnovým funkcím ψ_1 a ψ_2 komplexní číslo $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$. Pro skalární součin musí platit

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &\geq 0 \quad , \\ \langle \psi | \psi \rangle = 0 &\Leftrightarrow |\psi\rangle = 0 \quad , \\ \langle \psi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle &= \lambda_1 \langle \psi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \psi | \psi_2 \rangle \quad , \\ \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle^* &= \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \quad , \end{aligned} \tag{2.29}$$

kde λ_1 a λ_2 jsou libovolná komplexní čísla. Pro vlnové funkce závislé na jedné proměnné je skalární součin definován jako

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx \quad , \tag{2.30}$$

přesnější definici skalárního součinu nebudeme potřebovat.

Podle kvantové mechaniky můžeme čtverec absolutní hodnoty skalárního součinu definovat jako pravděpodobnost. Přesněji to uvidíme na příkladu, kdy stav soustavy je popsán pomocí $|\psi\rangle$. Pravděpodobnost, že soustavu nalezneme ve stavu $|\varphi\rangle$ je dána výrazem $|\langle \varphi | \psi \rangle|^2$. Soustava i měřicí zařízení jsou podrobeny rotaci. Podle (2.22) se stavy změni na

$$|\psi\rangle \rightarrow D|\psi\rangle \quad , \quad |\varphi\rangle \rightarrow D|\varphi\rangle \quad . \tag{2.31}$$

Zmiňovaný skalární součin přejde na

$$\langle \varphi | \psi \rangle \rightarrow \langle \varphi | D^+ D | \psi \rangle \quad . \tag{2.32}$$

Poněvadž předpokládáme rotační invarianci, nesmí se při této transformaci změnit pravděpodobnost. Protože jsou $|\psi\rangle$ i $|\varphi\rangle$ libovolné stavy, musí matice D splňovat podmínku

$$D^+ D = 1 \quad , \tag{2.33}$$

tj. musí být unitární.⁴ Protože každá matice $D(R)$ spojená s rotací v trojrozměrném prostoru tomuto požadavku vyhovuje, platí to i pro celou reprezentaci. V tomto kontextu se budeme zabývat výhradně unitárními reprezentacemi.

3. Grupa rotací ve třech dimenzích

Rotace v trojrozměrném prostoru mohou být representovány reálnými maticemi R dimenze 3×3 . Protože při rotacích zůstávají zachovány úhly mezi vektory, musí být tyto matice ortogonální. Tyto ortogonální matice tvoří grupu $O(3)$. Z podmínky $RR^T = 1$ dostáváme $\det R = \pm 1$. Vybereme-li pouze ty ortogonální matice, jejichž determinant je roven 1, mluvíme o grupě $SO(3)$.

Rotace v trojrozměrném prostoru je plně určena osou rotace a velikostí úhlu rotace. Osa rotace může být například zadána pomocí třírozměrného vektoru $\vec{\alpha}$; velikost úhlu rotace může být určena délkou tohoto vektoru (úhel v radiánech). Jelikož rotace, lišící se o úhel 2π jsou identické, můžeme trojrozměrné vektory $\vec{\alpha}$ uzavřít do trojrozměrné koule s poloměrem π . Tak máme přirozenou parametrizaci všech trojrozměrných rotací. Každý bod této parametrické koule odpovídá nějaké rotaci: osa je dána spojnicí tohoto bodu se středem koule a úhel natočení (daný orientací levotočivého závitu) se mění od 0 do π (otočení o úhly z intervalu $-\pi$ do 0 jsou spojeny s vektorem na téže přímce opačně orientovaným). Dva protilehlé vektory na povrchu koule, tedy $\vec{\alpha}$ a $-\vec{\alpha}$ s $|\vec{\alpha}| = \pi$, popisují stejnou rotaci, jednu o úhel π a druhou o úhel $-\pi$ okolo stejné osy. S výjimkou těchto dvojic určují dva různé body parametrické koule dvě různé rotace.

Z předchozího je zřejmé, že rotace mohou být parametrizovány pomocí tří nezávislých parametrů, jmenovitě složek vektoru $\vec{\alpha}$, a dále že rotace spojitě závisí na těchto parametrech. Pro další studium těchto závislostí zavedeme pojem infinitesimálních rotací, tj. rotací v okolí $|\vec{\alpha}| \approx 0$. Popíšme nejprve rotace kolem osy z , kdy $\vec{\alpha} = (0, 0, \alpha)$. Příslušná rotace je zobrazení

⁴ Podmínkou je, že absolutní hodnota skalárního součinu se nezmění. Mohla by se tedy matice $D^+ D$ lišit od jednotkové společným fázovým faktorem.

$$\begin{aligned}
x &\rightarrow \cos\alpha x + \sin\alpha y \quad , \\
y &\rightarrow \cos\alpha y - \sin\alpha x \quad , \\
z &\rightarrow z \quad .
\end{aligned}
\tag{3.1}$$

Odsud dostáváme matici $R(\alpha)$ ve tvaru

$$R(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .
\tag{3.2}$$

Otočení o úhel α můžeme chápat také jako výsledek n po sobě jdoucích otočení o úhel α/n . Při dostatečně velkém n se bude matice otočení o velmi malý úhel α/n infinitesimálně lišit od jednotkové matice; zanedbáme-li členy řádu $(\alpha/n)^2$, bude příslušná matice

$$R\left(\frac{\alpha}{n}\right) = \begin{pmatrix} 1 & \alpha/n & 0 \\ -\alpha/n & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + O\left(\frac{\alpha^2}{n^2}\right) = 1 + \frac{\alpha}{n} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + O\left(\frac{\alpha^2}{n^2}\right)
\tag{3.3}$$

Rotaci o úhel α dostaneme, jestliže n -krát provedeme rotaci (3.3), tj.

$$R(\alpha) = [R(\alpha/n)]^n = \left[1 + \frac{\alpha}{n} T + O\left(\frac{\alpha^2}{n^2}\right) \right]^n ,
\tag{3.4}$$

kde matice T je definována jako

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .
\tag{3.5}$$

V limitě $n \rightarrow \infty$ můžeme zanedbat členy řádu $1/n^2$; s pomocí vztahu

$$\exp A = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{A}{n} \right)^n
\tag{3.6}$$

dostaneme pak

$$R(\alpha) = \exp\{\alpha T\} .
\tag{3.7}$$

O tom, že výrazy (3.7) a (3.2) jsou stejné se teď přesvědčíme. Exponenciální funkci napíšeme ve tvaru Taylorovy řady

$$\exp A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n .
\tag{3.8}$$

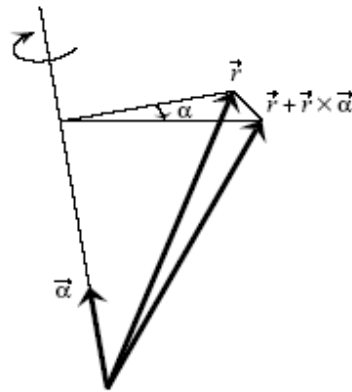
Dále si všimněme, že

$$T^{2n} = (-1)^n \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (n \geq 1), \quad (3.9)$$

odkud okamžitě $T^{2n+1} = (-1)^n T$ pro $n \geq 0$. S pomocí těchto vztahů napíšeme v řadě pro exponenciálu zvlášť liché a zvlášť sudé členy, takže

$$\begin{aligned} \exp\{\alpha T\} &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \alpha^{2n}}{(2n)!} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \alpha^{2n+1}}{(2n+1)!} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= 1 + (\cos \alpha - 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \sin \alpha \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

což je skutečně výraz (3.2).



Obrázek 2 Infinitesimální rotace vektoru \vec{r} kolem osy rotace \vec{a}

Vztah mezi konečnou a infinitesimální transformací (3.7) můžeme vyjádřit i pro obecnou rotaci. Při rotaci o malý úhel se ke každému vektoru \vec{r} přičte malý vektorový přírůstek, kolmý jak k \vec{r} tak k ose rotace, jehož velikost je součinem úhlu rotace a vzdálenosti \vec{r} od osy (viz Obrázek 2). Tento malý vektorový přírůstek je vektorovým součinem \vec{r} a vektoru osy rotace \vec{a} (předpokládáme, že $|\vec{a}| \approx 0$), takže

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{r} \times \vec{a} + O(|\vec{a}|^2). \quad (3.11)$$

Pro obecný vektor rotace $\vec{a} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ pak máme

$$\begin{aligned}
x &\rightarrow x + \alpha_3 y - \alpha_2 z + O(|\vec{\alpha}|^2) , \\
y &\rightarrow y + \alpha_1 z - \alpha_3 x + O(|\vec{\alpha}|^2) , \\
z &\rightarrow z + \alpha_2 x - \alpha_1 y + O(|\vec{\alpha}|^2) .
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Infinitesimální rotaci můžeme zapsat také takto

$$R(\vec{\alpha}) = 1 + i(\alpha_1 L_1 + \alpha_2 L_2 + \alpha_3 L_3) + O(|\vec{\alpha}|^2) , \tag{3.13}$$

kde jsme zavedli podle zaužívaného zvyku hermiteovské matice L_1 , L_2 a L_3

$$L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} , \quad L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad L_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \tag{3.14}$$

Tyto matice můžeme jednoduše zapsat pomocí úplného antisymetrického tensoru ε_{ikl} jako

$$(L_i)_{jk} = -i \varepsilon_{ijk} . \tag{3.15}$$

Snadno se přesvědčíme, že

$$\begin{aligned}
(L_1)_{23} &= -(L_1)_{32} = -i \varepsilon_{123} = -i , \\
(L_2)_{31} &= -(L_2)_{13} = -i \varepsilon_{231} = -i , \\
(L_3)_{12} &= -(L_3)_{21} = -i \varepsilon_{312} = -i .
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Tedy vytvoříme $R(\vec{\alpha})$ jako n následných rotací o úhel $\vec{\alpha}/n$:

$$R(\vec{\alpha}) = [R(\vec{\alpha}/n)]^n = \left[1 + \frac{1}{n}(i\alpha_1 L_1 + i\alpha_2 L_2 + i\alpha_3 L_3) + O\left(\frac{|\vec{\alpha}|^2}{n^2}\right) \right]^n . \tag{3.17}$$

S využitím (3.4) máme v limitě $n \rightarrow \infty$

$$R(\vec{\alpha}) = \exp\left\{ i \sum_k \alpha_k L_k \right\} . \tag{3.18}$$

Správnost výsledku (3.18) můžeme ověřit také jiným způsobem. Nejprve si všimněme, že při rotaci se stejnou osou rotace, ale různě velikým úhlem rotace platí

$$R(s\vec{\alpha})R(t\vec{\alpha}) = R((s+t)\vec{\alpha}) , \tag{3.19}$$

s a t jsou reálná čísla. Rotace $R(s\vec{\alpha})$ se stejnou osou rotace definují komutující podgrupu celé grupy rotací. Je jednoduché to ukázat: matice $R(s\vec{\alpha})$ definují grupu (pro pevný vektor $\vec{\alpha}$ a proměnný parametr s) pro kterou výsledek násobení nezávisí na pořadí činitelů

$$R(s\vec{\alpha})R(t\vec{\alpha}) = R(t\vec{\alpha})R(s\vec{\alpha}) \quad . \quad (3.20)$$

Tato podgrupa je grupa $SO(2)$, grupa dvojrozměrných rotací (osa rotace je pevná, natáčí se jen složky vektoru kolmé k ose rotace). S pomocí (3.19) můžeme jednoduše odvodit následující diferenciální rovnici

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds}R(s\vec{\alpha}) &= \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{R((s+\Delta)\vec{\alpha}) - R(s\vec{\alpha})}{\Delta} = \\ \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{R(\Delta\vec{\alpha}) - 1}{\Delta} R(s\vec{\alpha}) &= \left(i \sum_k \alpha_k L_k \right) R(s\vec{\alpha}) \quad , \end{aligned} \quad (3.21)$$

při úpravě jsme nejprve použili (3.19) a potom (3.13). Je pak už snadné uvidět, že řešením rovnice (3.21) je právě (3.18).

Není snad třeba opakovat, že aby matice (3.18) representovaly rotace, musí být ortogonální a jejich determinant musí být roven 1, tj. musí být splněny vztahy

$$R(\vec{\alpha})^T = R(\vec{\alpha})^{-1} = R(-\vec{\alpha}) \quad , \quad \det R(\vec{\alpha}) = 1 \quad . \quad (3.22)$$

Důkaz plyne z vlastností obecné matice A , pro kterou platí

$$(\exp A)^T = \exp(A^T) \quad , \quad \det(\exp A) = \exp(\text{Tr} A) \quad . \quad (3.23)$$

Odsud plyne, že matice (3.18) vyhovují podmínce (3.22) za předpokladu, že matice $i \sum_k \alpha_k L_k$ je reálná, antisymetrická a má stopu rovnu 0. Vidíme, že tomu tak skutečně je; z definic (3.14) plyne, že matice $i \sum_k \alpha_k L_k$ je ve skutečnosti nejobecnější maticí dimenze 3×3 s požadovanými vlastnostmi.

Můžeme si teď položit otázku poněkud obráceně: mohou být všechny rotace vyjádřeny ve tvaru (3.18)? Nalézt odpověď není příliš snadné. V principu můžeme exponenciálu v (3.18) vyjádřit pomocí mocninné řady (3.8), a výsledek pak porovnat s nejobecnějším tvarem matice rotace. Vidíme pak, že na otázku můžeme odpovědět kladně: všechny rotace mohou být vyjádřeny ve tvaru (3.18). To zdaleka neplatí pro všechny grupy. Například nekompaktní grupy obsahují prvky, které nemohou být zapsány pomocí takového exponenciálního tvaru, ačkoliv

mohou být zapsány jako součin konečného počtu exponenciál. Tyto grupy se nazývají nekompatní, poněvadž prostor jejich parametrů není kompaktní. Rotační grupa, jejíž všechny prvky jsou určeny pomocí parametrů α_k , které jsou uzavřeny v parametrické kouli o poloměru π , je kompaktní grupa. V rámci našeho pojednání nebudeme nekompatní grupy studovat, to ale neznamená, že nejsou ve fyzice důležité. Příkladem nekompatní grupy je například Lorentzova grupa, tj. grupa pozůstávající z množiny všech Lorentzových transformací.

Z předchozího výkladu je jistě zřejmé, že matice L_k spojené s infinitesimálními transformacemi hrají významnou roli, neboť alespoň pro kompaktní grupy všechny prvky jsou popsány exponenciálou (3.18). Proto nazýváme tyto matice generátory grupy. Ačkoliv jsme zatím věnovali pozornost pouze grupě rotací, je tento závěr platný pro všechny Lieovy grupy⁵: tj. grupy, jejichž prvky analyticky závisí na konečném počtu parametrů (v našem případě $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$). V případě, že prvky grupy jsou matice, musí platit, že každý prvek matice je diferencovatelnou funkcí parametrů⁶. Počet lineárně nezávislých parametrů určuje dimenzi Lieovy grupy, kterou nesmíme zaměnit s dimensí matic, které uvažujeme⁷. Počet lineárně nezávislých generátorů musí být přirozeně roven dimenzi grupy.

Jednou z nejdůležitějších charakteristik grupy je struktura násobení, podle které určíme, jak pro rotaci vzniklou součinem dvou rotací $R(\vec{\alpha})$ a $R(\vec{\beta})$

$$R(\vec{\alpha})R(\vec{\beta}) = R(\vec{\gamma}) \quad (3.24)$$

vyjádřit závislost $\vec{\gamma}$ na $\vec{\alpha}$ a $\vec{\beta}$. Znalost této závislosti pevně určuje strukturu grupového násobení. Skutečnost, že je dána závislost $\vec{\gamma}(\vec{\alpha}, \vec{\beta})$, určuje přirozeně pravidla násobení generátorů. Abychom to ukázali, rozvineme (3.24) podle mocnin α_k a β_k ⁸

⁵ Norský matematik Sophus Lie, 1842-1899.

⁶ To je případ grupy rotací. V obecném případě lze tento požadavek zeslabit: pro Lieovu grupu postačuje, jsou-li prvky dvakrát diferencovatelné podle parametrů.

⁷ Pro grupu rotací v trojrozměrném prostoru jsou obě dimense shodně rovny 3. To je náhodná shoda: dimense grupy rotací v d -rozměrném prostoru je $d(d-1)/2$.

⁸ Značení $\vec{\alpha} \cdot \vec{L}$ užíváme pro $\alpha_1 L_1 + \alpha_2 L_2 + \alpha_3 L_3$. Ve vztahu (3.25) užíváme také sumační konvence: jsou-li v jednom členu stejné indexy dvakrát, sčítá se přes ně, tj. $\alpha_k L_k \equiv \sum_k \alpha_k L_k$.

$$\begin{aligned}
\exp\{i\vec{\alpha}\cdot\vec{L}\}\exp\{i\vec{\beta}\cdot\vec{L}\} &= [1+i\alpha_k L_k + O(\alpha^2)][1+i\beta_k L_k + O(\beta^2)] \\
&= 1 + i(\alpha + \beta)_k L_k - \alpha_k \beta_l L_k L_l + O(\alpha^2) + O(\beta^2) \\
&= 1 + i(\alpha + \beta)_k L_k - \frac{1}{2}(\alpha + \beta)_k (\alpha + \beta)_l L_k L_l \\
&\quad - \frac{1}{2}\alpha_k \beta_l [L_k, L_l] + O(\alpha^2) + O(\beta^2) .
\end{aligned} \tag{3.25}$$

V prvních třech členech vidíme začátek Taylorova rozvoje funkce $\exp\{i(\vec{\alpha} + \vec{\beta})\cdot\vec{L}\}$. Kdyby byl čtvrtý člen roven nule, tj. kdyby L_k a L_l komutovaly, platilo by opravdu $\gamma_k = \alpha_k + \beta_k$. Protože pravá strana musí být vyjádřena jako mocninná řada $\exp\{i\vec{\gamma}\cdot\vec{L}\}$, musí být možné vyjádřit komutátory generátorů jako lineární kombinace generátorů (mocninná řada má totiž tvar $1 + i\gamma_k L_k - 1/2\gamma_k \gamma_l L_k L_l - \dots$). Jinak řečeno, musí platit

$$[L_k, L_l] = c_{kl}^i L_i , \tag{3.26}$$

konstanty c_{kl}^i jsou nazývány strukturními konstantami grupy, protože určují strukturu grupového násobení. Poznamenejme, že pro hermiteovské generátory L_k jsou strukturní konstanty ryze imaginární. Strukturní konstanty jsou přirozeně antisymetrické v dolních indexech.

Než pokročíme dále, ověříme nejprve, že generátory (3.14) splňují relace (3.26). Provedeme-li explicitně násobení příslušných matic, dostáváme kladnou odpověď, tj. platí

$$[L_1, L_2] = i L_3 , \quad [L_2, L_3] = i L_1 , \quad [L_3, L_1] = i L_2 . \tag{3.27}$$

V kompaktním zápisu

$$[L_i, L_j] = i \varepsilon_{ijk} L_k . \tag{3.28}$$

S pomocí (3.26) můžeme pro $\vec{\gamma}(\vec{\alpha}, \vec{\beta})$ psát

$$\gamma_k = \alpha_k + \beta_k + \frac{1}{2}c_{mn}^k \alpha_m \beta_n + O(\alpha^2) + O(\beta^2) . \tag{3.29}$$

C principu lze počítat iteračním postupem do vyšších řádů, tak máme například

$$\gamma_k = \alpha_k + \beta_k + \frac{1}{2}c_{mn}^k \alpha_m \beta_n - \frac{1}{12}(\alpha_m \alpha_n \beta_p + \beta_m \beta_n \alpha_p) c_{mq}^k c_{np}^q + \dots . \tag{3.30}$$

Skutečnost, že všechny členy v iteraci mohou být vyjádřeny pomocí strukturních konstant plyne z CBH (Campbell - Baker- Hausdorff) vztahu, který vyjadřuje logaritmus z výrazu $\exp A \exp B$

pomocí mocninné řady opakovaných komutátorů matic A a B (viz Dodatek D). Struktura násobení v grupě bude tak určena strukturními konstantami (alespoň pro prvky grupy v konečném okolí jednotkového prvku).

Představme si teď, že najdeme matice A_k různé od matic L_k , které ale splňují stejné komutační relace (3.26) jako L_k . V takovém případě můžeme pomocí exponenciálního zobrazení definovat příslušné prvky grupy, splňující stejná pravidla násobení jako prvky původní grupy. Jinými slovy, nalezneme tímto způsobem representaci grupy. Naopak můžeme pro každou representaci grupy zkonstruovat příslušné generátory pomocí infinitesimálních transformací, které pak budou splňovat komutační relace (3.26) se stejnými strukturními konstantami. Vzniká tak přímý vztah mezi representacemi grupy a representacemi (3.26). (Matematicky přesněji: generátory L_k spolu s komutačními relacemi (3.26) definují tzv. Lieovu algebru. Matice A_k spolu s týmiž komutačními relacemi definují representaci Lieovy algebry.)

Při studiu strukturních konstant můžeme jednoduše nalézt vztahy, které musí splňovat. Tyto vztahy jsou důsledkem Jacobiho identity, kterou splňují libovolné tři matice A, B a C :

$$[[A, B], C] + [[B, C], A] + [[C, A], B] = 0 \quad . \quad (3.31)$$

Tuto identitu lze jednoduše dokázat úplným rozepsáním všech komutátorů; dostáváme 12 členů, které se po dvojicích vyruší. Dosadíme-li do Jacobiho identity $A=L_i$, $B=L_j$ a $C=L_k$, dostaneme následující vztah pro strukturní konstanty

$$c_{ij}^m c_{mk}^n + c_{jk}^m c_{mi}^n + c_{ki}^m c_{mj}^n = 0 \quad , \quad (3.32)$$

při odvození jsme užili (3.26). Rovnice (3.32) bývá také nazývána Jacobiho identitou. Pro grupu rotací z ní vyplývá následující vztah mezi komponentami úplného antisymetrického tensoru

$$\varepsilon_{ijm} \varepsilon_{mkn} + \varepsilon_{jkm} \varepsilon_{min} + \varepsilon_{kim} \varepsilon_{mjn} = 0 \quad , \quad (3.33)$$

který později opakovaně využijeme. Důkaz platnosti (3.33) plyne z identity

$$\varepsilon_{ijm} \varepsilon_{mkl} = \delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk} \quad , \quad (3.34)$$

jejíž důkaz je jednoduchý (například pevnou volbou dvou indexů).

Vztah (3.32) má ještě jeden důsledek. Vytvořme n matic C_i dimense $n \times n$ jako

$$(C_i)_j^k \equiv -c_{ij}^k \quad , \quad (3.35)$$

n je dimense Lieovy grupy. Pak můžeme (3.32) přepsat jako

$$c_{ij}^m (C_m)_k^n + (C_j C_i)_k^n - (C_i C_j)_k^n = 0 \Rightarrow [C_i, C_j] = c_{ij}^k C_k . \quad (3.36)$$

To jsou tytéž komutační relace, pomocí kterých jsme definovali ve (3.26) strukturní konstanty. (Matice C_i tedy představují reprezentaci Lieovy algebry dané (3.26).) Pomocí exponenciální funkce matic těchto matic tak vytvoříme grupu, která má tytéž vlastnosti násobení (alespoň v konečném okolí jednotkového prvku jako původní Lieova grupa, Jinými slovy, popsáním způsobem můžeme vytvořit reprezentaci Lieovy grupy z matic dimense $n \times n$, kde n je dimense Lieovy grupy. Tato reprezentace se nazývá přidružená (adjungovaná).

Jestliže zkusíme aplikovat předchozí výsledky na grupu rotací, dočkáme se jistého zklamání. Vzhledem k tomu, že strukturní konstanty jsou $c_{ij}^k = i \varepsilon_{ijk}$, jsou matice C_i přesně stejné jako matice L_i (viz (3.15)) a dostáváme se tak k původním trojrozměrným rotacím. Přidružená reprezentace je identická s původní grupou. Že je to vskutku výjimečný případ uvidíme v dalším.

4. Více o reprezentacích

V předchozí části jsme rozebírali vlastnosti grupy rotací v trojrozměrném prostoru. Nyní se budeme věnovat možným reprezentacím této grupy. Především si všimněme, že máme-li již nějakou reprezentaci, například matice D působící na vlnovou funkci zapsanou jako sloupcový vektor ψ , můžeme transformací ψ získat novou reprezentaci. Uvažujme například transformaci

$$\tilde{\psi} = U \psi . \quad (4.1)$$

Při rotacích se $\tilde{\psi}$ transformuje jako

$$\tilde{\psi} \rightarrow \tilde{\psi}' = \tilde{D} \tilde{\psi} , \quad (4.2)$$

s maticí \tilde{D} danou vztahem

$$\tilde{D} = U D U^{-1} . \quad (4.3)$$

Jak původní matice D , tak nové matice \tilde{D} definují reprezentaci grupy rotací, ale tyto reprezentace se v ničem podstatném neodlišují. Budeme proto reprezentace, které jsou spojeny vztahem (4.3) nazývat ekvivalentními reprezentacemi. Můžeme teď formulovat jeden důležitý výsledek teorie reprezentací: Všechny (konečněrozměrné) reprezentace konečných kompaktních grup jsou unitární. Tím máme na mysli, že pomocí transformace (4.3) můžeme být každá reprezentace převedena na reprezentaci, ve které pro všechny matice D platí $D^+ = D^{-1}$.

Až dosud jsme rozebírali representace grupy rotací, které byly definovány prostřednictvím rotací trojrozměrného vektoru $\vec{x}=(x_1,x_2,x_3)$. Existuje zřejmý způsob, jak konstruovat větší representace. Vezměme dva vektory \vec{x} a \vec{y} , které se oba budou transformovat při rotacích. Tyto vektory mohou například představovat polohu dvou bodových částic. Vytvořme z nich šestirozměrný vektor $\vec{z}=(x_1,x_2,x_3,y_1,y_2,y_3)$, který se bude při rotacích transformovat jako

$$\vec{z} \rightarrow \vec{z}' = D z \quad , \quad (4.4)$$

kde matici D vytvoříme jednoduše pomocí 3×3 matic R :

$$D = \begin{pmatrix} R & 0 \\ 0 & R \end{pmatrix} . \quad (4.5)$$

Taková representace se nazývá reducibilní, protože vzhledem k rotacím je šestirozměrný prostor složen ze dvou invariantních třírozměrných podprostorů. Na tuto šestirozměrnou representaci tedy můžeme pohlížet jako na (tzv. přímý) součet dvou třírozměrných representací, což zapisujeme jako

$$\mathbf{6} = \mathbf{3} \oplus \mathbf{3} \quad (4.6)$$

Je jasné, že representaci, která nemá žádné invariantní podprostory, nelze zapsat v blokově diagonálním tvaru podobném (4.5); takovým representacím říkáme ireducibilní.

Další representace můžeme vytvářet jako tzv. součinnové representace. Vezměme například soustavu dvou (volných) částic s vlnovými funkcemi $\psi_1(\vec{x})$ a $\psi_2(\vec{y})$, kde \vec{x} a \vec{y} jsou souřadnice těchto částic. Vlnové funkce soustavy $\Psi(\vec{x},\vec{y})$ pozůstávají ze všech možných součinů vlnových funkcí ψ_1 a ψ_2 , popisujících první resp. druhou částici. Takový objekt nazýváme tensorovým součinem a značíme ho jako

$$\Psi = \psi_1 \otimes \psi_2 \quad . \quad (4.7)$$

Při transformacích z rotační grupy se transformují jak \vec{x} a \vec{y} , tak vlnová funkce Ψ , ale příslušná representace je komplikovanější, než representace daná příslušnými funkcemi ψ_1 a ψ_2 . Často pak součinnová representace není ireducibilní a může být rozložena na řadu samostatných representací, které už jsou ireducibilní. Tento postup popíšeme později, ale teď jej ilustrujeme na jednom příkladě. Ať jsou tři možné funkce ψ_1 dány souřadnicemi x_i a tři možné funkce ψ_2 souřadnicemi y_i . Takže se jak ψ_1 tak ψ_2 transformují podle trojrozměrné representace rotační

grupy. Součinnová representace obsahuje všechny možné součiny ψ_1 a ψ_2 , můžeme proto najít devět nezávislých funkcí

$$T_{ij}(\vec{x}, \vec{y}) = x_i y_j \quad , \quad (4.8)$$

které se při rotacích transformují jako

$$T_{ij} \rightarrow T'_{ij} = R_{i' i} R_{j' j} T_{i' j'} \quad . \quad (4.9)$$

Tato devítirozměrná representace skutečně není ireducibilní. Symetrická a antisymetrická část T_{ij} , definovaná jako $T_{(ij)} = (T_{ij} + T_{ji})/2$ a $T_{[ij]} = (T_{ij} - T_{ji})/2$ se při rotacích transformuje samostatně. Plyne to bezprostředně z pohledu na (anti)symetrickou část T'_{ij} , neboť je vidět, jak z (anti)symetrie v indexech i a j výrazu $R_{i' i} R_{j' j} \pm R_{j' i} R_{i' j}$ plyne (anti)symetrie v indexech i' a j' .

Máme tak

$$T_{(ij)} \rightarrow T'_{(ij)} = R_{i' i} R_{j' j} T_{(i' j')} \quad , \quad T_{[ij]} \rightarrow T'_{[ij]} = R_{i' i} R_{j' j} T_{[i' j']} \quad . \quad (4.10)$$

Antisymetrická část T_{ij} má tři nezávislé komponenty, které se transformují podle třírozměrné representace rotační grupy. Symetrická část T_{ij} má šest nezávislých komponent, které se netransformují podle nějaké ireducibilní representace. To vidíme okamžitě z toho, že stopa T_{ij} definovaná jako

$$T_{ii} = \vec{x} \cdot \vec{y} \quad (4.11)$$

je invariantní vzhledem k rotacím. Můžeme tedy rozložit T_{ij} na tři nezávislé tensorů⁹, tj.

$$T_{ij} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} T = \vec{x} \cdot \vec{y} \\ T_i = \varepsilon_{ijk} x_j y_k \\ S_{ij} = x_i y_j + x_j y_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\vec{x} \cdot \vec{y}) \end{array} \right. \quad . \quad (4.12)$$

Všimněme si použití úplného antisymetrického tensoru v zápisu antisymetrické části jako trojrozměrného vektoru \vec{T} (není to ovšem nic jiného než vektorový součin $\vec{x} \times \vec{y}$). Nulové stopy u symetrické části jsme dosáhli přidáním členu úměrného δ_{ij} . Potom má S_{ij} pouze pět nezávislých komponent. Při rotacích se transformují jednotlivé členy odděleně; tedy i pět

⁹ Ve druhé rovnici používáme sumační konvenci podle poznámky 8.

komponent S_{ij} se transformuje mezi sebou.¹⁰ Pro součin dvou třírozměrných reprezentací můžeme teď psát

$$\mathbf{3} \otimes \mathbf{3} = \mathbf{1} \oplus \mathbf{3} \oplus \mathbf{5} \quad , \quad (4.13)$$

přičemž reprezentace jsou označeny svou dimensí (necháváme stranou případ, kdy by existovaly dvě neekvivalentní reprezentace stejné dimenze).

V popsaném příkladu jsme užili postupu, který se skládal ze dvou kroků: v prvním jsme využili vlastností symetrie tenzorů, které se při transformacích nemění a ve druhém kroku jsme využili existence dvou invariantních tenzorů, tj.

$$T_{ij} = \delta_{ij} \quad , \quad T_{ijk} = \varepsilon_{ijk} \quad . \quad (4.14)$$

Jako invariantní tenzory označujeme tenzory, které se nemění při transformacích z grupy, tak jak jsou transformace dány působením na jednotlivé tensorové indexy

$$T_{ijk\dots} \rightarrow T'_{ijk\dots} = R_{i'i'} R_{j'j'} R_{k'k'} \dots T_{i'j'k'\dots} = T_{ijk\dots} \quad . \quad (4.15)$$

Zajisté (4.15) platí pro δ_{ij} a ε_{ijk} ; vztah

$$R_{i'i'} R_{j'j'} \delta_{i'j'} = \delta_{ij} \quad (4.16)$$

je splněn, protože matice R_{ij} jsou ortogonální a

$$R_{i'i'} R_{j'j'} R_{k'k'} \varepsilon_{i'j'k'} = \det R \varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{ijk} \quad (4.17)$$

platí, protože pro matice rotace je $\det R=1$. Máme-li nějaký tenzor $T_{ijk\dots}$, můžeme pomocí invariantních tenzorů provádět kontrakci indexů. Je potom možné, že takto vzniklé tenzory tvoří invariantní podprostory, jinými slovy, pomocí kontrakce získáme tenzory, transformující se při rotacích stejným způsobem. Jako příklad vezměme tenzor, který se transformuje jako

$$T_{ijk\dots} \rightarrow T'_{ijk\dots} = R_{i'i'} R_{j'j'} R_{k'k'} \dots T_{i'j'k'\dots} \quad . \quad (4.18)$$

¹⁰ Ke každé z těchto reprezentací můžeme zkonstruovat matice $D(R)$, které byly definovány v části 2. První reprezentaci ve (4.12) odpovídá triviální $D(R)=1$. Pro druhou reprezentaci máme matice $D(R)$ dimenze 3×3 podobné maticím R . Pro třetí reprezentaci máme matice $D(R)$ dimenze 5×5 . Indexy vytváříme z bezstopých symetrických dvojic indexů (ij) . Matice $D(R)$ můžeme zapsat jako

$$D(R)_{(ij)(kl)} = \frac{1}{2} (R_{ik} R_{jl} + R_{il} R_{jk}) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \quad .$$

Vytvořme nyní tensor

$$\tilde{T}_{klm\dots} = \delta_{ij} T_{ijklm\dots} \quad , \quad (4.19)$$

který má o dva indexy méně. Je jednoduché se za pomoci (4.16) přesvědčit, že \tilde{T} se transformuje jako

$$\tilde{T}_{klm\dots} \rightarrow \tilde{T}'_{klm\dots} = R_{kk'} R_{ll'} R_{mm'} \dots \tilde{T}_{k'l'm' \dots} \quad , \quad (4.20)$$

a podobným způsobem pomocí kontrakce jedním nebo více tensory δ a ε konstruovat kontrahované tensory, které mohou vytvářet invariantní podprostory. V námi probíraném příkladu máme

$$T_{ij} = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} T_{lm} + \frac{1}{2} \left(T_{ij} + T_{ji} - \frac{2}{3} \delta_{ij} T_{kk} \right) + \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} \quad , \quad (4.21)$$

přičemž první člen můžeme zapsat také jako $(T_{ij} - T_{ji})/2$, protože platí identita

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl} \quad , \quad (4.22)$$

a druhý člen ve (4.21) je tvořen tak, aby jeho stopa byla nulová

$$\delta_{ij} \left(T_{ij} + T_{ji} - \frac{2}{3} \delta_{ij} T_{kk} \right) = 0 \quad . \quad (4.23)$$

Podívejme se, jak vypadají symetrické tensory s nulovou stopou tvořené pomocí tensorových součinů vektoru \vec{x} . Počínaje $l \geq 2$ budou tvořeny polynomy stupně l , první člen bude tvaru $x_i \dots x_i$, následovat budou členy $|\vec{x}|^2 \delta_{i_1 i_2} x_{i_3} \dots x_{i_l}$, $|\vec{x}|^4 \delta_{i_1 i_2} \delta_{i_3 i_4} x_{i_5} \dots x_{i_l}$ atd., se všemi pro zachování symetrie potřebnými permutacemi indexů a koeficienty volenými tak, aby měl výsledný tensor nulovou stopu (tj. aby kontrakce jedním nebo více δ -tensory dávala nulu). Tak například máme (napíšeme pro úplnost i tensory pro $l=0,1$)

$$\begin{aligned} Y^{l=0}(\vec{x}) &= 1 \quad , \quad Y_i^{l=1}(\vec{x}) = x_i \quad , \quad Y_{ij}^{l=2}(\vec{x}) = x_i x_j - \frac{1}{3} |\vec{x}|^2 \delta_{ij} \quad , \\ Y_{ijk}^{l=3}(\vec{x}) &= x_i x_j x_k - \frac{1}{5} |\vec{x}|^2 (\delta_{ij} x_k + \delta_{ik} x_j + \delta_{jk} x_i) \quad , \\ Y_{ijkl}^{l=4}(\vec{x}) &= x_i x_j x_k x_l - \frac{1}{7} |\vec{x}|^2 (\delta_{ij} x_k x_l + \delta_{ik} x_j x_l + \delta_{il} x_j x_k + \delta_{jk} x_i x_l + \delta_{jl} x_i x_k + \delta_{kl} x_i x_j) + \\ &\quad \frac{1}{35} |\vec{x}|^4 (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad , \quad \dots \end{aligned} \quad (4.24)$$

Není teď pro nás tak důležitý explicitní tvar polynomů, důležitá je jejich existence pro každou hodnotu l . Protože jsou tenzory $Y_{i_1 \dots i_l}$ symetrické a mají stopu rovnou nule, není možné konstruovat pomocí ε - a δ -tenzorů invariantní podprostory (vzhledem k rotacím). Transformují se tedy tedy tenzory $Y_{i_1 \dots i_l}$ pomocí ireducibilních reprezentací grupy rotací.

Pro dané l je dimenze reprezentace je dána počtem nezávislých tenzorů $Y_{i_1 \dots i_l}$. Nezávislé tenzory, které jsou symetrické v indexech i_1, \dots, i_l , lze charakterizovat pomocí počtu indexů p_1 nabývajících hodnotu 1 a počtu indexů p_2 nabývajících hodnotu 2. Počet indexů p_3 nabývajících hodnotu 3 už je dán vztahem $p_3 = l - p_1 - p_2$. Počet nezávislých tenzorů je tedy¹¹

$$d_l = \sum_{p_1=0}^l \sum_{p_2=0}^{l-p_1} 1 = \frac{1}{2}(l+1)(l+2) \quad . \quad (4.25)$$

Zatím jsem nevzal v úvahu požadavek nulové stopy, tj. že zúžení pomocí δ -tenzoru dává nulu. Zúžení symetrického tenzoru je opět symetrický tenzor, který má o dva indexy méně. Má-li být zúžení nula, dostáváme tak počet podmínek, rovný počtu složek symetrického tenzoru s $l-2$ indexy. Z toho už odvodíme, že symetrický tenzor s nulovou stopou má

$$D_l = d_l - d_{l-2} = \frac{1}{2}(l+1)(l+2) - \frac{1}{2}(l-1)l = 2l+1 \quad (4.26)$$

nezávislých složek.

Je užitečné zapisovat tenzory $Y_{i_1 \dots i_l}$ pomocí komplexních čísel jako (užijeme značení $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$)

$$Y_{lm} \propto \begin{cases} (x+iy)^m P^{l-m}(z, \sqrt{x^2+y^2}) & \text{pro } m=1, \dots, l \\ P^l(z, \sqrt{x^2+y^2}) & \text{pro } m=0 \\ (x-iy)^{|m|} P^{l-|m|}(z, \sqrt{x^2+y^2}) & \text{pro } m=-l, \dots, -1 \end{cases} \quad , \quad (4.27)$$

¹¹ Obecný výsledek je tento: symetrický tenzor s l indexy, které mohou nabývat n hodnot, má $\binom{l+n-1}{n-1}$ nezávislých složek.

kde $P^n(z, \sqrt{x^2 + y^2})$ jsou jisté homogenní polynomy stupně n v proměnných z a $\sqrt{x^2 + y^2}$.

Odhlédneme-li od normovacího faktoru a faktoru $|\vec{x}'|$, jsou Y_{lm} známé kulové funkce, které bývají často vyjádřeny pomocí úhlů θ a φ , daných kartézským vektorem \vec{x} .

Výše uvedené výsledky jsou odvozeny pomocí jednoduchých algebraických postupů. Působení grupy rotací na funkce lze popsat také jiným způsobem. Vzhledem k tomu, že změna funkce je indukována změnou argumentů, můžeme pomocí Taylorova rozvoje definovat diferenciální operátory, které převádějí funkci $\psi(\vec{x})$ na funkci $\psi'(\vec{x}) = \psi(R\vec{x})$. Prvním krokem je zavedení diferenciálního operátoru, který bude souviset s infinitesimální transformací. Při této transformaci máme

$$\psi(\vec{x}) \rightarrow \psi(\vec{x}') = \psi(\vec{x}) + \varepsilon_{ijk} \alpha_k x_j \frac{\partial \psi(\vec{x})}{\partial x_i} + O(\alpha^2), \quad (4.28)$$

kde jsme využili transformačních vlastností vektoru \vec{x} při infinitesimální rotaci

$$x_i \rightarrow x'_i = x_i + i(\vec{\alpha} \cdot \vec{L})_{ij} x_j + O(\alpha^2) = x_i + \varepsilon_{ijk} \alpha_k x_j + O(\alpha^2). \quad (4.29)$$

Ze vztahu (4.28) vidíme, že diferenciální operátory

$$L_i = -i \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (4.30)$$

hrají roli generátorů. Toto tvrzení si potvrdíme tím, že tyto operátory splňují stejné komutační relace jako generátory grupy rotací (jinak libovolnou konstantu ve (4.30) jsem zvolili tak, aby komutační relace byly skutečně identické)

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= i \varepsilon_{ikl} i \varepsilon_{jmn} \left[x_k \frac{\partial}{\partial x_l}, x_m \frac{\partial}{\partial x_n} \right] = \\ &= -\varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} \left(x_k \frac{\partial}{\partial x_l} x_m \frac{\partial}{\partial x_n} - x_m \frac{\partial}{\partial x_n} x_k \frac{\partial}{\partial x_l} \right) = \\ &= -\varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} \left(\delta_{lm} x_k \frac{\partial}{\partial x_n} - \delta_{nk} x_m \frac{\partial}{\partial x_l} \right) = \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jml} \left(x_k \frac{\partial}{\partial x_m} - x_m \frac{\partial}{\partial x_k} \right) = \\ &= \varepsilon_{ijl} \varepsilon_{lkm} x_k \frac{\partial}{\partial x_m} = i \varepsilon_{ijk} L_k. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Přechod od třetího ke čtvrtému řádku využívá Jacobiho identity (3.33).

S definicí (4.30) můžeme zapsat (4.28) jako

$$\psi(\vec{x}) \rightarrow \psi(\vec{x}') = \psi(\vec{x}) - i\alpha_i L_i \psi(\vec{x}) + O(\alpha^2) \quad , \quad (4.32)$$

kde si povšimneme znaménka minus u posledního členu. Výsledek můžeme zobecnit na konečné rotace a psát

$$\psi'(\vec{x}) = \psi(R(\vec{\alpha})\vec{x}) = \exp(-i\vec{\alpha} \cdot \vec{L})\psi(\vec{x}) \quad . \quad (4.33)$$

Věnujme se teď zmíněnému znaménku minus ve vztazích (4.32) a (4.33). Nejprve definujme

$$U(\vec{\alpha}) = \exp(i\vec{\alpha} \cdot \vec{L}) \quad , \quad (4.34)$$

takže (4.33) má tvar

$$\psi'(\vec{x}) = U^{-1}(\vec{\alpha})\psi(\vec{x}) \quad . \quad (4.35)$$

Skutečnost, že se objevuje inverzní operátor k $U(\vec{\alpha})$ vysvětlíme tak, že pouze tímto způsobem zachováme strukturu grupového násobení. Abychom to viděli, provedme ještě další rotaci charakterizovanou parametrem $\vec{\beta}$. Výsledkem je

$$\psi''(\vec{x}) = U^{-1}(\vec{\beta})\psi'(\vec{x}) = U^{-1}(\vec{\beta})U^{-1}(\vec{\alpha})\psi(\vec{x}) = \left(U(\vec{\alpha})U(\vec{\beta})\right)^{-1}\psi(\vec{x}) \quad . \quad (4.36)$$

Tato rovnice je zcela v soulasu se zápisem

$$\psi''(\vec{x}) = \psi\left(R(\vec{\alpha})R(\vec{\beta})\vec{x}\right) \quad . \quad (4.37)$$

Ještě jednou se vrátíme k základní formulaci problému, popsané v části 2. Kvantově mechanická vlnová funkce je řešením rotačně symetrické diferenciální rovnice

$$\mathcal{D}\psi(\vec{x}) = 0 \quad , \quad (4.38)$$

což znamená, že pokud je $\psi(\vec{x})$ řešením (4.38), je také $\psi(\vec{x}')$ řešením této rovnice. Odtud musí být

$$\mathcal{D}\left(\exp(-i\alpha_i L_i)\psi(\vec{x})\right) = 0 \quad . \quad (4.39)$$

Tato rovnice je splněna, když platí

$$\exp(i\alpha_i L_i)\mathcal{D}\exp(-i\alpha_i L_i) = \mathcal{D} \quad , \quad (4.40)$$

neboli

$$[L_i, \mathcal{D}] = 0 \quad . \quad (4.41)$$

V kvantové mechanice jsou generátory L_i přiřazeny složkám momentu hybnosti (až na faktor \hbar). Můžeme ukázat, že také celkový moment hybnosti \vec{L}^2 komutuje nejen s \mathcal{D} , ale také s každou složkou L_i zvlášť:

$$[L_i, \vec{L}^2] = [L_i, L_j] L_j - L_j [L_j, L_i] = i \varepsilon_{ijk} (L_k L_j + L_j L_k) = 0 \quad . \quad (4.42)$$

Operátor vytvořený tak, že komutuje se všemi generátory grupy se nazývá Casimirův operátor. Podle tzv. Schurova lemmatu každý operátor, který komutuje se všemi generátory grupy, musí být úměrný identitě v nějaké ireducibilní reprezentaci grupy. Důkaz lemmatu je jednoduchý. Uvažujme o množině matic $D(R)$ korespondujících prvkům grupy R , která vytváří ireducibilní reprezentaci grupy. Ať je C nějaká matice, která komutuje se všemi maticemi $D(R)$

$$[C, D(R)] = 0 \quad . \quad (4.43)$$

Vezměme vlastní vektor \mathbf{x} matice C s vlastní hodnotou λ

$$C \mathbf{x} = \lambda \mathbf{x} \quad . \quad (4.44)$$

Ze vztahu (4.43) plyne, že všechny vektory $D(R) \mathbf{x}$ jsou vlastními vektory C s vlastní hodnotou λ

$$C D(R) \mathbf{x} = D(R) C \mathbf{x} = \lambda D(R) \mathbf{x} \quad . \quad (4.45)$$

Takže podprostor vytvořený vektory $D(R) \mathbf{x}$ příslušejícími vlastní hodnotě λ je invariantní vůči transformacím z grupy. Avšak ireducibilní reprezentace nepřipouští žádný invariantní podprostor, z čehož lze vidět, že pro vektorový prostor příslušné reprezentace musí být $C \propto 1$.

Nyní ukážeme, jak spočítat vlastní hodnotu Casimirova operátoru \vec{L}^2 pro polynomy $Y_{i_1 \dots i_l}$ stupně l , které jsme dříve vytvořili (viz (4.24)) jako $2l+1$ rozměrnou reprezentaci grupy rotací. Podle definice (4.30)

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 &= L_i L_i = \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \varepsilon_{imn} x_m \frac{\partial}{\partial x_n} = \\ &= -x_j \frac{\partial}{\partial x_k} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} + x_j \frac{\partial}{\partial x_k} x_k \frac{\partial}{\partial x_j} = \\ &= -|\vec{x}|^2 \Delta + \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right)^2 + \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) , \end{aligned} \quad (4.46)$$

kde Laplaceův operátor je

$$\Delta = \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \right)^2 . \quad (4.47)$$

Druhý řádek v (4.46) plyne z identity (4.22); rovnost druhého a třetího nejsnáze ověříme, napíšeme-li v obou případech všechny derivace napravo.

Operátor \tilde{L}^2 bude působit na symetrické polynomy stupně l s nulovou stopou. Laplaceův operátor působící na polynom stupně l vytvoří polynom stupně $l-2$, ale stále ve všech proměnných. Indexy polynomů $Y_{i_1 \dots i_l}$ jsou určeny indexy souřadnic x_i a indexy δ -tensorů. Je tedy možné zapsat $\Delta Y_{i_1 \dots i_l}$ pomocí výrazů úměrných alespoň jednomu δ -tensoru, tj.

$$\Delta Y_{i_1 \dots i_l} = \delta_{i_1 i_2} \bar{Y}_{i_3 \dots i_l} + \dots , \quad (4.48)$$

kde $\bar{Y}_{i_3 \dots i_l}$ je symetrický polynom řádu $l-2$ a $+\dots$ jsou členy, které zaručují symetrii výsledného výrazu v indexech i_1, \dots, i_l . Výraz na levé straně (4.48) má nulovou stopu, tj. zúžení jedním nebo více δ -tensorů dává nulu. Musí být proto všechny \bar{Y} rovny nule a tedy

$$\Delta Y_{i_1 \dots i_l} = 0 . \quad (4.49)$$

Jednoduše se pak dá ukázat, že

$$\left(x_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) Y_{i_1 \dots i_l} = l Y_{i_1 \dots i_l} \quad (4.50)$$

a jako výsledek máme

$$\tilde{L}^2 Y_{i_1 \dots i_l} = l(l+1) Y_{i_1 \dots i_l} . \quad (4.51)$$

Tento výsledek je v souladu se Schurovým lemmatem: všechny polynomy $Y_{i_1 \dots i_l}$ patřící $2l+1$ rozměrné reprezentaci jsou vlastními vektory operátoru \tilde{L}^2 s touže vlastní hodnotou, rovnou v tomto případě $l(l+1)$.

Závěrem této části ukážeme, jak vypadají generátory součinnové reprezentace. Uvažujme tensorový součin vlnových funkcí $\psi_1(\vec{x})$ a $\psi_2(\vec{y})$. Při infinitesimálních rotacích se tyto vlnové funkce transformují jako

$$\begin{aligned} \psi_1(\vec{x}) &\rightarrow \psi_1(\vec{x}') = \left(1 - i \vec{\alpha} \cdot \tilde{L}^{(1)} + O(\alpha^2) \right) \psi_1(\vec{x}) , \\ \psi_2(\vec{y}) &\rightarrow \psi_2(\vec{y}') = \left(1 - i \vec{\alpha} \cdot \tilde{L}^{(2)} + O(\alpha^2) \right) \psi_2(\vec{y}) , \end{aligned} \quad (4.52)$$

přičemž generátory grupy rotací působící na $\psi_1(\vec{x})$ a $\psi_2(\vec{y})$ jsou

$$L_i^{(1)} = -i \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \quad , \quad L_i^{(2)} = -i \varepsilon_{ijk} y_j \frac{\partial}{\partial y_k} \quad . \quad (4.53)$$

Pro vlnovou funkci vytvořenou jako součin $\psi_1(\vec{x})$ a $\psi_2(\vec{y})$ je působení infinitesimální rotace dáno vztahem

$$\Psi(\vec{x}, \vec{y}) \rightarrow \Psi(\vec{x}', \vec{y}') = \left(1 - i \vec{\alpha} \cdot \vec{L}^{tot} + O(\alpha^2)\right) \Psi(\vec{x}, \vec{y}) \quad , \quad (4.54)$$

kde \vec{L}^{tot} je definován jako

$$\vec{L}^{tot} = \vec{L}^{(1)} + \vec{L}^{(2)} \quad (4.55)$$

neboli

$$L_i^{tot} = -i \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} - i \varepsilon_{ijk} y_j \frac{\partial}{\partial y_k} \quad . \quad (4.56)$$

Generátory součinnové reprezentace jsou (tzv. přímým¹²) součtem generátorů působících ve dvou (různých) reprezentacích.

5. Žebříkové operátory

Uvažujme o reprezentaci grupy rotací, generované pomocí hermiteovských matic I_1 , I_2 a I_3 , které splňují stejné komutační relace jako L_1 , L_2 a L_3 , dané v (3.14), tj.

$$[I_1, I_2] = i I_3 \quad , \quad [I_2, I_3] = i I_1 \quad , \quad [I_3, I_1] = i I_2 \quad , \quad (5.1)$$

neboli

$$[I_i, I_j] = i \varepsilon_{ijk} I_k \quad . \quad (5.2)$$

Požadujeme, aby matice I_i byly hermiteovské, tj.

$$I_i^+ = I_i \quad , \quad (5.3)$$

takže matice $\exp\{i \alpha_k I_k\}$ budou unitární. Nyní určíme všechny ireducibilní matice I_i daných vlastností a tak získáme všechny (konečněrozměrné, unitární) reprezentace grupy rotací.

Definujme nejprve lineární kombinace

$$I_{\pm} = I_1 \pm i I_2 \quad , \quad (5.4)$$

¹² Přímý součet znamená, že $\vec{L}^{(1)}$ a $\vec{L}^{(2)}$ působí v různých prostorech.

pro které $I_{\pm}^{\pm} = I_{\mp}$, a dále

$$[I_{\pm}, I_3] = [I_1, I_3] \pm i[I_2, I_3] = -iI_2 \mp I_1 = \mp I_{\pm} \quad . \quad (5.5)$$

Pro libovolný stav $|\psi\rangle$ bude tedy platit

$$I_3 I_{+} |\psi\rangle = I_{+} (I_3 + 1) |\psi\rangle \quad . \quad (5.6)$$

Casimirův operátor je takovou kombinací operátorů nějaké representace, že s ní všechny generátory komutují. Je-li representace ireducibilní, musí být každý Casimirův operátor násobkem jednotkové matice. V případě grupy rotací ve třech dimenzích je Casimirovým operátorem

$$\vec{I}^2 = I_1^2 + I_2^2 + I_3^2 \quad . \quad (5.7)$$

Ze vztahu (5.2) plyne

$$[\vec{I}^2, I_3] = 0 \quad . \quad (5.8)$$

Poněvadž \vec{I}^2 a I_3 jsou dvě komutující hermiteovské matice, mohou být současně přivedeny k diagonálnímu tvaru s reálnými vlastními hodnotami. Zároveň musí být vlastní hodnoty \vec{I}^2 kladné, protože platí

$$\langle \psi | \vec{I}^2 | \psi \rangle = |I_1 \psi|^2 + |I_2 \psi|^2 + |I_3 \psi|^2 \geq 0 \quad . \quad (5.9)$$

Je zvykem psát vlastní hodnoty \vec{I}^2 ve tvaru $l(l+1)$, přičemž $l \geq 0$.

Uvažujme teď stav $|l, m\rangle$, který je vlastním stavem \vec{I}^2 a I_3 s vlastními hodnotami $l(l+1)$ a m , tedy

$$\vec{I}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle \quad , \quad I_3 |l, m\rangle = m |l, m\rangle \quad . \quad (5.10)$$

Z (5.6) a (5.7) odvodíme, že

$$\begin{aligned} I_3 (I_{+} |l, m\rangle) &= (m+1) (I_{+} |l, m\rangle) \quad , \\ \vec{I}^2 (I_{+} |l, m\rangle) &= l(l+1) (I_{+} |l, m\rangle) \quad . \end{aligned} \quad (5.11)$$

Označíme-li $I_{+} |l, m\rangle = |\psi\rangle$, platí pak

$$I_3 |\psi\rangle = (m+1) |\psi\rangle \quad , \quad \vec{I}^2 |\psi\rangle = l(l+1) |\psi\rangle \quad , \quad (5.12)$$

jinými slovy, $|\psi\rangle$ je nový vlastní vektor I_3 a \vec{I}^2 s vlastními hodnotami $m' = m+1$ a $l(l+1)$, pokud ovšem není

$$|\psi\rangle \equiv I_+ |l, m\rangle = 0 \quad . \quad (5.13)$$

Dále máme

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= \langle l, m | I_- I_+ |l, m\rangle = \langle l, m | I_1^2 + I_2^2 + i[I_1, I_2] |l, m\rangle = \\ &= \langle l, m | I_1^2 + I_2^2 - I_3 |l, m\rangle = \langle l, m | \vec{I}^2 - I_3(I_3 + 1) |l, m\rangle \quad , \end{aligned} \quad (5.14)$$

kde jsme použili $I_+^+ = I_-$. S pomocí (5.10) pak

$$\langle\psi|\psi\rangle = [l(l+1) - m(m+1)] \langle l, m | l, m\rangle \quad . \quad (5.15)$$

Předpokládáme, že stav $|l, m\rangle$ je normovaný (tj. platí $\langle l, m | l, m\rangle = 1$), pak můžeme stav $|\psi\rangle$ psát jako násobek normovaného stavu $|l, m+1\rangle$, přičemž násobící faktor je dán (až na fázový faktor) vztahem (5.15). Fázový faktor ale můžeme zahrnout do definice stavu $|l, m+1\rangle$, takže dostáváme

$$I_+ |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m+1\rangle \quad . \quad (5.16)$$

Operátor I_+ vytváří tedy stavy s narůstající vlastní hodnotou operátoru I_3

$$|l, m\rangle \xrightarrow{I_+} |l, m+1\rangle \xrightarrow{I_+} |l, m+2\rangle \xrightarrow{I_+} |l, m+3\rangle \xrightarrow{I_+} \dots \quad . \quad (5.17)$$

Z tohoto důvodu se operátoru říká žebříkový (ladder) nebo krokový (step) operátor. Zajímají nás pouze matice I_i konečné dimenze, proto musí být posloupnost (5.17) někde ukončena. Podle (5.16) to nastane tehdy, jestliže je v posloupnosti (5.17) stav, pro který vlastní hodnota operátoru I_3 je rovna l . Tento výsledek je nezávislý na tom, se kterým stavem m jsme začali. Ostatně už z (5.15) je vidět, že z positivity výrazů $\langle\psi|\psi\rangle$ a $\langle l, m | l, m\rangle$ plyne $l(l+1) - m(m+1) \geq 0$ a tedy $-l-1 \leq m \leq l$. Abychom zajistili konečnost posloupnosti (5.17), musí být $l-m$ kladné celé číslo.

Máme pak

$$|l, m\rangle \xrightarrow{I_+} |l, m+1\rangle \xrightarrow{I_+} \dots \xrightarrow{I_+} |l, l\rangle \quad , \quad (5.18)$$

přítom vektor $|l, l\rangle$ přísluší největší možné vlastní hodnotě I_3 a platí

$$I_+ |l, l\rangle = 0 \quad . \quad (5.19)$$

Můžeme zcela obdobným způsobem ukázat, že také I_- je žebříkový operátor, který vytváří stavy s klesající vlastní hodnotou operátoru I_3 . Začneme-li opět ve stavu $|l, m\rangle$, dostáváme posloupnost

$$\dots \overset{I_-}{\leftarrow} |l, m-3\rangle \overset{I_-}{\leftarrow} |l, m-2\rangle \overset{I_-}{\leftarrow} |l, m-1\rangle \overset{I_-}{\leftarrow} |l, m\rangle . \quad (5.20)$$

Obdobně jako jsme postupovali u I_+ , zavedeme označení $I_-|l, m\rangle = |\psi\rangle$ a dostaneme

$$\langle \psi | \psi \rangle = [l(l+1) - m(m-1)] \langle l, m | l, m \rangle , \quad (5.21)$$

takže musí platit $l(l+1) - m(m-1) \geq 0$ a tedy $-l \leq m \leq l+1$. Abychom zajistili konečnost posloupnosti (5.20), musí existovat stav s minimální hodnotou $m = -l$, pro který

$$I_-|l, -l\rangle = 0 . \quad (5.22)$$

V analogii k (5.16) můžeme nyní (opět s volbou fázového faktoru v definici vektoru $|l, m-1\rangle$) psát

$$I_-|l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} |l, m-1\rangle . \quad (5.23)$$

Vyšli jsme z daného stavu $|l, m\rangle$. Pomocí operátoru I_+ jsme zkonstruovali $l-m$ vlastních vektorů operátoru I_3 s vlastními hodnotami $m+1, m+2, \dots, l$ a pomocí operátoru I_- $l+m$ vlastních vektorů operátoru I_3 s vlastními hodnotami $m-1, m-2, \dots, -l$. Tímto způsobem máme celkem $1+(l-m)+(l+m) = 2l+1$ stavů. Protože počet stavů udává celé číslo, musí nabývat l a tedy i m celočíselných nebo poločíselných hodnot.

Výše provedená konstrukce ještě nezaručuje, že jsme získali všechny možné stavy. V principu by bylo možné, že postupné působení operátoru I_+ a I_- vede ke stavu se stejnými vlastními hodnotami operátorů \vec{I}^2 a I_3 , který je odlišný od původního stavu $|l, m\rangle$. Můžeme obecně dokázat, že tomu tak není a že stavy $|l, m\rangle$ s $-l \leq m \leq l$ nejsou degenerované. Jednoduše to můžeme zkontrolovat explicitním výpočtem toho, že jsou splněny komutačních relace

$$[I_\pm, I_3] = \mp I_\pm , \quad [I_+, I_-] = 2I_3 . \quad (5.24)$$

Použitím (5.10), (5.16) a (5.23) máme postupně

$$\begin{aligned} (I_\pm I_3 - I_3 I_\pm) |l, m\rangle &= m \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)} |l, m\pm 1\rangle \\ &\quad - (m\pm 1) \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)} |l, m\pm 1\rangle = \\ &\quad \mp \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)} |l, m\pm 1\rangle = \mp I_\pm |l, m\rangle , \end{aligned} \quad (5.25)$$

$$\begin{aligned}
(I_+ I_- - I_- I_+) |l, m\rangle &= \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} |l, m\rangle \\
&\quad - \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m\rangle = \\
&\quad 2m |l, m\rangle = 2I_3 |l, m\rangle .
\end{aligned} \tag{5.26}$$

Shrneme-li teď výsledek: ireducibilní reprezentace I_1 , I_2 a I_3 je charakterizovaná číslem l a je vytvářena $2l+1$ stavy $|l, m\rangle$, pro které platí

$$\begin{aligned}
\vec{I}^2 |l, m\rangle &= l(l+1) |l, m\rangle , \\
I_3 |l, m\rangle &= m |l, m\rangle , \\
I_{\pm} |l, m\rangle &= \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)} |l, m\pm 1\rangle ,
\end{aligned} \tag{5.27}$$

přičemž $m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l$. Jak l , tak m nabývají celočíselných nebo poločíselných hodnot.

Uvedeme nyní jako příklad reprezentace pro $l=1/2, 1$ a $l=3/2$. Pro $l=1/2$ máme jednu dvojrozměrnou reprezentaci. Nacházíme dva různé stavy $|1/2, 1/2\rangle$ a $|1/2, -1/2\rangle$, pro které podle (5.27) platí

$$\begin{aligned}
I_+ |1/2, -1/2\rangle &= |1/2, 1/2\rangle , \quad I_+ |1/2, 1/2\rangle = 0 , \\
I_- |1/2, 1/2\rangle &= |1/2, -1/2\rangle , \quad I_- |1/2, -1/2\rangle = 0 .
\end{aligned} \tag{5.28}$$

Odsud pak máme vyjádření operátorů

$$I_3 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} , \quad I_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad I_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} . \tag{5.29}$$

Matice I_1 , I_2 a I_3 , které nám dává tato reprezentace jsou právě matice $\frac{1}{2}\tau_i$, o kterých budeme pojednávat v následující části 6.

Pro $l=1$ máme jednu trojrozměrnou reprezentaci. Nacházíme tři různé stavy $|1, 1\rangle$, $|1, 0\rangle$ a $|1, -1\rangle$, pro které podle (5.27) platí

$$\begin{aligned}
I_+ |1, -1\rangle &= \sqrt{2} |1, 0\rangle , \quad I_- |1, 1\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle , \\
I_+ |1, 0\rangle &= \sqrt{2} |1, 1\rangle , \quad I_- |1, 0\rangle = \sqrt{2} |1, -1\rangle , \\
I_+ |1, 1\rangle &= 0 , \quad I_- |1, -1\rangle = 0 .
\end{aligned} \tag{5.30}$$

Vyjádření operátorů je pak

$$I_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad I_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.31)$$

Pro $l=3/2$ máme jednu čtyřrozměrnou reprezentaci. Nacházíme čtyři různé stavy $|3/2, 3/2\rangle, |3/2, 1/2\rangle, |3/2, -1/2\rangle$ a $|3/2, -3/2\rangle$, pro které podle (5.27) platí

$$\begin{aligned} I_+ |3/2, -3/2\rangle &= \sqrt{3} |3/2, -1/2\rangle, & I_- |3/2, 3/2\rangle &= \sqrt{3} |3/2, 1/2\rangle, \\ I_+ |3/2, -1/2\rangle &= 2 |3/2, 1/2\rangle, & I_- |3/2, 1/2\rangle &= 2 |3/2, -1/2\rangle, \\ I_+ |3/2, 1/2\rangle &= \sqrt{3} |3/2, 3/2\rangle, & I_- |3/2, -1/2\rangle &= \sqrt{3} |3/2, -3/2\rangle \\ I_+ |3/2, 3/2\rangle &= 0, & I_- |3/2, -3/2\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Operátory jsou

$$I_3 = \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{pmatrix}, \quad I_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.33)$$

Poznamenejme, že matici I_- jsme nemuseli počítat stejně pečlivě podle (5.27) jako matici I_+ , ale mohli jsme využít vztahu $I_- = I_+^\dagger$.

6. Grupa $SU(2)$

V předchozí části jsme konstruovali daným postupem reprezentace grupy rotací ve třírozměrném prostoru (tato grupa rotací je charakterizována třemi reálnými parametry). Nyní se podíváme, zda neexistují ještě jiné možnosti. Všimneme si nejprve vlastností unitárních matic X dimenze 2×2 s determinantem rovným 1:

$$X^\dagger = X^{-1}, \quad \det X = 1. \quad (6.1)$$

Tyto matice mohou být parametrizovány pomocí dvou komplexních parametrů a a b :

$$X = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad (6.2)$$

přičemž $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Matice tvaru (6.2) s obecnými a a b se nazývají kvaterniony. Kvaterniony tvoří okruh, podobně jako reálná nebo komplexní čísla. Kvaterniony s normou 1 (tj. s parametry a a b splňujícími $|a|^2 + |b|^2 = 1$) jsou prvky grupy $SU(2)$, grupy unitárních matic dimenze 2×2 s determinantem rovným 1.¹³ Není obtížné ukázat, že matice vyhovující (6.1) tvoří grupu. Dále, pokud splňují X_1 a X_2 (6.1), pak také $X_3 = X_1 X_2$ splňuje tento vztah. Také jednotková matice a matice inverzní k (6.1) patří do množiny matic (6.1), a že pravidlo násobení matic splňuje požadavky grupového násobení je zřejmé.

Komplexní čísla a a b splňující podmínku $|a|^2 + |b|^2 = 1$ můžeme vyjádřit pomocí tří reálných parametrů, takže máme opět co dělat s třírozměrnou Lieovou grupou. Tato skutečnost navozuje otázku, mají-li grupy $SU(2)$ a grupa rotací $SO(3)$ nějakou souvislost.

Každá matice dimenze 2×2 může být vyjádřena jako kombinace 1 (jednotkové matice) a následujících tří matic¹⁴ :

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.3)$$

Tyto τ – matice splňují následující pravidlo násobení

$$\tau_i \tau_j = \delta_{ij} 1 + i \varepsilon_{ijk} \tau_k. \quad (6.4)$$

Matice X můžeme vyjádřit pomocí matic 1, τ_i jako

$$X = c_0 1 + i c_i \tau_i. \quad (6.5)$$

Srovnáním parametrizace (6.5) s parametrizací (6.2) vidíme, že koeficienty c_0 a c_i musí být reálné a že normovací podmínka $|a|^2 + |b|^2 = 1$ implikuje

$$c_0^2 + c_i c_i = 1. \quad (6.6)$$

Obecné matice z grupy $SU(2)$ mohou být zapsány ve tvaru (6.5), při přihlédnutí k podmínce (6.6).

¹³ V tomto smyslu tvoří komplexní čísla s normou 1 grupu $U(1)$, pozůstávající ze všech faktorů $\exp(i\alpha)$.

¹⁴ Často se jim říká Pauliho matice a bývají značeny jako σ_i .

Podívejme se nyní na infinitesimální matice $SU(2)$. V okolí jednotkové matice budeme psát

$$X = 1 + iB + O(B^2) \quad , \quad (6.7)$$

kde (infinitesimální) matici B musíme zvolit tak, aby byla splněna podmínka (6.1). To vede k následujícím omezením

$$\begin{aligned} (1 + iB + O(B^2))^+ &= (1 + iB + O(B^2))^{-1} \Rightarrow \\ 1 - iB^+ + O(B^2) &= 1 - iB + O(B^2) \quad , \\ \det(1 + iB + O(B^2)) &= 1 \Rightarrow 1 + \text{Tr}B + O(B^2) = 1 \quad , \end{aligned} \quad (6.8)$$

takže

$$B^+ = B \quad , \quad \text{Tr}B = 0 \quad . \quad (6.9)$$

Vzhledem k tomu, že každá hermiteovská matice s nulovou stopou dimense 2×2 může být vyjádřena jako lineární kombinace τ – matic s reálnými koeficienty, můžeme infinitesimální transformace z $SU(2)$ zapsat ve tvaru

$$X(\vec{\alpha}) = 1 + i\alpha_i \frac{\tau_i}{2} + O(\alpha^2) \quad . \quad (6.10)$$

Tyto infinitesimální transformace mohou generovat pomocí exponenciálního zobrazení konečné transformace. Limitní přechod je stejný jako v části 3, tj.

$$X(\vec{\alpha}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ 1 + i \frac{\alpha_i \tau_i}{n} \right\}^n = \exp\left(i\alpha_i \frac{\tau_i}{2}\right) \quad . \quad (6.11)$$

Vybrali jsme parametry α_i tak, aby generátory transformací z $SU(2)$ byly dány maticemi $\tau_i/2$. Potom totiž splňují tyto matice stejné komutační relace, jako generátory L_i grupy rotací. Plyne to přímo z pravidla pro násobení (6.4):

$$\left[\frac{\tau_i}{2}, \frac{\tau_j}{2} \right] = i \varepsilon_{ijk} \frac{\tau_k}{2} \quad . \quad (6.12)$$

Tyto komutační relace tedy říkají, že grupa $SU(2)$ má stejné strukturní konstanty a tedy stejné vlastnosti násobení jako grupa rotací v trojrozměrném prostoru. To ovšem platí pro prvky v okolí jednotky, nikoliv nutně pro grupu jako celek. Skutečně uvidíme, že striktně vzato netvoří matice grupy $SU(2)$ reprezentaci grupy rotací, ale pouze projektivní reprezentaci.

Je možné nalézt pomocí vlastností τ – matic nové vyjádření exponenciální transformace $X(\vec{\alpha})$. Postupujeme následujícím způsobem

$$X(\vec{\alpha}) = \exp\left(i\alpha_i \frac{\tau_i}{2}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\alpha_i \tau_i}{2}\right)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{i\alpha_i \tau_i}{2}\right)^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{i\alpha_i \tau_i}{2}\right)^{2n+1}, \quad (6.13)$$

tedy počítáme zvlášť součet sudých a lichých mocnin $i\alpha_i \tau_i/2$. Všimněme si teď, že

$$(i\alpha_i \tau_i)^2 = -\alpha_i \alpha_j \tau_i \tau_j = -\alpha^2 1, \quad (6.14)$$

kde jsem využili (6.4) a definovali α jako

$$\alpha = \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2}. \quad (6.15)$$

Z (6.14) pak okamžitě plyne

$$(i\alpha_i \tau_i)^{2n} = (-1)^n \alpha^{2n} 1, \quad (i\alpha_i \tau_i)^{2n+1} = (-1)^n \alpha^{2n} (i\alpha_i \tau_i), \quad (6.16)$$

takže můžeme (6.13) zapsat jako

$$X(\vec{\alpha}) = \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^{2n} \right\} 1 + \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^{2n+1} \right\} \frac{i\alpha_i \tau_i}{\alpha} = \cos \frac{\alpha}{2} 1 + i \sin \frac{\alpha}{2} \frac{\alpha_i \tau_i}{\alpha}. \quad (6.17)$$

Tento výsledek je přirozeně v souladu s obecným rozkladem (6.5), kde za koeficienty c_0 a c_i dosadíme

$$c_0 = \cos \frac{\alpha}{2}, \quad c_i = \frac{\alpha_i}{\alpha} \sin \frac{\alpha}{2}. \quad (6.18)$$

V části 3 jsme dospěli k závěru, že rotace mohou být parametrizovány pomocí vektorů $\vec{\alpha}$, které vyplňují kouli o poloměru $\alpha = \pi$. Směr $\vec{\alpha}$ určuje osu rotace a délka α úhel, o který soustavu kolem osy otočíme. Protože otočení o π a $-\pi$ vede k témuž výsledku, mohli jsme psát

$$\alpha = \pi \Rightarrow R(\vec{\alpha}) = R(-\vec{\alpha}). \quad (6.19)$$

Jak plyne z (6.12), mohou být prvky z $SU(2)$ parametrizovány těmi samými vektory $\vec{\alpha}$, avšak abychom parametrizovali všechny prvky $X(\vec{\alpha})$, musí být poloměr koule dvojnásobný, tedy

roven 2π . Dva protilehle orientované vektory $\vec{\alpha}$ a $\vec{\alpha}'$ v této kouli, pro které platí $\alpha + \alpha' = 2\pi$, popisují tutéž rotaci

$$R(\vec{\alpha}) = R(\vec{\alpha}') \quad , \quad (6.20)$$

protože jde o otočení kolem stejné osy o úhel otočení se liší o 2π . Odpovídající prvky $SU(2)$, tj. $X(\vec{\alpha})$ a $X(\vec{\alpha}')$ jsou však navzájem opačné

$$X(\vec{\alpha}) = -X(\vec{\alpha}') \quad . \quad (6.21)$$

Plyne to z (6.17), (6.18) a ze vztahů $\cos(\alpha'/2) = -\cos(\alpha/2)$ a $\sin(\alpha'/2) = \sin(\alpha/2)$.

Výše uvedené znamená, že striktně vzato prvky $SU(2)$ netvoří reprezentaci rotační grupy, ale projektivní reprezentaci. Totiž, pro součin rotací

$$R(\vec{\alpha})R(\vec{\beta}) = R(\vec{\gamma}) \quad (6.22)$$

s $\alpha, \beta, \gamma \leq \pi$ máme součin odpovídajících matic z $SU(2)$

$$X(\vec{\alpha})X(\vec{\beta}) = \pm X(\vec{\gamma}) \quad , \quad (6.23)$$

kde znaménko na pravé straně rovnice závisí na $\vec{\alpha}$ a $\vec{\beta}$.¹⁵

Věnujme se nyní reprezentacím grupy $SU(2)$. Necháme matice z $SU(2)$ působit v abstraktním vektorovém prostoru s komplexními souřadnicemi φ^α , $\alpha = 1, 2$, takže¹⁶

$$\varphi^\alpha \rightarrow \varphi'^\alpha = X_\beta^\alpha \varphi^\beta \quad . \quad (6.24)$$

Komplexně sdružené vektory se transformují jako

$$\varphi_\alpha^* \rightarrow \varphi_\alpha'^* = (X_\alpha^\beta)^* \varphi_\beta^* \quad . \quad (6.25)$$

Zavedli jsme důležité nové značení: indexy mohou být umístěny nahoře i dole. Je to proto, abychom zdůraznili, že vektory s indexy nahoře, jako např. v (6.24), se transformují odlišně od vektorů s indexem dole, jako např. v (6.25). Kromě toho ještě upravíme součtové pravidlo: přes dva stejně značené indexy se sčítá pouze tehdy, je-li jeden horní a jeden dolní, tedy

¹⁵ Na druhé straně můžeme říci, že trojrozměrné rotace tvoří reprezentaci grupy $SU(2)$.

¹⁶ Souřadnice φ^α nemají bezprostřední fyzikální interpretaci.

$$\phi_\alpha \psi^\alpha \equiv \sum_{\alpha=1}^2 \phi_\alpha \psi^\alpha . \quad (6.26)$$

Ještě ukážeme, že reprezentace odpovídající maticím X^* je ekvivalentní původní reprezentaci. Platí vztah

$$\tau_2 X \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^* & b^* \\ -b & a \end{pmatrix} = X^* . \quad (6.27)$$

Protože $\tau_2^2=1$, jsou podle definice (4.3) reprezentace (6.24) a (6.25) ekvivalentní. Poslední výsledek snadněji pochopíme z následujícího:

$$X_{\alpha'}^\alpha X_{\beta'}^\beta \varepsilon^{\alpha' \beta'} = \det X \varepsilon^{\alpha \beta} = \varepsilon^{\alpha \beta} . \quad (6.28)$$

S využitím $\varepsilon^{\alpha \beta} = i(\tau)^{\alpha \beta}$ můžeme (6.28) zapsat v maticové formě

$$X i \tau_2 X^T = i \tau_2 . \quad (6.29)$$

Protože $X^T = (X^+)^* = (X^{-1})^*$, plyne z (6.29) okamžitě (6.27). Všimněme si, že jsme napsali u prvků matice τ_2 oba indexy jako horní. Je to proto, že v (6.28) musí mít tensor $\varepsilon^{\alpha \beta}$ oba indexy horní. Jedinými invariantními tensory jsou $\varepsilon^{\alpha \beta}$, $\varepsilon_{\alpha \beta}$ a δ_β^α .

Budeme nyní uvažovat o analytických funkcích dvou proměnných $f(\varphi^1, \varphi^2)$. Při Taylorově rozvoji těchto funkcí kolem počátku vytváříme jako členy řady N – tého řádu homogenní symetrické polynomy N – tého stupně (N bude dále označovat nějaké přirozené číslo). Označme

$$Y^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} = \varphi^{\alpha_1} \varphi^{\alpha_2} \dots \varphi^{\alpha_N} . \quad (6.30)$$

Vzhledem k $SU(2)$ se tyto výrazy transformují jako

$$Y^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} \rightarrow Y'^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} = X_{\alpha'_1}^{\alpha_1} Y^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} = \quad (6.31)$$

Na rozdíl od grupy rotací nemáme v případě $SU(2)$ grupově invariantní operaci kontrakce pomocí δ - tensorů, vzhledem k tomu, že X nejsou obecně ortogonální, ale unitární. Musíme tedy obecně uvážit, že

$$X_{\alpha'}^\alpha X_{\beta'}^\beta \delta^{\alpha' \beta'} \neq \delta^{\alpha \beta} . \quad (6.32)$$

Jak jsme už uvedli, jediná delta funkce, kterou můžeme u $SU(2)$ uvažovat, má jeden index nahore a jedem dole. Nebudeme se dále zabývat komplexně sdruženými souřadnicemi φ^* , neboť jsme již zjistili, že se transformují podle reprezentací ekvivalentních k transformacím φ . Vzhledem k výše uvedeným skutečnostem očekáváme, že se tensory $Y^{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_N}$ budou transformovat podle ireducibilních reprezentací grupy $SU(2)$. Nezávislé polynomy tohoto typu jsou plně charakterizovány počtem p_1 indexů, které nabývají hodnotu 1 (počet zbylých indexů, které nabývají hodnotu 2 je $p_2 = N - p_1$), takže máme celkem

$$\sum_{p_1=0}^N 1 = N + 1 \quad (6.33)$$

nezávislých polynomů stupně N .

Dále budeme chtít zapsat působení generátorů $SU(2)$ na funkce souřadnic pomocí diferenciálních operátorů. To vede k

$$L_i^{SU(2)} = -\frac{1}{2}(\tau_i)_\beta^\alpha \varphi^\beta \frac{\partial}{\partial \varphi^\alpha} \quad , \quad (6.34)$$

takže infinitesimální transformace z $SU(2)$ funkce $\psi(\varphi)$ můžeme zapsat jako

$$\begin{aligned} \psi(\varphi) \rightarrow \psi'(\varphi) &= \left(1 - i \vec{\alpha} \cdot \vec{L}^{SU(2)} + O(\alpha^2)\right) \psi(\varphi) = \\ &= \psi(\varphi) + \frac{i}{2} \sum_i \alpha_i (\tau_i)_\beta^\alpha \varphi^\beta \frac{\partial \psi(\varphi)}{\partial \varphi^\alpha} + O(\alpha^2) \quad . \end{aligned} \quad (6.35)$$

Povšimněme si, že index α ve výrazu $\partial/\partial \varphi^\alpha$ považujeme za dolní index.

S pomocí (6.34) můžeme také Casimirův operátor $(\vec{L}^{SU(2)})^2$ zapsat jako diferenciální operátor

$$\begin{aligned} (\vec{L}^{SU(2)})^2 &= \frac{1}{4} \sum_i (\tau_i)_\beta^\alpha \varphi^\beta \frac{\partial}{\partial \varphi^\alpha} (\tau_i)_\delta^\gamma \varphi^\delta \frac{\partial}{\partial \varphi^\gamma} = \\ &= \frac{1}{4} (-\delta_\beta^\alpha \delta_\delta^\gamma + 2 \delta_\delta^\alpha \delta_\beta^\gamma) \varphi^\beta \frac{\partial}{\partial \varphi^\alpha} \varphi^\delta \frac{\partial}{\partial \varphi^\gamma} = \\ &= -\frac{1}{4} \varphi^\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi^\alpha} \varphi^\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi^\gamma} + \frac{1}{2} \varphi^\beta \frac{\partial}{\partial \varphi^\alpha} \varphi^\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi^\beta} = \\ &= \frac{1}{4} \left(\varphi^\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi^\alpha} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\varphi^\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi^\alpha} \right) \quad . \end{aligned} \quad (6.36)$$

Rovnost výrazů na posledních dvou řádcích (6.36) uvidíme snadno, napíšeme-li v obou diferenciální operátory napravo od souřadnic. Přejít od prvního řádku ke druhému je triviální, využijeme-li identitu

$$\sum_i (\tau_i)_\beta^\alpha (\tau_i)_\delta^\gamma = -\delta_\beta^\alpha \delta_\delta^\gamma + 2 \delta_\delta^\alpha \delta_\beta^\gamma . \quad (6.37)$$

Tuto identitu můžeme dokázat pohodlně, vyjdeme-li z toho, že každou matici A dimenze 2×2 můžeme rozložit pomocí jednotkové matice a tří τ – matic na

$$A_\beta^\alpha = \frac{1}{2} \delta_\beta^\alpha \text{Tr} A + \frac{1}{2} \sum_i (\tau_i)_\beta^\alpha \text{Tr} (A \tau_i) . \quad (6.38)$$

Derivujeme-li tuto rovnici, která je lineárně závislá na prvcích matice A , podle A_γ^δ dostaneme právě identitu (6.37). Samozřejmě můžeme také identitu ověřit postupným dosazením konkrétních hodnot indexů α, β, γ a δ .

Nechme nyní operátor (6.36) působit na polynomy $Y^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N}$. Využijeme toho, že

$$\left(\varphi^\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi^\alpha} \right) Y^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} = N Y^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} \quad (6.39)$$

a dostaneme tak přímo

$$\left(\vec{L}^{SU(2)} \right)^2 Y^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} = \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) Y^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} . \quad (6.40)$$

Poznáváme v tom reprezentace charakterizované hodnotou l z části 5, označíme-li $l=s$, $s=N/2$. Podařilo se nám tedy zkonstruovat $2s+1$ -rozměrné reprezentace grupy $SU(2)$, kde s nabývá poločíselných nebo celočíselných hodnot. Vlastní hodnoty Casimirova operátoru jsou pro tyto reprezentace podle (6.40) rovny $s(s+1)$. V části 5 je ukázáno, že jsme takto našli všechny reprezentace $SU(2)$.

Očekáváme, že pro celočíselné hodnoty s budou tyto reprezentace shodné s reprezentacemi grupy rotací, které jsme studovali v předchozí části. Je to opravdu tak, což ukážeme následujícím způsobem: uvažujme tensor $Y^{\alpha\beta}$, kvadratický v souřadnicích φ :

$$Y^{\alpha\beta} = \varphi^\alpha \varphi^\beta . \quad (6.41)$$

Máme tři nezávislé tensorové tohoto typu, které můžeme zapsat jako

$$\xi_i = \varphi^\alpha \varepsilon_{\alpha\gamma} (\tau_i)_\beta^\gamma \varphi^\beta , \quad (6.42)$$

což plyne z možnosti zápisu obecné symetrické matice dimenze 2×2 jako lineární kombinace nezávislých symetrických matic $\varepsilon \tau_i$.^{*} Při transformacích z $SU(2)$ se veličiny ξ_i transformují jako

$$\begin{aligned} \xi_i &\rightarrow \xi'_i = \varphi^{\alpha'} X_{\alpha'}^{\alpha} \varepsilon_{\alpha\gamma} (\tau_i)^{\gamma}_{\beta} X_{\beta'}^{\beta} \varphi^{\beta'} = \\ &\varphi^{\alpha'} \varepsilon_{\alpha'\gamma'} (X^{-1})^{\gamma'}_{\gamma} (\tau_i X)^{\gamma}_{\beta'} \varphi^{\beta'} \quad , \end{aligned} \quad (6.43)$$

kde jsme využili toho, že $\varepsilon_{\alpha\beta}$ je invariantní tensor, podobně jako $\varepsilon^{\alpha\beta}$ podle (6.28). Můžeme dokázat, že platí

$$X^{-1}(\vec{\alpha}) \tau_i X(\vec{\alpha}) = \sum_j R(\vec{\alpha})_{ij} \tau_j \quad , \quad (6.44)$$

takže tensory ξ_i se transformují stejně, jako souřadnice x_i v části 3. Platnost (6.44) ověříme pro infinitesimální transformace. Máme

$$\begin{aligned} X^{-1}(\vec{\alpha}) \tau_i X(\vec{\alpha}) &= \left(1 - \frac{i}{2} \alpha_j \tau_j + O(\alpha^2) \right) \tau_i \left(1 - \frac{i}{2} \alpha_k \tau_k + O(\alpha^2) \right) = \\ &\tau_i + \frac{i}{2} \alpha_j [\tau_i, \tau_j] + O(\alpha^2) = \tau_i + \varepsilon_{ijk} \tau_j \alpha_k + O(\alpha^2) \quad . \end{aligned} \quad (6.45)$$

Tedy stejná transformace jako transformace souřadnic x_i (4.29).

7. Spin a amplituda rozptylu

V předchozích částech jsme viděli, jak mohou být možné vlnové funkce rotačně invariantní soustavy klasifikovány podle reprezentací rotační grupy. Tyto reprezentace byly charakterizovány poločíselnými nebo celočíselnými hodnotami, značenými l nebo s . Tuto skutečnost známe z popisu atomu vodíku, kde možné vlnové funkce závisí na celočíselném l , které určuje celkový moment hybnosti daného stavu. Generátory L_k , které jsme definovali v předchozím (viz (4.30)), odpovídají složkám operátoru momentu hybnosti. Vyplývá to ze souřadnicové reprezentace operátoru přiřazenému hybnosti, který působí na vlnovou funkci jako

^{*} Je $\xi_1 = (\varphi^1)^2 - (\varphi^2)^2$, $\xi_2 = i((\varphi^1)^2 + (\varphi^2)^2)$, $\xi_3 = -2\varphi^1 \varphi^2$.

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \quad . \quad (7.1)$$

Složky operátoru přiřazenému momentu hybnosti $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ pak mají stejný tvar jako (4.30), odhlédneme-li od faktoru \hbar . Podle (4.51) je pak celkový (vnější) moment hybnosti dán rovnicí pro vlastní hodnoty

$$\vec{L}^2 |\psi\rangle = l(l+1) |\psi\rangle \quad . \quad (7.2)$$

Je však také možné, že částice mají nějaký vnitřní moment hybnosti, jehož příspěvek k celkovému momentu je dán vnitřní strukturou částice, nikoliv pohybem (těžiště) částice. Obrazně je možné si představit, že částice má konečné rozměry a rotace kolem těžiště přispívá k celkovému momentu, tato část momentu hybnosti se nazývá spin částice. Takovou situaci známe z klasické mechaniky (příkladem je rotující káča). Tato interpretace vnitřního momentu je jistě problematická, ale pro nás to není podstatné. Důležité pro nás je, že vnitřní moment hybnosti je přirozeným způsobem popsán formalismem probíraným v předchozích částech. Je pak věcí experimentálního zjištění, jsou-li vytvořené matematické struktury v přírodě realizovány. Pro částice se spinem nemusí vystupovat pouze reprezentace s celočíselnou hodnotou l . Skutečně existují v přírodě částice s poločíselným spinem, jako elektron, proton a neutron.

Z teorie reprezentací vím, že pro částici se spinem s budeme mít $2s+1$ různých stavů.¹⁷ Má proto vlnová funkce částice $2s+1$ složek. Při rotacích se transformují složky navzájem podle příslušné reprezentace grupy rotací. Skutečnost, že se částice může nacházet v různých spinových stavech má přirozeně vliv na výsledky experimentů. Mnoho experimentů týkajících se existence spinu, jakož i vlastností se spinem spojených využívá toho, že spin indukuje magnetický moment. Známý Sternův – Gerlachův experiment může sloužit jako příklad. Jiný příklad, z něhož vyplývá existence různých spinových stavů je měření úhlového rozložení při rozptylových experimentech. V této části budeme výše uvedené ilustrovat na příkladu rozptylu protonu na jádře atomu uhlíku.

Protony mají spin $s=1/2$, takže máme dva různé „druhy“ protonů, což je popsáno vlnovou funkcí o dvou složkách. Obvykle píšeme vlnovou funkci jako součin funkce, popisující

¹⁷ Výjimku tvoří částice s nulovou hmotností, jako je foton, které se vždy pohybují rychlostí světla. Pro takové částice existují pouze dva různé stavy; spin je v tomto případě definován jiným způsobem.

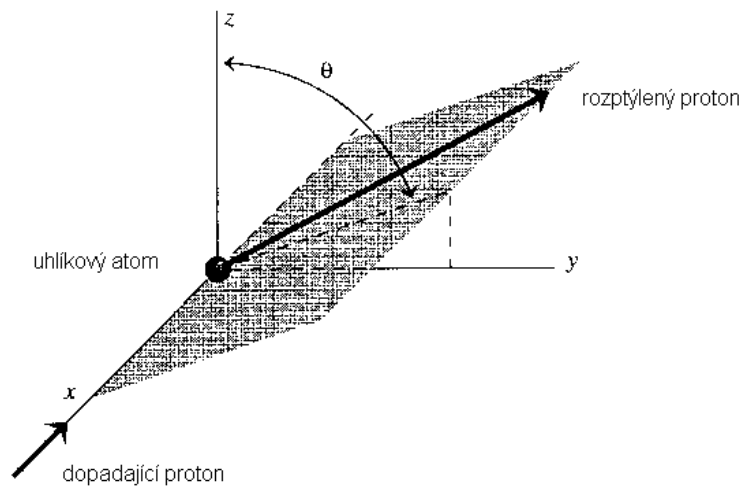
prostorovou část a dvousložkového spinoru. Dva různé spinové stavy protonu můžeme popsat pomocí nezávislých vlnových funkcí ψ_1 a ψ_2 , kde

$$\psi_1(\vec{r}) = f(\vec{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2(\vec{r}) = f(\vec{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.3)$$

Výše uvedené stavy jsou vlastními stavy generátoru $L_3^{SU(2)}$, který je spojen s rotací kolem osy z . O prvním ze stavů říkáme, že odpovídá orientaci spinu v kladném směru osy z ($S_z = \hbar/2$), o druhém pak, že odpovídá orientaci spinu v záporném směru osy z ($S_z = -\hbar/2$). Při rotacích se mohou tyto stavy vzájemně zaměnit. Například rotace kolem osy x o π radiánů působí na spinory jako násobení maticí (viz (6.17))

$$X = i\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.4)$$

takže se opravdu dva stavy ze (7.3) vymění.



Obrázek 3 Rozptyl protonu na uhlíku. Protony dopadají podél osy x a jsou odchýleny o úhel θ . Tento úhel je definován jako úhel, který svírá osa z s rovinou, ve které se pohybuje dopadající i rozptýlený proton.

Uvažujme nyní o pokusu, kdy je proton rozptýlen na jádře atomu uhlíku (C^{12}). Ať proton dopadá podél kladného směru osy x na jádro, umístěné v počátku souřadné soustavy. Jádro atomu uhlíku

je (v dobrém přiblížení) rotačně souměrné a tak můžeme srovnávat rozptyl protonů se spinem „nahoru“ (tedy protonů s $S_z = \hbar/2$) s rozptylem protonů se spinem „dolů“, tj. s $S_z = -\hbar/2$. Ukazuje se, že v jednom případě se protony odchyľují především do směru záporné osy y , v druhém případě do směru kladné osy y . Je to důsledkem chování amplitudy rozptylu, která určuje pravděpodobnost, s jakou s proton odchýlí o úhel θ , v tomto případě definovaném jako úhel mezi osou z a rovinou rozptylu (tj. rovinou ve které se pohybují dopadající i rozptýlené protony, viz Obrázek 3). Ukazuje se, že amplituda rozptylu silně závisí na spinu dopadající částice (předpokládáme, že částice, na níž dochází k rozptylu, v našem případě jádro atomu uhlíku, má nulový spin a je rotačně souměrná); čím vyšší je hodnota spinu dopadající částice, tím složitější je úhlová závislost amplitudy rozptylu. Zdůrazňme zde, že amplituda rozptylu je plně (až na konstanty) určena požadavkem rotační invariance.

Všimněme si teď kvantově mechanických stavů před a po srážce.¹⁸ Před srážkou je hybnost protonů určena podmínkami experimentu, zatímco spinový stav můžeme volit podle potřeby; jádro uhlíkového atomu je v základním stavu. Počáteční stavy, které můžeme rozlišit, označíme tedy jako $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$, budou shodné s vlnovými funkcemi (7.3). Charakterizovat možné stavy po rozptylu je už mnohem obtížnější. Změní se hybnost i orientace spinu protonu, a také jádro uhlíku se může začít pohybovat a případně se dostat do nabuzeného stavu. Avšak s výjimkou úhlu rozptylu, který je určen rovinou, ve které se pohybuje dopadající a rozptýlený proton, nemůže tento experiment všechny detaily stavu soustavy proton – jádro postihnout, nebo alespoň se o tyto detaily nebudeme zajímat. Možné koncové stavy budeme značit $|\psi_{\{\rho\}}(\theta)\rangle$, kde $\{\rho\}$ značí soubor veličin, jejichž stav nemůžeme nebo nechceme v experimentu zjišťovat.

Pravděpodobnost, že po rozptylu bude stav protonu v počátečním stavu se spinem „nahoru“ charakterizován hodnotami $\{\rho\}$ a θ , je rovna $\left| \langle \psi_{\{\rho\}}(\theta) | \uparrow \rangle \right|^2$. Protože veličiny $\{\rho\}$ nás nezajímají,

¹⁸ Počáteční stav je charakterizován vlnovou funkcí pro $t \rightarrow -\infty$, tj. pro čas velmi dlouho před rozptylem. Podobně koncový stav je charakterizován vlnovou funkcí pro $t \rightarrow \infty$, tj. pro čas velmi dlouho po rozptylu. Takto určené stavy jsou označovány jako „in“ a „out“. Při výpočtu skalárního součinu bychom měli uvažovat vlnové funkce ve stejném okamžiku. I když principiálně je tato otázka velmi důležitá, pro náš případ nehraje žádnou důležitou roli.

je pravděpodobnost rozptylu do úhlu θ dána vztahem¹⁹

$$f_1(\theta) = \sum_{\{\rho\}} \left| \langle \psi_{\{\rho\}}(\theta) | \uparrow \rangle \right|^2 . \quad (7.5)$$

Obdobně spočteme pravděpodobnost, že po rozptylu nalezneme proton v počátečním stavu se spinem „dolů“ rozptýlen do úhlu θ :

$$f_2(\theta) = \sum_{\{\rho\}} \left| \langle \psi_{\{\rho\}}(\theta) | \downarrow \rangle \right|^2 . \quad (7.6)$$

Při rotaci o π kolem osy x přejde úhel θ na $\theta + \pi$, zatímco se dva spinové stavy v (7.3) vzájemně zamění. Rotační invariance tedy vyžaduje, aby platilo

$$f_1(\theta) = f_2(\theta + \pi) . \quad (7.7)$$

Můžeme však postoupit ještě dál. Uvažujme o spinovém stavu dopadajícího protonu

$$|\psi(a_1, a_2)\rangle = a_1 |\uparrow\rangle + a_2 |\downarrow\rangle . \quad (7.8)$$

Podobně jako v (7.5) a (7.6) odvodíme pro úhlovou závislost amplitudy rozptylu $f(\theta)$ výraz

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \sum_{\{\rho\}} \left| \langle \psi_{\{\rho\}}(\theta) | \psi(a_1, a_2) \rangle \right|^2 = \sum_{\{\rho\}} \left| a_1 \langle \psi_{\{\rho\}}(\theta) | \uparrow \rangle + a_2 \langle \psi_{\{\rho\}}(\theta) | \downarrow \rangle \right|^2 = \\ &= |a_1|^2 f_1(\theta) + |a_2|^2 f_2(\theta) + a_1^* a_2 f_{12}(\theta) + a_1 a_2^* f_{12}^*(\theta) , \end{aligned} \quad (7.9)$$

kde f_1 a f_2 jsou definovány v (7.5) a (7.6), zatímco smíšené členy jsou dány vztahem

$$f_{12}(\theta) = \sum_{\{\rho\}} \langle \psi_{\{\rho\}}(\theta) | \downarrow \rangle \langle \psi_{\{\rho\}}(\theta) | \uparrow \rangle^* . \quad (7.10)$$

Vztah (7.9) je možno zapsat v maticovém zápisu jako

$$f(\theta) = a^+ F(\theta) a , \quad a = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} , \quad (7.11)$$

kde $F(\theta)$ je pozitivně definitní hermiteovská matice

$$F(\theta) = \begin{pmatrix} f_1(\theta) & f_{12}(\theta) \\ f_{12}^*(\theta) & f_2(\theta) \end{pmatrix} . \quad (7.12)$$

¹⁹ Pravděpodobnost nalezení rozptýleného protonu v úhlovém intervalu $(\theta, \theta + d\theta)$ je rovna $f_1(\theta) d\theta$. Je pro nás nepodstatné, jak konkrétně sčítání přes $\{\rho\}$ provést.

Uvažujme nyní rotaci celého experimentálního uspořádání o úhel ϕ kolem osy x , takže úhel θ přejde na $\theta + \phi$. Při této rotaci se transformují vektory s pomocí matice

$$R(\phi) = \exp(i\phi L_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & \sin\phi \\ 0 & -\sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}, \quad (7.13)$$

zatímco spinorové stavy $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$ se transformují pomocí matice

$$X(\phi) = \exp\left(i\frac{\phi}{2}\tau_1\right) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\phi}{2} & i\sin\frac{\phi}{2} \\ i\sin\frac{\phi}{2} & \cos\frac{\phi}{2} \end{pmatrix}, \quad (7.14)$$

takže totéž platí pro a :

$$a \rightarrow a' = X(\phi)a. \quad (7.15)$$

Po rotaci celého experimentálního uspořádání musí být hodnota amplitudy rozptylu pro úhel $\theta + \phi$, získaná se svazkem protonů charakterizovaným spinorem a' rovna původní hodnotě amplitudy rozptylu, tj. pro úhel θ a svazek charakterizovaný spinorem a . Musí tedy platit

$$X^+(\phi)F(\theta + \phi)X(\phi) = F(\theta). \quad (7.16)$$

Tato rovnice musí platit pro všechny úhly θ . Dosadíme-li do (7.16) hodnotu $\theta = 0$, dostáváme (užijeme unitarity X , tedy $X^+(\phi) = X^{-1}(\phi)$)

$$F(\phi) = X(\phi)F(0)X^{-1}(\phi). \quad (7.17)$$

Provedeme-li teď porovnání jednotlivých prvků matice, dostáváme (píšeme pro úhlovou proměnnou opět θ místo ϕ)

$$f_1(\theta) = f_1 \cos^2\frac{\theta}{2} + f_2 \sin^2\frac{\theta}{2} - i(f_{12} - f_{12}^*) \cos\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta}{2}, \quad (7.18)$$

$$f_2(\theta) = f_2 \cos^2\frac{\theta}{2} + f_1 \sin^2\frac{\theta}{2} + i(f_{12} - f_{12}^*) \cos\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta}{2}, \quad (7.19)$$

$$f_{12}(\theta) = f_{12} \cos^2\frac{\theta}{2} + f_{12}^* \sin^2\frac{\theta}{2} - i(f_1 - f_2) \cos\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta}{2}, \quad (7.20)$$

kde $f_1 \equiv f_1(0)$, $f_2 \equiv f_2(0)$ a $f_{12} \equiv f_{12}(0)$. Tento výsledek můžeme zapsat také jako

$$f_1(\theta) = \frac{1}{2}(f_1 + f_2) + \frac{1}{2}(f_1 - f_2)\cos\theta - \frac{i}{2}(f_{12} - f_{12}^*)\sin\theta, \quad (7.21)$$

$$f_2(\theta) = \frac{1}{2}(f_1 + f_2) - \frac{1}{2}(f_1 - f_2)\cos\theta + \frac{i}{2}(f_{12} - f_{12}^*)\sin\theta \quad , \quad (7.22)$$

$$f_{12}(\theta) = \frac{1}{2}(f_{12} + f_{12}^*) + \frac{1}{2}(f_{12} - f_{12}^*)\cos\theta - \frac{i}{2}(f_1 - f_2)\sin\theta \quad . \quad (7.23)$$

Závislost amplitudy rozptylu na úhlu θ jsme odvodili pouze na základě požadavku rotační invariance. Funkce $f_1(\theta)$ a $f_2(\theta)$ mají na intervalu $-\pi \leq \theta \leq \pi$ právě jedno maximum a jedno minimum a dávají tak vznik přednostnímu směry rozptylu, což dobře souhlasí s výše zmíněnými experimentálními výsledky.

Úhlovou závislost amplitudy rozptylu můžeme ještě dále konkretizovat, užitíme-li ještě další symetrie. V dobrém přiblížení je příroda symetrická vzhledem k prostorovému zrcadlení. Při zrcadlení vzhledem k počátku (označíme tuto operaci jako P) se mění souřadnice na souřadnice s opačným znaménkem

$$\vec{r} \xrightarrow{P} -\vec{r} \quad . \quad (7.24)$$

Dvojnásobné zrcadlení je totéž co identické, takže zde máme co dělat s konečnou grupou, která má dva prvky, zrcadlení a identitu. Přidání zrcadlení rozšíří grupu $SO(3)$ na $O(3)$, jak jsme se již zmínili na počátku části 3.

Generátory grupy rotací se zrcadlením nezmění, což je přímo vidět z (4.30): při zrcadlení se \vec{L} transformuje jako pseudovektor. To plyne také z jednoduše viditelné skutečnosti, že zrcadlení vzhledem k počátku komutuje s rotacemi. Z toho pak plyne, že zrcadlení působí podle Schurova lemmatu na ireducibilních reprezentacích rotační grupy jako identita (viz diskuse následující po (4.42)). Taktéž spinový stav se při zrcadlení nemění, nanejvýš se může objevit znaménko minus.

Podívejme se na vliv zrcadlení při popisu rozptylu protonů na jádře atomu uhlíku, když toto zrcadlení bude popsáno pomocí matice z $O(3)$

$$P_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad . \quad (7.25)$$

Po tomto zrcadlení máme stále totéž experimentální uspořádání, hybnost dopadajícího protonu se nezměnila. Pouze úhel θ teď přešel na $\pi - \theta$. Protože amplitudy rozptylu $f_1(\theta)$ a $f_2(\theta)$ se nezměnily, musí být

$$f_1(\theta) = f_1(\pi - \theta) \quad , \quad f_2(\theta) = f_2(\pi - \theta) \quad . \quad (7.26)$$

To vzhledem k (7.7) vyžaduje $f_1 = f_2$.

Povšimněme si ještě, že P_z z (7.25) můžeme zapsat jako součin zrcadlení vzhledem k počátku P a rotace kolem osy z o úhel π . Zrcadlení nemá vliv na spinový stav, ale rotace odpovídá působení matice

$$\exp\left(i\frac{\pi}{2}\tau_3\right) = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i\tau_3 \quad . \quad (7.27)$$

Z toho plyne (stejně jako v (7.16)) $\tau_3 F(\pi - \theta) \tau_3 = F(\theta)$, což vede na $f_{12}^* = -f_{12}$.

8. Isospin

Jak jsme uvedli v části 1, seskupují se elementární částice přibližně stejných hmotností do tzv. multipletů. Například

$$\begin{aligned} \text{nukleony, dublet:} & \quad (p, n) \\ \text{piony, triplet:} & \quad (\pi^+, \pi^0, \pi^-) \\ \Delta, kvadruplet: & \quad (\Delta^{++}, \Delta^+, \Delta^0, \Delta^-) \end{aligned} \quad (8.1)$$

Toto uspořádání je možné vysvětlit předpokladem, že příroda je v dobrém přiblížení invariantní vzhledem k tzv. isospinovým rotacím. Isospinové rotace tvoří grupu, přičemž její prvky jsou rotace „vnitřního“ trojrozměrného prostoru. Stavy popisující isospinové multiplety se transformují podle (ireducibilních) reprezentací této grupy. Pojem isospin je proto analogický pojmu spinu, který byl spojen s rotacemi „vnějšího“ prostoru.

Sílové působení, které váže nukleony do jádra atomu, tzv. silná jaderná interakce, je invariantní vzhledem k isospinovým rotacím. To však neplatí pro elektromagnetickou interakci. Proto není elektrický náboj multipletu stejný. Zákon zachování elektrického náboje je však vždy platný. To je vyjádřeno zachováním příslušné složky isospinového „momentu hybnosti“ vzhledem k tomu, že elektrický náboj je určen Gell-Mannovým – Nishinovým vztahem

$$Q = I_3 + \frac{1}{2}Y \quad , \quad (8.2)$$

kde Y je „hypernáboj“, který má pro všechny stavy multipletu stejnou hodnotu. Máme $Y=1$ pro nukleony, $Y=0$ pro piony a opět $Y=1$ pro Δ -částice.

Podívejme se teď na rozpad Δ^{++} částice

$$\Delta^{++} \rightarrow p\pi^+ . \quad (8.3)$$

Pro částice účastníci se tohoto rozpadu platí

$$I_3|\Delta^{++}\rangle = \frac{3}{2}|\Delta^{++}\rangle , \quad I_3|p\rangle = \frac{1}{2}|p\rangle , \quad I_3|\pi^+\rangle = |\pi^+\rangle , \quad (8.4)$$

takže

$$I_3(|p\rangle|\pi^+\rangle) = (I_3|p\rangle)|\pi^+\rangle + |p\rangle(I_3|\pi^+\rangle) = \frac{3}{2}|p\rangle|\pi^+\rangle . \quad (8.5)$$

Vztah (8.5) plyne z toho, že generátory I_i reprezentace vzniklé součinem stavů jsou součtem generátorů, působících na jednotlivé stavy.* Totéž platí přirozeně i pro I_+ a I_- .

Δ -částice se rozpadají na jeden nukleon a jeden pion. Zákon zachování náboje říká, že rozpad Δ^{++} podle (8.3) je jediný možný. U jiných Δ -částic je situace méně jednoduchá. Začneme soupisem stavů nukleonu a pionu, které jsou vlastními stavy operátoru I_3 :

$$\begin{aligned} I_3(|p\rangle|\pi^+\rangle) &= \frac{3}{2}|p\rangle|\pi^+\rangle , & I_3(|n\rangle|\pi^+\rangle) &= \frac{1}{2}|n\rangle|\pi^+\rangle , \\ I_3(|p\rangle|\pi^0\rangle) &= \frac{1}{2}|p\rangle|\pi^0\rangle , & I_3(|n\rangle|\pi^0\rangle) &= -\frac{1}{2}|n\rangle|\pi^0\rangle , \\ I_3(|p\rangle|\pi^-\rangle) &= -\frac{1}{2}|p\rangle|\pi^-\rangle , & I_3(|n\rangle|\pi^-\rangle) &= -\frac{3}{2}|n\rangle|\pi^-\rangle . \end{aligned} \quad (8.6)$$

Δ -částice se však mohou rozpadat pouze do určitých lineárních kombinací těchto stavů. Souvisí to se skutečností, že součinnové stavy (8.6) patří do dvou různých reprezentací isospinové grupy. To je hned vidět z vlastních hodnot I_3 : vlastní hodnoty $\pm 3/2$ se objevují pouze jedenkrát, zatímco vlastní hodnoty $\pm 1/2$ dvakrát. Příslušné stavy patří reprezentaci s isospinem $3/2$ a reprezentaci s isospinem $1/2$. Můžeme (v analogii s (4.13)) zapsat rozklad součinnové reprezentace na

$$\mathbf{2} \otimes \mathbf{3} = \mathbf{2} \oplus \mathbf{4} , \quad (8.7)$$

kde $\mathbf{2}, \mathbf{3}$ a $\mathbf{4}$ jsou dvou-, tří- a čtyřdimenzionální reprezentace isospinu $1/2, 1$ a $3/2$.

* Viz poznámku ¹² o působení přímého součtu generátorů.

Protože reakce rozpadu jsou invariantní vzhledem k isospinovým rotacím, můžeme popsat rozpad dalších Δ -částic pomocí známého rozpadu částice Δ^{++} . Operátor I_- převede stav $|\Delta^{++}\rangle$ na

$$I_-|\Delta^{++}\rangle \equiv I_- \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \sqrt{3} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \equiv \sqrt{3} |\Delta^+\rangle \quad , \quad (8.8)$$

kde jsme využili (5.32). Působení operátoru na stav, popisující nukleon a pion po rozpadu Δ^{++} zapíšeme jako

$$I_- (|p\rangle|\pi^+\rangle) = (I_-|p\rangle)|\pi^+\rangle + |p\rangle(I_-|\pi^+\rangle) = |n\rangle|\pi^+\rangle + \sqrt{2}|p\rangle|\pi^0\rangle \quad . \quad (8.9)$$

Z isospinové invariance vyplývá, že se Δ^+ , který zí skámé isospinovou rotací z Δ^{++} , rozpadá na stav, který získáme isospinovou rotací $|p\rangle|\pi^+\rangle$; porovnáním (8.8) a (8.9) vidíme, že je to stav

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|n\rangle|\pi^+\rangle + \sqrt{2}|p\rangle|\pi^0\rangle) \quad . \quad (8.10)$$

Odtud vychází pro poměr pravděpodobností nalezení rozpadových stavů

$$\frac{\Gamma(\Delta^+ \rightarrow n\pi^+)}{\Gamma(\Delta^+ \rightarrow p\pi^0)} = \frac{1}{2} \quad , \quad (8.11)$$

plně v souladu s experimentální skutečností.

Pro popis rozpadu Δ^0 použijeme ještě jednou stejného postupu s působením operátoru I_- :

$$\begin{aligned} I_-|\Delta^+\rangle &\equiv I_- \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 2 \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv 2|\Delta^0\rangle \quad , \\ I_- (|n\rangle|\pi^+\rangle) &= \sqrt{2}|n\rangle|\pi^0\rangle \quad , \quad I_- (|p\rangle|\pi^0\rangle) = |n\rangle|\pi^0\rangle + \sqrt{2}|p\rangle|\pi^-\rangle \quad , \\ I_- \left(\frac{1}{\sqrt{3}} (|n\rangle|\pi^+\rangle + \sqrt{2}|p\rangle|\pi^0\rangle) \right) &= 2 \left(\frac{1}{\sqrt{3}} (\sqrt{2}|n\rangle|\pi^0\rangle + |p\rangle|\pi^-\rangle) \right) \quad . \end{aligned} \quad (8.12)$$

Opět jsme využili vztah (5.32). Porovnání prvního a posledního řádku v (8.12) dává pro výsledný stav vyjádření

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (\sqrt{2}|n\rangle|\pi^0\rangle + |p\rangle|\pi^-\rangle) \quad . \quad (8.13)$$

Odtud vychází pro poměr pravděpodobností nalezení rozpadových stavů

$$\frac{\Gamma(\Delta^0 \rightarrow n\pi^0)}{\Gamma(\Delta^0 \rightarrow p\pi^-)} = \frac{2}{1} \quad . \quad (8.14)$$

Na těchto příkladech jsme krásně viděli, jak je poměr pravděpodobností 2:1 dvou možností rozpadu dán invariancí vzhledem k transformacím z Lieovy grupy.

9. Vodíkový atom

V této části ukážeme grupově – teoretické odvození energiového spektra atomu vodíku. Hamiltonián vodíkového atomu má tvar

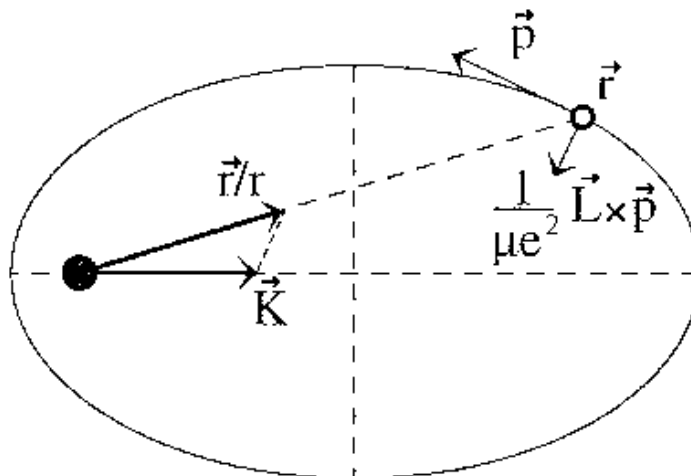
$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} \quad , \quad (9.1)$$

kde první člen představuje kinetickou energii (μ je redukovaná hmotnost soustavy proton – elektron) a druhý člen je coulombovský potenciál. Klasické (Hamiltonovy) pohybové rovnice, které plynou z (9.1) jsou

$$\dot{\vec{p}} = -e^2 \frac{\vec{r}}{r^3} \quad (9.2)$$

a

$$\dot{\vec{r}} = \frac{1}{\mu} \vec{p} \quad . \quad (9.3)$$



Obrázek 4 Konstrukce Rungeho - Lenzova vektoru \vec{K}

Pro vodíkový atom známe celou řadu integrálů pohybu, tj. veličin zachovávajících se v čase. Nejznámější jsou energie daná výrazem (9.1) a vektor momentu hybnosti

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad . \quad (9.4)$$

Skutečně plyne z (9.2) a (9.3), že

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\vec{p} \cdot \dot{\vec{p}}}{\mu} + e^2 \frac{\vec{r} \cdot \dot{\vec{r}}}{r^3} = 0 \quad , \quad (9.5)$$

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \dot{\vec{r}} \times \vec{p} + \vec{r} \times \dot{\vec{p}} = 0 \quad . \quad (9.6)$$

Poslední vztah platí, protože podle (9.3) jsou $\dot{\vec{r}}$ a \vec{p} a podle (9.2) \vec{r} a $\dot{\vec{p}}$ rovnoběžné. Ještě však existuje jeden zachovávající se vektor. Je to tzv. Rungeho – Lenzův vektor, definovaný jako

$$\vec{K} = \frac{1}{\mu e^2} \vec{L} \times \vec{p} + \frac{\vec{r}}{r} \quad . \quad (9.7)$$

Zachování \vec{K} přirozeně opět plyne z pohybových rovnic (9.2) a (9.3), jenom výpočet je poněkud delší. Nejprve ukážeme, že

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{K}}{dt} &= \frac{1}{\mu e^2} \vec{L} \times \dot{\vec{p}} + \frac{\dot{\vec{r}}}{r} - (\dot{\vec{r}} \cdot \vec{r}) \frac{\vec{r}}{r^3} = \\ &= \frac{1}{\mu} \frac{\vec{L} \times \dot{\vec{r}}}{r^3} + \frac{1}{\mu} \frac{r^2 \dot{\vec{p}} - (\vec{p} \cdot \dot{\vec{r}}) \vec{r}}{r^3} \quad , \end{aligned} \quad (9.8)$$

kde v prvním řádku jsme využili (9.6) a v druhém řádku dosadili z (9.2) a (9.3). V dalším kroku dosadíme do (9.8) definici \vec{L} z (9.4), takže

$$\frac{d\vec{K}}{dt} = \frac{1}{\mu r^3} \{ -(\vec{r} \times \vec{p}) \times \vec{r} + r^2 \dot{\vec{p}} - (\vec{p} \cdot \dot{\vec{r}}) \vec{r} \} \quad . \quad (9.9)$$

S pomocí vztahu

$$(\vec{a} \times \vec{b}) \times \vec{c} = (\vec{c} \cdot \vec{a}) \vec{b} - (\vec{c} \cdot \vec{b}) \vec{a} \quad (9.10)$$

je snadné vidět, že pravá strana (9.9) je rovna nule a vektor \vec{K} se zachovává.

Rungeho – Lenzův vektor má ještě další zajímavé vlastnosti, které vyplývají bezprostředně z jeho definice a z elementárních vztahů vektorové analýzy, zejména platí

$$\vec{K} \cdot \vec{L} = 0 \quad (9.11)$$

a

$$\begin{aligned}\vec{K}^2 &= \left(\frac{1}{\mu e^2}\right)^2 (\vec{L} \times \vec{p})^2 + \frac{2}{\mu e^2 r} (\vec{L} \times \vec{p}) \cdot \vec{r} + 1 = \\ &\left(\frac{1}{\mu e^2}\right)^2 \vec{L}^2 \vec{p}^2 - \frac{2}{\mu e^2 r} \vec{L}^2 + 1 = \frac{2H}{\mu e^4} \vec{L}^2 + 1 \quad .\end{aligned}\tag{9.12}$$

Pro eliptickou trajektorii klasické částice má Rungeho – Lenzův vektor \vec{K} směr velké poloosy elipsy, jak je zobrazeno na Obrázku 4. Délka \vec{K} je rovna výstřednosti ε elipsy.

V kvantové mechanice jsou \vec{r} a \vec{p} operátory, které splňují Heisenbergovy komutační relace

$$[p_i, r_j] = -i \hbar \delta_{ij} \quad , \quad [r_i, r_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad .\tag{9.13}$$

V souřadnicové reprezentaci popisujeme stavy pomocí vlnových funkcí souřadnic r_i . Operátor souřadnice působí na vlnovou funkci triviálně, násobí ji příslušnou souřadnicí, zatímco operátor hybnosti působí jako

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \quad .\tag{9.14}$$

Přirozeně také H , \vec{L} a \vec{K} jsou i operátory, i když se v definici \vec{K} objevuje problém daný tím, že \vec{p} a \vec{L} nekomutují:

$$[L_i, p_j] = i \hbar \varepsilon_{ijk} p_k \quad .\tag{9.15}$$

Tento výsledek plyne bezprostředně z (9.4) a (9.13), využijeme-li distribučního vztahu pro komutátor

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad .\tag{9.16}$$

Vzhledem k (9.15) záleží tedy na pořadí, v jakém píšeme operátory \vec{L} a \vec{p} v definici (9.7) vektoru \vec{K} .²⁰ Pro kvantově mechanickou definici \vec{K} zvolíme

$$\vec{K} = \frac{1}{2\mu e^2} (\vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L}) + \frac{\vec{r}}{r} \quad .\tag{9.17}$$

Je přirozené, že pokud by \vec{L} a \vec{p} komutovaly, přejde tato definice na klasickou (9.7). Kromě jiného je operátor \vec{K} ve tvaru (9.17) hermiteovský.

²⁰ Můžeme se snadno přesvědčit, že tento problém nenastává u H ani \vec{L} , definovaných pomocí vztahů (9.1) a (9.4).

V kvantové mechanice platí, že zachovávající se veličiny komutují s hamiltoniánem. Ukážeme to nejprve pro operátory \vec{L} . Již jsme uvedli komutační relace pro \vec{L} a \vec{p} . Podobně pro \vec{L} a \vec{r} máme

$$[L_i, r_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} r_k \quad . \quad (9.18)$$

S pomocí (9.16) můžeme jednoduše odvodit

$$[L_i, H] = 0 \quad (9.19)$$

a

$$[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \quad . \quad (9.20)$$

Rovnice (9.19) udává, že L_i se zachovává. Rovnice (9.20) pak říká, že složky operátoru momentu hybnosti mají tytéž komutační relace jako generátory grupy rotací v třírozměrném prostoru.

Podobným způsobem spočteme komutátory, ve kterých vystupuje operátor \vec{K} . Nejprve poznamenejme, že vzhledem k (9.14) bude

$$\left[\vec{p}, \frac{1}{r} \right] = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{1}{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right) = i\hbar \frac{\vec{r}}{r^3} \quad . \quad (9.21)$$

Pak lze odvodit komutační relace

$$[L_i, K_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} K_k \quad (9.22)$$

(to plyne už ze skutečnosti, že K_i jsou složky vektoru),

$$[K_i, p_j] = \frac{i\hbar}{\mu e^2} (p_i p_j - p^2 \delta_{ij}) + \frac{i\hbar}{r^3} (r^2 \delta_{ij} - r_i r_j) \quad , \quad (9.23)$$

$$\left[K_i, \frac{1}{r} \right] = \frac{i\hbar}{2\mu e^2 r^3} \varepsilon_{ijk} (L_j r_k + r_k L_j) \quad . \quad (9.24)$$

S pomocí těchto vztahů dojdeme pak k závěru, že \vec{K} komutuje s hamiltoniánem

$$[K_i, H] = 0 \quad . \quad (9.25)$$

Nakonec můžeme s pomocí Jacobiho identity

$$[[A, B], C] + [[B, C], A] + [[C, A], B] = 0 \quad (9.26)$$

ukázat, že také $[K_i, K_j]$ komutuje s hamiltoniánem a je tedy zachovávající se veličinou. Přímý výpočet nám však ukáže, že nejde o novou veličinu, ale o součin dvou známých zachovávajících se veličin²¹

$$[K_i, K_j] = i \hbar \varepsilon_{ijk} L_k \frac{-2H}{\mu e^4} . \quad (9.27)$$

Protože L_k a H komutují, není důležité, v jakém pořadí jsou operátory zapsány.

Spočetli jsme všechny potřebné komutátory. Teď se můžeme podívat, zda zůstávají i v kvantovém případě v platnosti vztahy (9.11) a (9.12). Pokud jde o první rovnici, máme

$$\vec{K} \cdot \vec{L} = \vec{L} \cdot \vec{K} = \frac{1}{2 \mu e^2} \left\{ \vec{L} \cdot (\vec{L} \times \vec{p}) - \vec{L} \cdot (\vec{p} \times \vec{L}) \right\} + \frac{\vec{L} \cdot \vec{r}}{r} . \quad (9.28)$$

Vzhledem k $\vec{L} \cdot \vec{r} = 0$ (což se snadno ukáže i v kvantovém případě), zůstávají ve hře pouze první dva členy. Závorku píšeme jako

$$\varepsilon_{ijk} L_i (L_j p_k - p_j L_k) = \varepsilon_{ijk} (2 L_i L_j p_k - i \hbar \varepsilon_{jkl} L_i p_l) , \quad (9.29)$$

kde jsme pomocí (9.15) zapsali p_i napravo od L_i . S pomocí (9.20) můžeme první člen psát jako $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijl} L_i p_k \propto \vec{L} \cdot \vec{p} = 0$, z podobného důvodu vymizí i druhý člen, takže nakonec máme

$$\vec{K} \cdot \vec{L} = 0 . \quad (9.30)$$

Vztah (9.12) už pro operátory neplatí, objeví se v něm člen navíc. Uvedeme jen výsledek, který potřebuje zdouhavější výpočet. Kvantová analogie diskutovaného vztahu má tvar

$$\vec{K}^2 = \frac{2H}{\mu e^4} (\vec{L}^2 + \hbar^2) + 1 . \quad (9.31)$$

V limitě $\hbar \rightarrow 0$ přejde přirozeně (9.31) na (9.12).

S pomocí získaných výsledků můžeme nyní najít energiové spektrum atomu vodíku. Hledáme vlnové funkce, které vyhovují rovnici

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle , \quad (9.32)$$

přičemž předpokládáme, že energie E je záporná $E < 0$, abychom pojednávali o vázaných stavech. Protože operátory L_i a K_i komutují s hamiltoniánem, jsou také stavy $L_i |\psi\rangle$ a $K_i |\psi\rangle$

²¹ Obecně je možno dokázat, že pro vodíkový atom máme pouze pět nezávislých integrálů pohybu. Mohly by to být například tři složky vektoru momentu hybnosti a dvě složky Roungeho – Lenzova vektoru, který je na \vec{L} kolmý.

řešeními Schrödingerovy rovnice (9.32). Pokud jde o operátory H , \vec{L} a \vec{K} , můžeme se proto omezit na podprostor stavů $|\psi\rangle$ se stejnou energií E .

Vytvořme nyní následující dvě lineární kombinace operátorů \vec{L} a \vec{K} :²²

$$\vec{L}^{\pm} = \frac{1}{2} \left(\vec{L} \pm \sqrt{\frac{\mu e^4}{-2E}} \vec{K} \right) . \quad (9.33)$$

Tyto operátory komutují s hamiltoniánem:

$$[L_i^{\pm}, H] = 0 . \quad (9.34)$$

S pomocí (9.20), (9.22) a (9.27) lze dokázat následující komutační relace

$$[L_i^+, L_j^+] = i \hbar \varepsilon_{ijk} L_k^+ , \quad (9.35)$$

$$[L_i^-, L_j^-] = i \hbar \varepsilon_{ijk} L_k^- \quad (9.36)$$

a

$$[L_i^+, L_j^-] = 0 . \quad (9.37)$$

Vzhledem k těmto komutačním relacím je možno považovat \vec{L}^+ a \vec{L}^- za generátory dvou oddělených grup rotací, které vzájemně komutují a působí na stavy jako

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \exp(i \vec{\alpha} \cdot \vec{L}^+) \exp(i \vec{\beta} \cdot \vec{L}^-) |\psi\rangle , \quad (9.38)$$

kde parametry $\vec{\alpha}$ a $\vec{\beta}$ popisují zmíněné dvě grupy generované \vec{L}^+ a \vec{L}^- .²³

Protože $|\psi\rangle$ splňuje Schrödingerovu rovnici (9.32), splňují ji také transformované stavy $|\psi'\rangle$ téže energie E . Všechny tyto stavy mohou být charakterizovány jako reprezentace dvou rotačních grup (tuto součinnou grupu označujeme jako $SU(2) \otimes SU(2)$). Stavy se tak mohou transformovat pomocí $2s_+ + 1$ -rozměrné (ireducibilní) reprezentace první grupy. Když působilme jedním prvkem druhé grupy na tuto reprezentaci, pak najdme identickou reprezentaci první grupy, která může být eventuelně stejná jako původní reprezentace (tím myslíme, že sobě odpovídající stavy se liší pouze určitým faktorem). Toto poslední tvrzení plyne ze Schurova

²² Skutečnost, že předpokládáme záporné E zajišťuje kladnou hodnotu pod odmocninou.

²³ Ještě jednou upozorňujeme, že grupy komutují. Proto nezáleží na pořadí, v jakém píšeme exponenciály ve vztahu (9.38).

lemmatu. Při působení druhé grupy zůstává reprezentace první grupy zcela zachována. Totéž platí přirozeně i naopak: při působení první grupy zůstává zachována reprezentace druhé grupy. Máme tedy co dělat s tensorovým součinem reprezentace první grupy s reprezentací druhé grupy. Zvolíme-li $2s_+ + 1$ -rozměrnou reprezentaci první grupy a $2s_- + 1$ -rozměrnou reprezentaci druhé grupy, dostaneme takto $(2s_+ + 1)(2s_- + 1)$ stavů, které budeme značit $|s_+, s_- \rangle$ a které splňují rovnice pro vlastní hodnoty

$$\begin{aligned} (\vec{L}^+)^2 |s_+, s_- \rangle &= s_+ (s_+ + 1) \hbar^2 |s_+, s_- \rangle \quad , \\ (\vec{L}^-)^2 |s_+, s_- \rangle &= s_- (s_- + 1) \hbar^2 |s_+, s_- \rangle \quad , \end{aligned} \quad (9.39)$$

kde $s_{\pm} = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Generátory \vec{L}^{\pm} musí však splňovat ještě podmínku, která plyne z (9.30):

$$(\vec{L}^+ + \vec{L}^-) \cdot (\vec{L}^+ - \vec{L}^-) \propto \vec{L} \cdot \vec{K} = 0 \quad , \quad (9.40)$$

odkud

$$(\vec{L}^+)^2 = (\vec{L}^-)^2 \quad . \quad (9.41)$$

Z rovnice (9.41) plyne rovnost vlastních hodnot v (9.39), takže můžeme psát

$$s_+ = s_- = \frac{1}{2}(n-1) \quad , \quad (9.42)$$

kde $n = 1, 2, \dots$. Máme tak n^2 stavů $|s_+, s_- \rangle$.

Nakonec vyjádříme hamiltonián, a tedy energii E , prostřednictvím operátorů \vec{L}^{\pm} .

Podle (9.31) a definice \vec{L}^{\pm} můžeme psát

$$-(\vec{L}^+ - \vec{L}^-)^2 = \frac{\mu e^4}{2E} \vec{K}^2 = (\vec{L}^+ + \vec{L}^-)^2 + \hbar^2 + \frac{\mu e^4}{2E} \quad , \quad (9.43)$$

odkud

$$-2 \left\{ (\vec{L}^+)^2 + (\vec{L}^-)^2 \right\} = -2(n-1) \left(\frac{1}{2}(n-1) + 1 \right) \hbar^2 = \hbar^2 + \frac{\mu e^4}{2E} \quad . \quad (9.44)$$

Vázané stavy s energiemi E_n jsou tedy n^2 -krát degenerované a energie je dána vztahem

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad . \quad (9.45)$$

Operátor momentu hybnosti je dán součtem operátorů $\vec{L}^+ + \vec{L}^-$. Tato lineární kombinace působí stejným způsobem na obě reprezentace, jejichž tensorovým součinem vznikly stavy $|s_+, s_-\rangle$. Při prostorových rotacích generovaných operátorem $\vec{L}^+ + \vec{L}^-$ se tedy transformují stavy $|s_+, s_-\rangle$ jako tensorový součin dvou reprezentací grupy rotací v trojrozměrném prostoru. Tato součinná reprezentace už není ireducibilní, ačkoliv každá reprezentace ze součinu ireducibilní je. Z vlastností součinné reprezentace můžeme určit, jakých hodnot může při daném n nabývat moment impulzu; plyne to z rozkladu součinu dvou ireducibilních n -rozměrných reprezentací grupy rotací na ireducibilní reprezentace

$$\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} = \mathbf{2n-1} \oplus \mathbf{2n-3} \oplus \dots \oplus \mathbf{3} \oplus \mathbf{1} \quad , \quad (9.46)$$

kde \mathbf{n} je n -rozměrná ireducibilní reprezentace grupy rotací (definuje tak stav se spinem $1/2(n-1)$). Rozklad (9.46) nebudeme dokazovat, příklad jsme viděli ve (4.13).

Souhrnem můžeme říci, že vázané stavy atomu vodíku jsou určeny hlavním kvantovým číslem n , které nabývá hodnot $n=1, 2, \dots$. Pro dané n existuje n^2 stavů s momentem hybnosti $l=0, 1, \dots, n-1$ a energií danou (9.45).

Některé původní práce: O. Klein: Z. für Physik **22** (1924), 109; W. Lenz: Z. für Physik **24** (1924), 197; W. Pauli: Z. für Physik **36** (1926), 336.

10. Grupa $SU(3)$

Lieova grupa $SU(3)$ hrála významnou roli při budování kvarkové teorie. Při studiu hadronů (částice se silnou jadernou interakcí) se ukázalo, že je možné je sdružovat do multipletů, podobně jako jsme to viděli u isospinových multipletů. Různé isospinové multiplety se ovšem sdružují do širších skupin.

Z toho se dalo usoudit, že zde máme co dělat s invariancí vůči působení některé další z mnoha Lieových grup. Ukazuje se, že to může být grupa $SU(3)$. Podívejme se, proč právě tato grupa. Hluboko uvnitř subatomových částic jsou uloženy základní kameny, zvané kvarky. Jsou tři druhy kvarků, označované u , d a s . Z nich u a d tvoří isospinový dublet. Jsou tedy reprezentací $I=1/2$ grupy $SU(2)$. Třetí kvark s je isotopický singlet. Vlnovou funkci kvarků píšeme jako

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} u \\ d \\ s \end{pmatrix}, \quad (10.1)$$

a (při jistém přiblížení) můžeme odvodit, že fyzikální vlastnosti částic jsou invariantní vzhledem k unitárním transformacím těchto 3-vektorů. Proto chápeme (10.1) také jako fundamentální reprezentaci grupy $SU(3)$, kde 3 značí dimenzi vektorů, U „unitární“ a S „speciální“: uvažujeme matice s determinanem rovným 1.

Tabulka 2 Různé isospinové multiplety a jejich hmotnosti.

isospinový multiplet	spin	parita	isospin	S	hmotnost (MeV)
piony: π^\pm, π^0	0	-	1	0	139.6, 135
kaony: K^0, K^+	0	-	1/2	1	497.7, 493.7
antikaony: K^-, \bar{K}^0	0	-	1/2	-1	493.7, 497.7
eta: η^0	0	-	0	0	547.3
eta': η'	0	-	0	0	≈ 900
nukleony: n, p	1/2	+	1/2	0	939.5, 938.3
delta: $\Delta^-, \Delta^0, \Delta^+, \Delta^{++}$	3/2	+	3/2	0	≈ 1235
sigma: $\Sigma^-, \Sigma^0, \Sigma^+$	1/2	+	1	-1	1197.4, 1192.6, 1189.4
sigma*: $\Sigma^{*-}, \Sigma^{*0}, \Sigma^{*+}$	3/2	+	1	-1	≈ 1385
lambda: Λ^0	1/2	+	0	-1	1115.7
ksi: Ξ^-, Ξ^0	1/2	+	1/2	-2	1321.3, 1315
ksi*: Ξ^{*-}, Ξ^{*0}	1/2	+	1/2	-2	≈ 1530
omega: Ω^-	3/2	+	0	-3	1672.4

Vezmeme-li pouze ty transformace, které působí na u a d , zatímco s zůstává invariantní, získáme podgrupu $SU(2)$ grupy $SU(3)$. U grupy $SU(2)$ jsme viděli, že pokud začneme konstruovat další reprezentace s pomocí reprezentací s celočíselným l , dostaneme opět jen reprezentace charakterizované celočíselnou hodnotou. Jsou to všechno reprezentace, které zobrazují prvek

$$-I = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (10.2)$$

na jednotkovou matici $+I$.

Podobně je tomu u grupy $SU(3)$. Tato grupa obsahuje tři význačné prvky, které komutují se všemi ostatními prvky grupy (tuto podgrupu nazýváme centrum grupy)

$$I, \exp\left(\frac{2\pi i}{3}\right)I, \exp\left(-\frac{2\pi i}{3}\right)I. \quad (10.3)$$

Budeme rozlišovat dva druhy reprezentací $SU(3)$: regulární a exotické reprezentace. Regulární reprezentace jsou takové, které všechny tři prvky (10.3) centra grupy zobrazují na jednotku. Exotické reprezentace tuto vlastnost nemají. Fundamentální reprezentace sama je exotická. Reprezentace vytvořená na prostoru unitárních matic 3×3 (adjungovaná reprezentace) je regulární, neboť z její definice

$$U \rightarrow U' \equiv \text{ad}(X)U = XU X^{-1} \quad (10.4)$$

je vidět, že pro všechny tři matice X z (10.3) je $U' = U$.

Zapíšeme-li matici U jako $U = \exp(iT)$, pak z unitarity U plyne, že T je hermiteovská matice, tj. $T = T^+$ a podmínka $\det U = 1$ vede k požadavku $\text{Tr} T = 0$. Obecné matice 3×3 mají 9 komplexních prvků, které jsou určeny 18 reálnými parametry. Hermiteovská matice T má už jen 9 reálných parametrů, po splnění požadavku na nulovou stopu zbývá jen 8 nezávislých. Adjungovaná reprezentace vytváří tedy osmírozměrný reálný prostor. Podobně jako v části 6 (viz (6.41)) zapíšeme tuto reprezentaci jako $Y^{\alpha\beta}$, nyní však mohou indexy α, β nabývat hodnot 1, 2 a 3. Když oba indexy α, β jsou 1 nebo 2, máme třírozměrnou $I=1$ reprezentaci **3** grupy $SU(2)$. Pro $\alpha=1,2$ a $\beta=3$ máme komplexní, fundamentální **2** reprezentaci grupy $SU(2)$, kterou získáme také při $\alpha=3$ a $\beta=1,2$; dále máme ještě reprezentaci **1**. Protože **2** reprezentace je komplexní, píšeme ji dvakrát:

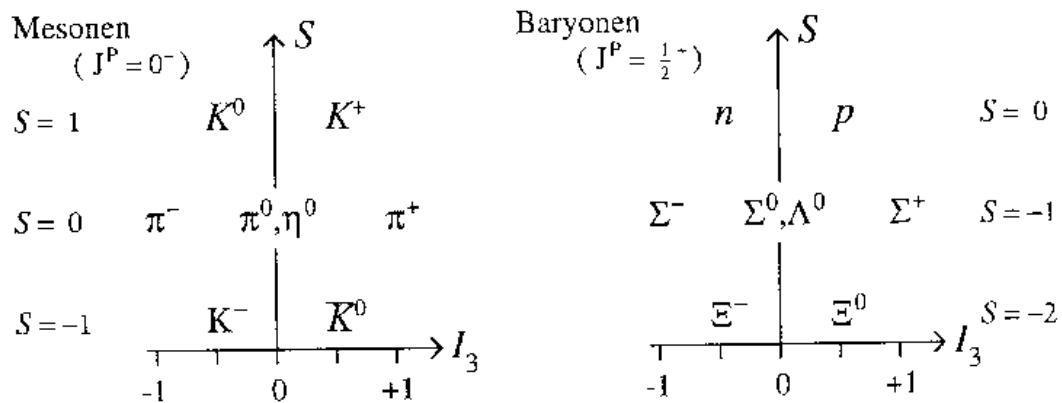
$$\mathbf{8}_{SU(3)} = (\mathbf{3} + \mathbf{2} + \mathbf{2} + \mathbf{1})_{SU(2)}. \quad (10.5)$$

Další reprezentace $SU(3)$ najdeme pomocí násobení vytváření symetrických a antisymetrických kombinací při násobení fundamentální reprezentace. Získáme tak „tensory“ $Y_{\beta_1\beta_2\dots}^{\alpha_1\alpha_2\dots}$, které upravujeme na ireducibilní kombinace, jednak symetrizací a antisymetrizací, jednak násobením invariantními tensory. Pokud užijeme všech fundamentálních indexů (viz později), máme k dispozici tři tensory: δ_{β}^{α} , $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ a $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}$. Poslední dva jsou invariantní, podobně jako byly $\varepsilon_{\alpha\beta}$ a $\varepsilon^{\alpha\beta}$ v $SU(2)$, protože i pro transformace X z $SU(3)$ platí, že $\det X = 1$. Tyto ε -tensory můžeme použít k tomu, aby u každé reprezentace byly všechny indexy nahoře (nebo dole), podle toho, jak budeme potřebovat.

Reprezentace generované ϕ^α a ϕ_α nejsou ekvivalentní, na rozdíl od $SU(2)$. Označíme tyto fundamentální reprezentace jako $\mathbf{3}$ a $\bar{\mathbf{3}}$. Reprezentaci $\bar{\mathbf{3}}$ můžeme také psát jako antisymetrický „tensor“ $Y^{\alpha\beta}$. Symetrická reprezentace $Y^{\alpha\beta}$ je $\mathbf{6}$ komplexní reprezentace. První neexotická reprezentace po $\mathbf{8}$ je reprezentace $\mathbf{10}$, vytvořená z úplně symetrických tensorů $Y^{\alpha\beta\gamma}$. Tento dekaplet je tvořen z reprezentací $SU(2)$ jako

$$\mathbf{10}_{SU(3)} = (\mathbf{4} + \mathbf{3} + \mathbf{2} + \mathbf{1})_{SU(2)} \quad (10.6)$$

Všechny neexotické reprezentace pohodlně poznáme podle toho, že počet horních indexů minus počet dolních indexů je násobkem 3.

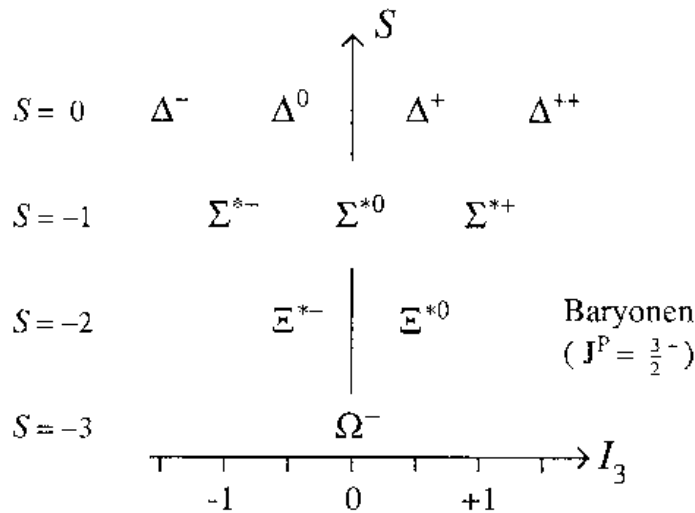


Obrázek 5 Mesonový oktet (spin 0, parita -) a baryonový oktet (spin 1/2 a parita +).

V hadronové fyzice je zvykem charakterizovat částice kromě složky isospinu I_3 dalším kvantovým číslem, podivností (strangeness) S . Obrázce vzniklé vynesemím multiplétů do roviny s kartézskými souřadnicemi $I_3 - S$ jsou na Obrázku 5 a Obrázku 6.

Na obrázcích máme dva oktety a jeden dekaplet. Zapišeme-li si mesonový oktet jako M_β^α , je podivnost S rovna počtu spodních indexů rovných 3 minus počet horních indexů rovných 3. Vidíme, že máme co do činění s vlnovými funkcemi typu $|\psi^\alpha\rangle|\psi_\beta\rangle$, kde $|\psi^\alpha\rangle$ odpovídá kvarkům typu α a $|\psi_\beta\rangle$ antikvarkům typu β . Hodnoty indexů $\alpha=1$ a $\alpha=2$ patří isodubletu u a d , hodnota $\alpha=3$ s -kvarku, který má podivnost $S=-1$. Existuje i devátý meson $M_\beta^\alpha = \delta_\beta^\alpha$. Je to tzv. η' meson, jehož hmotnost je dosti vyšší oproti střední hmotnosti mesonů v oktupletu. Jako

pozoruhodné se zdá, že reprezentace $SU(3)$ realizované v přírodě hadrony jsou vždy regulární, exotické reprezentace se nevyskytují.



Obrázek 6 Baryonový dekaplet (spin 3/2 a parita +).

Všechny baryony lze popsat pomocí $B^{\alpha\beta\gamma}$. Oktet je dán jako

$$B^{\alpha\beta\gamma} = \varepsilon^{\alpha\beta\kappa} B_{\kappa}^{\gamma} \quad , \quad B_{\alpha}^{\alpha} = 0 \quad (10.7)$$

nebo také

$$B^{\alpha\beta\gamma} = -B^{\beta\alpha\gamma} \quad , \quad \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} B^{\alpha\beta\gamma} = 0 \quad . \quad (10.8)$$

$SU(3)$ symetrie je v přírodě narušena více než isospinivá, proto se střední hmotnosti různých isospinových multipletů v rámci multipletu $SU(3)$ od sebe liší víc než hmotnosti částic uvnitř isospinových multipletů (Tabulka 2). Nicméně je tato symetrie velmi významná. M. Gell-Mann například zjistil, že dekaplet není úplný a předpověděl existenci později objevené Ω^- částice.

Baryonový dekaplet a baryonový oktet můžeme vzájemně propojit. Uvažujme opět jako bázi „kvarkové stavy“, ale vezměme v úvahu i spin. Každý kvark může mít $S_z=1$ nebo $S_z=-1$. Chceme-li teď najít transformační vztahy pro šest kvarkových stavů, musíme uvažovat o působení grupy $SU(6)$. Symetrická reprezentace $|\psi^{ABC}\rangle$ grupy $SU(6)$ má 56 prvků. Indexy pro $SU(6)$ jsou tvořeny dvojicí: index a pro $SU(3)$ a index σ pro $SU(2)$:

$$A = (\alpha, \sigma_1) \quad , \quad B = (\beta, \sigma_2) \quad , \quad C = (\gamma, \sigma_3) \quad . \quad (10.9)$$

Předpokládejme, že všechny prvky jsou již symetrické v indexech α , β a γ , potom musíme provést symetrizaci i ve spinových indexech σ_1 , σ_2 a σ_3 . To znamená spin 3/2, přesně jako u dekapletu. Každá částice dekapletu má pak čtyři spinové stavy, tj. celkem $10 \cdot 4 = 40$ stavů. Zbývá $56 - 40 = 16$, přesně pro oktet, kde se spinem $\frac{1}{2}$ má každá částice dva spinové stavy.

Symetrie vzhledem k $SU(6)$ je ještě méně přesně zachovávána než vzhledem k $SU(3)$, hmotnosti části dekapletu jsou vyšší než hmotnosti částit v oktetu.

Ještě jednu otázku musíme zodpovědět. Jak je možné, že kvarky se spinem $\frac{1}{2}$ jsou popsány symetrickou vlnovou funkcí; jako částice se spinem $\frac{1}{2}$ musí být fermiony a tedy podle Pauliho principu popsány úplně antisymetrickou vlnovou funkcí. Odpověď spočívá v existenci dalšího kvantového čísla, barvy (colour), které může nabývat tří různých hodnot. Barevná teorie vysvětluje síly působící mezi kvarky a také to, proč kvarkové kombinace obsazují pouze neexotické reprezentace $SU(3)$.

K popisu generátorů transformace X z $SU(3)$ potřebujeme hermiteovské matice λ_a , $a=1, \dots, 8$:

$$X = \exp\left(\frac{1}{2}i\theta^a \lambda_a\right) \quad . \quad (10.10)$$

Tyto matice jsou zobecněním matic τ_i z $SU(2)$, jejichž vložení do λ_a zvýrazníme tím, že místo některých nul budeme psát tečky:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & . \\ 1 & 0 & . \\ . & . & . \end{pmatrix} , \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & . \\ i & 0 & . \\ . & . & . \end{pmatrix} , \quad \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & . \\ 0 & -1 & . \\ . & . & . \end{pmatrix} , \\ \lambda_4 &= \begin{pmatrix} 0 & . & 1 \\ . & . & . \\ 1 & . & 0 \end{pmatrix} , \quad \lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & . & -i \\ . & . & . \\ i & . & 0 \end{pmatrix} , \quad \lambda_6 = \begin{pmatrix} . & . & . \\ . & 0 & 1 \\ . & 1 & 0 \end{pmatrix} , \\ \lambda_7 &= \begin{pmatrix} . & . & . \\ . & 0 & -i \\ . & i & 0 \end{pmatrix} , \quad \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (10.11)$$

Matice λ_a jsou normovány tak, že platí

$$\text{Tr}(\lambda_a \lambda_b) = 2 \delta_{ab} \quad (10.12)$$

a splňují komutační relace

$$\left[\frac{1}{2} \lambda_a, \frac{1}{2} \lambda_b \right] = i f_{abc} \frac{1}{2} \lambda_c \quad . \quad (10.13)$$

Soupis strukturních konstant je

$$\begin{aligned} f_{123} &= 1 \quad , \\ f_{147} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = f_{516} = f_{637} &= \frac{1}{2} \quad , \\ f_{458} = f_{678} &= \frac{\sqrt{3}}{2} \quad , \end{aligned} \quad (10.14)$$

další spočteme záměnou vzhledem k úplné antisymetrii indexů, tj.

$$f_{abc} = f_{bca} = f_{cab} = -f_{bac} = -f_{acb} = -f_{cba} \quad . \quad (10.15)$$

f_{abc} a δ_{ab} nejsou jedinými invariantními tensory $\mathbf{8}$ reprezentace. Spočteme-li si antikomutátory matic λ_a , dostaneme

$$\left\{ \frac{1}{2} \lambda_a, \frac{1}{2} \lambda_b \right\} = \frac{1}{3} \delta_{ab} + d_{abc} \frac{1}{2} \lambda_c \quad . \quad (10.16)$$

Antikomutátor je definován jako $\{A, B\} = AB + BA$. Konstanty d_{abc} jsou zcela symetrické:

$$d_{abc} = d_{bca} = d_{cab} = d_{bac} = d_{acb} = d_{cba} \quad (10.17)$$

a jejich soupis je

$$\begin{aligned} d_{118} = d_{228} = d_{338} = -d_{888} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \quad , \\ d_{146} = d_{157} = d_{256} = d_{344} = d_{355} &= \frac{1}{2} \quad , \\ d_{247} = d_{366} = d_{377} &= -\frac{1}{2} \quad , \\ d_{448} = d_{558} = d_{668} = d_{778} &= -\frac{1}{2\sqrt{3}} \quad . \end{aligned} \quad (10.18)$$

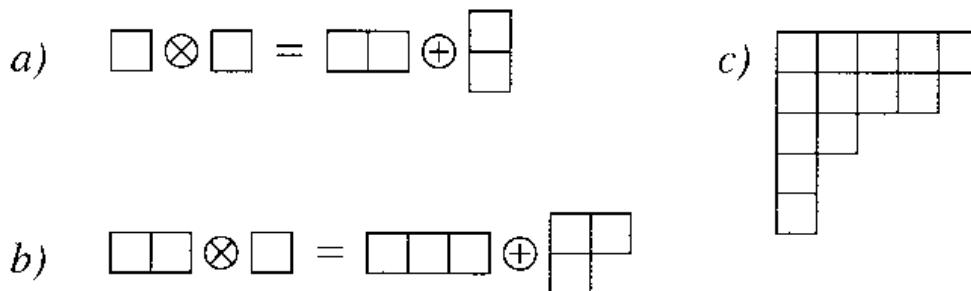
Tensory δ_{ab} , f_{abc} a d_{abc} jsou jedinými nezávislými invariantními tensory $\mathbf{8}$ reprezentace.

11. Reprezentace $SU(N)$; Youngovy diagramy

Už jsme se trochu zmínili o grupě $SU(6)$. Větší Lieovy grupy se také objevují ve fyzikálních úvahách. Existují obecné metody pro konstrukci jejich reprezentací. Nejprve se dohodněme, že případné dolní indexy přeměníme na horní s pomocí invariantního tensoru $\varepsilon^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N}$.

Fundamentální reprezentaci $SU(N)$, která odpovídá N -rozměrnému „spinoru“ ϕ^α zobrazíme pomocí čtverečku. Součin dvou takových reprezentací bude zobrazen pomocí dvou čtverečků, jako na Obrázku 7a. Je-li reprezentace symetrická, jsou čtverečky vedle sebe, je-li antisymetrická, jsou čtverečky pod sebou. Na Obrázku 7b je vidět, jak se tvoří větší reprezentace. Každému čtverečku je přiřazen index. U složitějších reprezentací, jako na Obrázku 7c, je příslušný tensor symetrický vzhledem ke všem permutacím indexů v jednom řádku. Ve vertikálním směru je situace komplikovanější; plynou z požadavku, že všechny vyznačené reprezentace jsou nezávislé. Vzniká tak následující předpis:

- (i) Všechny nezávislé ireducibilní reprezentace se odlišují Youngovými diagramy a každý Youngův diagram reprezentuje ireducibilní reprezentaci, pokud:
- (ii) Každá horizontální řada Youngova diagramu nemá více čtverečků než řada nad ní a každý sloupec nemá více čtverečků než sloupec vlevo od něj.
- (iii) V diagramu nemůže být více než $N-1$ řad, sloupec tedy nemůže obsahovat více jak $N-1$ čtverečků.



Obrázek 7 Youngovy diagramy.

A. Přehled některých vlastností matic

Mějme matici A dimenze $n \times n$ s prvky a_{ij} :

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} . \quad (\text{A.1})$$

Maticové prvky a_{ij} jsou (případně komplexní) čísla. Uvažujme ještě matici B téže dimenze $n \times n$ s prvky b_{ij} .

Definice: Součinem matic A a B nazveme matici C , jejíž maticové prvky jsou dány vztahem

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj} . \quad (\text{A.2})$$

Píšeme

$$C = AB . \quad (\text{A.3})$$

Poznamenejme, že (A.2) definuje maticové elementy c_{ij} pomocí a_{ij} a b_{ij} . Protože a_{ij} a b_{ij} jsou obyčejná čísla, nezáleží na pořadí, v jakém jsou zapsána. To ale neplatí pro násobení matic.

Obecně $C = AB \neq C' = BA$. Matice C' je dána prvky

$$c'_{ij} = \sum_{k=1}^n b_{ik} a_{kj} . \quad (\text{A.4})$$

Násobení matic je nekomutativní. Je však asociativní, tj. $A(BC) = (AB)C$.

Definice: Komutátorem dvou matic nazveme

$$[A, B] \equiv AB - BA . \quad (\text{A.5})$$

Říkáme, že matice A a B komutují, jestliže je jejich komutátor roven nule.

Definice: Součtem, popřípadě rozdílem dvou matic A a B nazveme matici C , jejíž maticové prvky jsou dány vztahem

$$c_{ij} = a_{ij} + b_{ij} , \quad C = A + B , \quad (\text{A.6})$$

popřípadě

$$c_{ij} = a_{ij} - b_{ij} , \quad C = A - B . \quad (\text{A.7})$$

Z (A.6) plyne $A+B=B+A$.

Definice: Součinem (komplexního) čísla a matice A je matice B , pro jejíž prvky platí

$$b_{ij} = x a_{ij} \quad , \quad B = x A \quad . \quad (\text{A.8})$$

Z (A.2) a (A.8) plyne

$$\sum_{k=1}^n b_{ik} b_{kj} = x^2 \sum_{k=1}^n a_{ik} a_{kj} \quad , \quad B^2 = x^2 A^2 \quad .$$

Definice: Jednotková matice $\mathbf{1}$ je definována jako

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

a platí

$$\mathbf{1} A = A \mathbf{1} = A \quad (\text{A.10})$$

pro všechny matice A .

Každé čtvercové $n \times n$ matici je přiřazeno (komplexní) číslo, determinant matice.

Determinant matice je (tzv. rozvoj podle i -tého řádku)

$$\det A = \sum_{k=1}^n a_{ik} (-1)^{i+k} \det A(i, k) \quad , \quad (\text{A.11})$$

kde $A(i, k)$ je matice, která vznikne z A vyškrtnutím i -tého řádku a k -tého sloupce. Determinant matice 0×0 je definován jako 1.

Řadu vlastností determinantů není obtížné odvodit. Tak pro determinant součinu matic $C = AB$ platí

$$\det C = \det(AB) = \det A \det B \quad . \quad (\text{A.12})$$

Pro $C = xA$ je

$$\det C = \det(xA) = x^n \det A \quad . \quad (\text{A.13})$$

Definice: Za předpokladu $\det A \neq 0$ existuje k matici A inverzní matice $B = A^{-1}$ taková, že

$$A^{-1} A = A A^{-1} = \mathbf{1} \quad , \quad (\text{A.14})$$

jejíž maticové prvky jsou (všimněme si $\det A(j, i)$, nikoliv $\det A(i, j)$)

$$b_{ij} = \frac{(-1)^{i+j} \det A(j, i)}{\det A} . \quad (\text{A.15})$$

Determinant je možné vyjádřit pomocí úplně antisymetrických ε -symbolů, definovaných jako $\varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} = 0$, pokud mají dva nebo více indexů i_1, i_2, \dots, i_n stejnou hodnotu, $\varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} = 1$, pokud jsou všechny hodnoty indexů různé a i_1, i_2, \dots, i_n vzniklo sudou permutací z $1, 2, \dots, n$ a konečně $\varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} = -1$, pokud jsou všechny hodnoty indexů různé a i_1, i_2, \dots, i_n vzniklo lichou permutací z $1, 2, \dots, n$. Determinant je potom

$$\varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} \det A = \varepsilon_{j_1 j_2 \dots j_n} A_{i_1 j_1} A_{i_2 j_2} \dots A_{i_n j_n} . \quad (\text{A.16})$$

(Na pravé straně sčítáme přes indexy j_1, j_2, \dots, j_n .)

Pro transponované a inverzní matice součinu matic platí

$$(AB)^T = B^T A^T , \quad (AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1} . \quad (\text{A.17})$$

První vztah plyne z (A.2), druhý z $\mathbf{1} = (AB)(AB)^{-1} = AB B^{-1} A^{-1} = \mathbf{1}$.

B. Derivování matic

Maticové prvky mohou být funkcemi více proměnných. Tyto funkce mohou být diferencovatelné. V takovém případě lze definovat derivaci matice.

Definice: Derivací matice A je matice, jejímiž prvky jsou derivace odpovídajících prvků matice A . Takže matice A'

$$A'(x) \equiv \frac{dA(x)}{dx} \quad (\text{B.1})$$

má maticové prvky

$$a'_{ij}(x) = \frac{da_{ij}(x)}{dx} . \quad (\text{B.2})$$

Derivace matice obecně nekomutuje se samotnou maticí. Ohlédneme-li od toho, jsou ostatní pravidla diferenciálního počtu zachována, což plyne z definice v (B.1) a (B.2). Například

$$\frac{d(A+B)}{dx} = \frac{dA}{dx} + \frac{dB}{dx} \quad (\text{B.3})$$

a

$$\frac{d(AB)}{dx} = \frac{dA}{dx}B + A\frac{dB}{dx} . \quad (\text{B.4})$$

Poslední vztah plyne z Leibnitzova pravidla

$$\frac{d}{dx} \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj} = \sum_{k=1}^n a'_{ik} b_{kj} + \sum_{k=1}^n a_{ik} b'_{kj} . \quad (\text{B.5})$$

Podobně

$$\frac{dA^n}{dx} = A' A^{n-1} + AA' A^{n-2} + \dots + A^{n-2} A' A + A^{n-1} A' . \quad (\text{B.6})$$

Pouze pokud by matice A a A' komutovaly, byla by derivace n -té mocniny rovna $n A^{n-1} A'$.

Derivaci inverzní matice spočteme z

$$0 = \frac{d\mathbf{1}}{dx} = \frac{d(A^{-1}A)}{dx} = \frac{dA^{-1}}{dx}A + A^{-1}\frac{dA}{dx} ,$$

odkud

$$\frac{dA^{-1}}{dx} = -A^{-1}\frac{dA}{dx}A^{-1} . \quad (\text{B.7})$$

C. Funkce matic

Funkce definované pomocí sečítání a násobení mohou být definovány také pro matice. Zejména důležitá je funkce $\exp x$. Ukážeme dvě možné definice.

Mějme matici A . Matice $\exp A$ je definována jako řada

$$\exp A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k , \quad A^0 = \mathbf{1} . \quad (\text{C.1})$$

Druhá definice je pomocí limity

$$\exp A = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(\mathbf{1} + \frac{A}{m} \right)^m . \quad (\text{C.2})$$

Důkaz, že (C.1) a (C.2) jsou ekvivalentní provedeme stejně jako pro obyčejnou exponenciální funkci, tedy vyjádřením binominálního rozvoje (C.2).

Vztah (C.2) vede k zajímavému výsledku při výpočtu

$$\det(\exp A) = \lim_{m \rightarrow \infty} \det\left(\mathbf{1} + \frac{A}{m}\right)^m . \quad (\text{C.3})$$

Determinant spočteme se zanedbáním členů řádu $1/m^2$ a menších. Vidíme to názorně na příkladu matice 2×2 , kde

$$\mathbf{1} + \frac{A}{m} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{a_{11}}{m} & \frac{a_{12}}{m} \\ \frac{a_{21}}{m} & 1 + \frac{a_{22}}{m} \end{pmatrix}, \quad \det\left(\mathbf{1} + \frac{A}{m}\right) = \left(1 + \frac{a_{11}}{m}\right)\left(1 + \frac{a_{22}}{m}\right) - \frac{a_{12}}{m} \frac{a_{21}}{m} .$$

Protože zanedbáváme členy řádu $1/m^2$ a menší, můžeme zanedbat mimodiagonální prvky a v součinu diagonálních zůstane vždy jen jeden, ostatní nahradí jednička, tj.

$$\det\left(\mathbf{1} + \frac{A}{m}\right) = 1 + \frac{1}{m}(a_{11} + a_{22}) + O\left(\frac{1}{m^2}\right) .$$

Obecně pak

$$\det\left(\mathbf{1} + \frac{A}{m}\right) = 1 + \frac{1}{m} \text{Tr} A + O\left(\frac{1}{m^2}\right) , \quad (\text{C.4})$$

kde jsme užili pojmu stopa matice $\text{Tr} A$ (trace, spur, odtud někdy značení $\text{Sp} A$)

$$\text{Tr} A \equiv \sum_{k=1}^n a_{kk} . \quad (\text{C.5})$$

Dosazení (C.4) do (C.3)

$$\det(\exp A) = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{m} \text{Tr} A + O\left(\frac{1}{m^2}\right)\right)^m ,$$

odkud

$$\det(\exp A) = \exp(\text{Tr} A) . \quad (\text{C.6})$$

D. Campbellova – Bakerova – Haussdorfova formule

CBH – formule se týká výpočtu matice C , pro kterou

$$\exp A \exp B = \exp C , \quad (\text{D.1})$$

kde $C = A + B + 1/2[A, B] + \dots$ opakované komutátory A a B . Mezi těmito komutátory nacházíme výrazy $[[A, B], B] = [A, B]B - B[A, B] = ABB - BAB - BAB + BBA$, $[[B, [A, B]], B]$, $[[[A, B], B], B]$ a další. Není zdaleka jednoduché stanovit číselné faktory, které stojí u opakovaných komutátorů. Naším cílem bude najít C ve vztahu (D.1), alespoň do členů s násobnými komutátory, obsahujícími dvě B a jedno A nebo dvě A a jedno B .

Nejprve zavedeme pomocnou proměnnou x tak, že píšeme

$$\exp(xA)\exp(xB) = \exp(C(x)) \quad . \quad (D.2)$$

I když je závislost na x členů na levé straně (D.2) jednoduchá, může obsahovat rozvoj $C(x)$ podle x velmi komplikované koeficienty závislé na A a B . Pokusíme se tedy najít C jako funkci x . Rozvineme proto levou i pravou stranu (D.2) do mocninných řad vzhledem k proměnné x . Předtím ale dokážeme některé pomocné vztahy.

Uvažujme

$$H(y) = \exp(-yF)G\exp(yF) \quad , \quad (D.3)$$

kde y je proměnná a F a G jsou na y nezávislé matice. H může být vyjádřeno ve tvaru mocninné řady

$$H = H_0 + yH_1 + \frac{y^2}{2!}H_2 + \frac{y^3}{3!}H_3 + \dots \quad . \quad (D.4)$$

Faktory $2!$, $3!$, ... (tj. vlastně Taylorův rozvoj) zavádíme pro zjednodušení výrazů při počítání.

Nyní máme spočítat H_n . Derivováním (D.3) dostáváme

$$\frac{dH(y)}{dy} = \frac{d\exp(-yF)}{dy}G\exp(yF) + \exp(-yF)G\frac{d\exp(yF)}{dy} \quad . \quad (D.5)$$

S pomocí vztahu

$$\frac{d\exp(yF)}{dy} = F\exp(yF) = \exp(yF)F \quad (D.6)$$

upravíme (D.5) na

$$\frac{dH(y)}{dy} = -F\exp(-yF)G\exp(yF) + \exp(-yF)G\exp(yF)F = [H, F] \quad . \quad (D.7)$$

S využitím vyjádření pomocí mocninné řady (D.4) máme tedy

$$H_1 + yH_2 + \frac{y^2}{2!}H_3 + \dots = [H_0, F] + y[H_1, F] + \frac{y^2}{2!}[H_2, F] + \dots \quad (D.8)$$

Spolu s $H_0 = G$ dává porovnání členů u stejné mocniny y v (D.8) rekurentní vztah

$$H_n = [H_{n-1}, F] = \left[\left[\left[\dots [G, F], F \right], F \right] \dots F \right] \quad (D.9)$$

Dosazeno do (D.4) dostáváme pro $y=1$

$$\begin{aligned} \exp(-F)G\exp(F) &= G + [G, F] + \frac{1}{2!}[[G, F], F] + \\ &\quad \frac{1}{3!}[[[G, F], F], F] + \dots \quad (D.10) \end{aligned}$$

Zavedeme zkrácené značení

$$H_n = \{G, F^n\} \quad (D.11)$$

nebo ještě kompaktnější zápis

$$\exp(-F)G\exp(F) = \{G, \exp(F)\} \quad (D.12)$$

kde předpokládáme, že $\exp(F)$ je vyjádřeno mocninnou řadou. Uvažujme nyní případ, kdy F bude funkcí proměnné x . Spočtème výraz

$$\exp(-yF(x))\frac{d}{dx}\exp(yF(x)) \quad (D.13)$$

Stejným postupem, jako jsme užili výše, dostaneme

$$\begin{aligned} \exp(-F(x))\frac{d}{dx}\exp(F(x)) &= F' + \frac{1}{2!}[F', F] + \frac{1}{3!}[[F', F], F] + \dots = \\ &\quad \left\{ F', \frac{\exp(F)-1}{F} \right\} \quad (D.14) \end{aligned}$$

Výraz (D.14) získáme tak, že položíme $G = d/dx$ ve výrazu (D.10). Pro komutátor platí

$$[G, F] = \frac{d}{dx}F - F\frac{d}{dx} \quad (D.15)$$

Počítáme tak, že d/dx působí doprava a že přirozeně za komutátorem mohou být další výrazy.

Podle pravidla o derivování součinu máme

$$\frac{d}{dx}F = \frac{dF}{dx} + F\frac{d}{dx} = F' + F\frac{d}{dx} \quad (D.16)$$

takže pro komutátor máme

$$[G, F] = F' \quad . \quad (D.17)$$

Z (D.14) máme

$$\frac{d}{dx} \exp(F) = \exp(F) \left\{ F', \frac{\exp(F) - 1}{F} \right\} \quad . \quad (D.18)$$

Vraťme se zpět k (D.2). Derivováním podle x dostaneme s přihlédnutím k (D.7):

$$\exp(xA) A \exp(xB) + \exp(xA) B \exp(xB) = \exp(C(x)) \left\{ C', \frac{\exp(C) - 1}{C} \right\} \quad (D.19)$$

neboli

$$\begin{aligned} \exp(xA) \exp(xB) (\exp(-xB) A \exp(xB) + \exp(-xB) B \exp(xB)) = \\ \exp(C(x)) \left\{ C', \frac{\exp(C) - 1}{C} \right\} \quad . \end{aligned} \quad (D.20)$$

Členy před závorkami na obou stranách (D.20) se podle (D.2) vykrátí. Protože $B \exp(xB) = \exp(xB) B$, je druhý člen v závorce na levé straně roven B . První člen upravíme podle (D.12). Dostáváme tak konečně

$$\left\{ C', \frac{\exp(C) - 1}{C} \right\} = \{A, \exp(xB)\} + B \quad . \quad (D.21)$$

Z této rovnice můžeme získat C ve tvaru mocninné řady. Sílu našeho abstraktního zápisu uvidíme, označíme-li pravou stranu jako H a píšeme

$$\begin{aligned} C' = \left\{ H, \frac{C}{\exp(C) - 1} \right\} = \left\{ H, 1 - \frac{C}{2} + \frac{C^2}{12} + \dots \right\} = \\ H - \frac{1}{2}[H, C] + \frac{1}{12}[[H, C], C] + \dots \quad , \end{aligned} \quad (D.22)$$

kde jsme využili mocninného rozvoje $C/(\exp(C) - 1) = 1/(1 + C/2 + C^2/6 + \dots)$. * Píšeme teď

* Vztah $\{X, f(Y)\} = Z \Rightarrow X = \{Z, f^{-1}(Y)\}$ můžeme dokázat tehdy, existuje-li k mocninné řadě $f(Y)$ mocninná řada inverzní, tedy vztah neplatí např. pro $f(Y) = Y$.

$$\begin{aligned}
C &= C_0 + xC_1 + \frac{x^2}{2!}C_2 + \frac{x^3}{3!}C_3 + \dots, \\
C' &= C_1 + xC_2 + \frac{x^2}{2!}C_3 + \dots, \\
H &= H_0 + xH_1 + \frac{x^2}{2!}H_2 + \dots = A + B + x[A, B] + \frac{x^2}{2!}[[A, B], B] + \dots,
\end{aligned} \tag{D.23}$$

a porovnáme po dosazení (D.23) do (D.22) členy u stejných mocnin x . Nejprve však musíme uvážit podmínku

$$C_0 = C(x=0) = 0. \tag{D.24}$$

Na x nezávislé členy dávají kombinaci

$$C_1 = H_0 = A + B, \tag{D.25}$$

a koeficient lineárního výrazu v x dává

$$C_2 = H_1 - \frac{1}{2}[H_0, C_1] = [A, B]. \tag{D.26}$$

Podobně nacházíme další koeficienty C_n :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}C_3 &= \frac{1}{2}H_2 - \frac{1}{4}[H_0, C_2] - \frac{1}{2}[H_1, C_1], \\
C_3 &= [[A, B], B] - \frac{1}{2}[A + B, [A, B]] - [[A, B], A + B] = \\
&\quad \frac{1}{2}[A, [A, B]] + \frac{1}{2}[[A, B], B],
\end{aligned} \tag{D.27}$$

(s využitím záměny $-[[A, B], A] = [A, [A, B]]$ a záměny $-[B, [A, B]] = [[A, B], B]$).

Postupně tak nalezneme další koeficienty C_i , které obsahují násobné komutátory, ve kterých vystupují předcházející C_j , $j < i$. Protože C_j jsou samy násobnými komutátory, platí totéž i pro C_i .

Dosazením (D.24), (D.25), (D.26) a (D.27) do (D.23) dostáváme pro $x=1$

$$\begin{aligned}
\exp(A)\exp(B) &= \exp(C) \\
C &= A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{12}[A, [A, B]] + \frac{1}{12}[[A, B], B] + \dots.
\end{aligned} \tag{D.28}$$

Je krásnou výzvou obdržet pomocí zde uvedené metody další komutátory v rozvoji C .

E. Skalární součin, unitární a hermiteovské matice

Mějme n -rozměrný vektorový prostor s ortonormální bází e_1, \dots, e_n . Připomeňme vlastnosti skalárního součinu:

1* symetrie

$$(\alpha, \beta) = (\beta, \alpha)^* \quad (\text{E.1})$$

2* první vlastnost linearity ($x \in \mathbb{C}$)

$$(\alpha, x\beta) = x(\alpha, \beta) \quad (\text{E.2})$$

3* druhá vlastnost linearity

$$(\alpha + \gamma, \beta) = (\alpha, \beta) + (\gamma, \beta) \quad (\text{E.3})$$

4* pozitivní definitnost

$$(\alpha, \alpha) \geq 0 \quad , \quad (\alpha, \alpha) = 0 \Leftrightarrow \alpha = 0 \quad (\text{E.4})$$

Díky symetrii skalárního součinu lze vlastnosti linearity psát také jako $(x\alpha, \beta) = x^*(\alpha, \beta)$ a $(\alpha, \beta + \gamma) = (\alpha, \beta) + (\alpha, \gamma)$.

Uvažujme dva vektory α a β , zapsané jako lineární kombinace vektorů báze:

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha_1 e_1 + \alpha_2 e_2 + \dots + \alpha_n e_n \quad , \\ \beta &= \beta_1 e_1 + \beta_2 e_2 + \dots + \beta_n e_n \quad , \end{aligned}$$

Protože báze je ortonormální, tj. platí

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij} \quad , \quad (\text{E.5})$$

platí pro skalární součin vektorů α a β

$$(\alpha, \beta) = \alpha_1^* \beta_1 + \alpha_2^* \beta_2 + \dots + \alpha_n^* \beta_n \quad (\text{E.6})$$

Mějme nyní matici A . Tato matice definuje zobrazení jednoho vektoru prostoru na jiný

$$\alpha' = A\alpha \quad , \quad (\text{E.7})$$

ve složkách je (E.7) zapsáno jako

$$\alpha'_i = \sum_{k=1}^n a_{ik} \alpha_k \quad . \quad (\text{E.8})$$

Jakým podmínkám musí vyhovovat matice A , aby zůstal skalární součin invariantní, tj. aby platilo $(\alpha, \beta) = (\alpha', \beta')$ pro libovolné vektory α a β ? Rozepsáno ve složkách máme

$$(\alpha', \beta') = \sum_k \alpha'_k \beta'_k = \sum_{klm} (a_{kl} \alpha_l)^* a_{km} \beta_m = \sum_{klm} \alpha_l^* a_{kl}^* a_{km} \beta_m \quad . \quad (\text{E.9})$$

Pro prvky transponované matice A^T platí

$$a_{ik}^T = a_{ki} \quad , \quad (\text{E.10})$$

a pro prvky hermiteovsky sdružené matice A^+ (transponovaná a komplexně sdružená)

$$a_{ik}^+ = a_{ki}^* \quad . \quad (\text{E.11})$$

Matice $B = A^+ A$ má prvky

$$b_{lm} = \sum_k a_{lk}^+ a_{km} = \sum_k a_{kl}^* a_{km} \quad ,$$

takže

$$(\alpha', \beta') = \sum_{klm} \alpha_l^* b_{lm} \beta_m \quad . \quad (\text{E.12})$$

Zaved' nyní vektor β''

$$\beta'' = B \beta \quad , \quad \beta_l'' = \sum_m b_{lm} \beta_m \quad . \quad (\text{E.13})$$

Potom můžeme (E.12) zapsat jako skalární součin (α, β'') a z požadavku invariance skalárního součinu

$$(\alpha, \beta) = (\alpha', \beta') = (\alpha, \beta'') \Rightarrow \beta = \beta'' \quad . \quad (\text{E.14})$$

Má-li tento vztah platit pro libovolné vektory α a β , musí být nutně $B = \mathbf{1}$, tj.

$$A^+ A = \mathbf{1} \Rightarrow A^+ = A^{-1} \quad . \quad (\text{E.15})$$

Matice A s vlastností (E.15) se nazývá unitární. Máme-li lineární prostor nad reálnými čísly, je $A^* = A$ a tedy $A^+ = A^T = A^{-1}$.

Stručný zápis a porovnání (E.9) a (E.12) dává

$$(A\alpha, A\beta) = (\alpha, A^+ A\beta) \quad , \quad (\text{E.16})$$

takže můžeme pro libovolnou matici A zapsat jako vlastnost skalárního součinu

$$(A\alpha, \beta) = (\alpha, A^+ \beta) \quad . \quad (\text{E.17})$$

Vlastní vektor matice A je vektor, pro který platí

$$A\alpha = \lambda\alpha \quad , \quad \sum_k a_{ik} \alpha_k = \lambda\alpha \quad , \quad (\text{E.18})$$

λ je vlastní hodnota matice A příslušná vektoru α . Za jakých podmínek jsou vlastní hodnoty matice reálné? Vezměme skalární součin $(\alpha, A\alpha) = \lambda(\alpha, \alpha)$. Je-li vektor α nenulový, je (α, α) reálné kladné číslo. Má-li být λ reálné, musí být $(\alpha, A\alpha)$ reálné. To znamená

$$(\alpha, A\alpha) = (\alpha, A\alpha)^* = (A\alpha, \alpha) = (\alpha, A^+ \alpha) \quad . \quad (\text{E.19})$$

Z (E.19) plyne, že musí být $A^+ = A$, tedy matice A musí být hermiteovská. Platí tak

$$A^+ = A \quad \Rightarrow \quad \lambda = \lambda^* \quad . \quad (\text{E.20})$$