Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Pavel Hájek

Dynamické symetrie ve fyzice

Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce:	doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr., DSc.
Studijní program:	Fyzika
Studijní obor:	Obecná fyzika

Praha 2011

Děkuji doc. RNDr. Pavlu Cejnarovi, Dr., DSc. za cenné rady a podnětné diskuze, které mi byly velmi prospěšné pro pochopení studované problematiky a následně při psaní mé práce.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V .... dne .... Podpis autora

Název práce: Dynamické symetrie ve fyzice
Autor: Pavel Hájek
Katedra (ústav): Ústav částicové a jaderné fyziky
Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr., DSc.
e-mail vedoucího: cejnar@ipnp.troja.mff.cuni.cz

Abstrakt: Cílem této práce je zavést pojmy dynamické grupy a dynamické symetrie a studovat jejich vlastnosti na jednoduchých kvantových systémech. Konkrétně se budeme zabývat Keplerovým problémem a izotropním harmonickým oscilátorem. Dynamická symetrie je typem vyšší symetrie, která je narušena specifickým způsobem. Definujeme pojmy dynamické grupy a kvantově mechanického systému, pro které zavedeme kvantové stupně volnosti a integrabilitu. Krátce též zmíníme možnost hledání generátorů dynamické grupy jako časově závislých integrálů pohybu.

Klíčová slova: dynamická symetrie, dynamické grupy, kvantová integrabilita, Keplerův problém, časově závislé integrály pohybu

Title: Dynamical symmetries in physics
Author: Pavel Hájek
Department: Institute of Particle and Nuclear Physics
Supervisor: doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr., DSc.
Supervisor's e-mail address: cejnar@ipnp.troja.mff.cuni.cz

Abstract: The aim of this thesis is to provide a definition of dynamical symmetry and to study its properties within simple quantum systems. In particular, I investigate Kepler's problem and the isotropic harmonic oscillator. Dynamical symmetry is a kind of higher symmetry which is broken in a specific way. Definition of dynamical group and quantum mechanical system is presented. Subsequently, a definition of quantum degrees of freedom and quantum integrability is proposed. I mention briefly a possibility of finding the generators of dynamical group by considering time dependent constants of motion.

Keywords: dynamical symmetry, dynamical groups, quantum integrability, Kepler's problem, time-dependent constants of motion

Obsah

Úvod

Koncept **symetrie** je ve fyzice a matematice velmi rozšířený a oblíbený. O universalitě a užitečnosti symetrií svědčí i nepřeberné množství publikací na toto a s ním příbuzná témata. Symetrie lze matematicky velice dobře formalizovat a sjednotit je v jednu základní matematickou strukturu, totiž v **grupu**. Zkoumání působení grup a jejich reprezentací je tedy hlavním matematickým odvětvím, ze kterého teorie symetrií čerpá.

Historicky první systematické použití symetrií spadá do 19. století, kdy se norský matematik Sophus Lie snažil nalézt cestu, jak sjednotit metody používané k řešení speciálních typů diferenciálních rovnic. Vzniknuvší Lieova teorie s sebou přináší pojmy jako **transformace přenášející řešení diferenciální rovnice** a **Lieova grupa transformací**. Velice brzy tato teorie přešla ve známost široké fyzikální veřejnosti, a to zejména díky **teorému Emmy Noetherové** z roku 1915, který existenci symetrie spojuje s fyzikálními **zákony zachování**. Původně matematické metody dostávají hlubší fyzikální význam a ve spojení s Lagrangeovským či s Hamiltonovským formalismem se středem zájmu stávají transformace zachovávající akci či energii. Speciálně v Hamiltonovské formalismu se jedná o veličiny **komutující s Hamiltoniánem**, takzvané **integrály pohybu**. Toerém Emmy Noetherové je ovšem pouze špičkou ledovce a za poctivé zavedení a zkoumání symetrických transformací vděčíme podle textu [1] zejména Hermannu Weylovi, Davidu Hilbertovi či Felixu Kleinovi. S nástupem kvantové mechaniky se symetrie stávají ještě více přístupné a ukazuje se, že na úrovni mikrosvěta mohou být symetrie, jako například výměnná symetrie nerozlišitelných částic, jedním z fundamentálních principů přírody. Kvantově mechanický popis symetrií jakožto lineárních zobrazení na vektorovém prostoru je obzvláště jednoduchý a účinný. Celý aparát pro studium symetrií lze shrnout pod křídla jedné matematické disciplíny, totiž **teorie reprezentací**. Tou se zabývalo mnoho slavných toeretiků jako Élie Cartan, Eugene Wigner, Henri Poincaré či opět Hermann Weyl.

V celé fyzice je dobře znám pojem **prostoročasové symetrie**. Ty jsou popisované Galileovou nebo Lorentzovou grupou a jakákoli fyzikální teorie musí dát prostor k jejich zachycení. Prostoročasové symetrie obsahují speciálně i transformace zahrnující čas. Avšak v textu budeme pracovat s nerelativistiskými teoriemi, kde čas nemá rovnocenné postavení jako prostorové souřadnice, nýbrž zde hraje roli evolučního parametru. Z hlediska prostoročasových symetrií se proto omezíme pouze na symetrie prostorové. Ty jsou popisovány **Eukleidovskou grupou**, jejíž působení generuje operátory úhlového momentu a hybnosti.

Klasická mechanika svým formalizmem podporuje rozdělení na **konfigurační a fázový prostor**. Běžně je užíváno pojmu **geometrické symetrie** pro všechny symetrie, které pocházejí z transformací na prostoru konfiguračním. Speciálně do této kategorie patří působení Eukleidovské grupy výše. Existují ovšem i systémy jako **Keplerův problém a izotropní harmonický oscilátor**, které mají symetrie vyšší. Takové symetrie operují s dynamickými veličinami, tedy s veličinami z celého fázového prostoru, a proto se jim v rámci klasické mechaniky říká **symetrie dynamické**. Typickým příkladem je **Runge-Lentzův vektor**, jemuž odpovídající symetrická transformace nepůsobí jako transformace na konfiguračním prostoru, nýbrž mixuje dohromady souřadnice a hybnosti.

Symetrie klasické mechaniky jsou dnes pravděpodobně nejvíce užitečné při zkoumání **integrability**, kterou implikuje existence komutujících integrálů pohybu v dostatečném počtu, rovném počtu stupňů volnosti. Symetrie, jež jsou spojeny s energii zachovávajícími integrály pohybu, se nazývají **invariantní symetrie**. S původní Lieovou teorií souvisí ovšem ještě pojem **neinvariantních symetrií**, které energii nezachovávají, ale stále například přenášejí jedno řešení Hamiltonových rovnic v druhé. Vyjma jistých pokročilých teorií se však v klasické mechanice příliš neuplatňují.

Hilbertův prostor **kvantové mechaniky** je prostorem dynamických stavů a bez udání dalších struktur nelze rozdělení na souřadnice a hybnosti uvažovat. **Geometrickými symetriemi** se zde obvykle míní symetrie zadané předem, čili postulované pro nějakou třídu uvažovaných systémů. Význam integrálů pohybu a invariantních symetrií je stejný jako v klasické mechanice. Klasickou mechanikou inspirovaná interpretace integrálů pohybu jako veličin zachovávajících se při vývoji systému ovšem není v kvantové mechanice preferovaná. Invariantní symetrie mají totiž kvůli jednoduchosti časové Schrödingerovy rovnice nejzávažnější důsledky pro podobu spektra Hamiltoniánu, respektive pro **degeneraci energetických hladin**. Na rozdíl od klasické mechaniky zde mají ovšem důležité postavení **neinvariantní symetrie**, což jsou zde transformace, jejichž generátory s Hamiltoniánem nekomutují, ale které například mixují vlastní stavy v různých energetickými hladinách. Ukazuje se totiž, že kvantově mechanickým problémem je výhodné se zaobírat v čistě algebraické rovině, uvažujeme-li speciální grupu neinvariantních symetrií, takzvanou **dynamickou grupu**.

Kvantová mechanika dává nový význam též pojmu **dynamické symetrie**.

- Původně se jednalo o „vyšší symetrie“ generující **náhodné degenerace**. To je případ Keplerova problému a izotropního LHO.

- V souvislosti s tím se zkoumaly systémy, u kterých je tato vyšší degenerace sejmuta jistým kontrolovaným, takzvaným **dynamickým narušením symetrie**. Ač již takový systém nemá původní vysokou invariantní symetrii, říkáme o něm, že má symetrii dynamickou.

- Oba dva předchozí případy zahrnuje definice dynamické symetrie pomocí dynamické grupy, kterou se budeme zabývat především.

Tento text má tři hlavní kapitoly lišící se úhlem pohledu.

1. V **první kapitole** chápeme symetrie standardně, tedy jako takové transformace objektů, které je nechávají nezměněné. Zabýváme se kvantovou mechanikou, kde se tyto symetrie projevují tak, že je vůči nim **invariantní** Hamiltonián. Vybudujeme obvyklý aparát pro práci s invariantními symetriemi, jehož implikace pak ilustrujeme na řešení problému degenerace hladin Keplerova problému a izotropního harmonického oscilátoru.

2. Ve **druhé kapitole** se od kvantově mechanických invariantních symetrií vzdálíme a budeme pracovat s pojmy jako dynamická grupa a dynamická symetrie. Tyto pojmy zavedeme a ilustrujeme na příkladech. Budeme přitom sledovat ve většině kvantově mechanických textů běžné chápání těchto pojmů jako něčeho, co je užitečné při řešení kvantového problému, ale nemá se symetriemi nic společného. Na základě dynamické grupy budeme definovat kvantově mechanický model nějakého systému jako sadu struktur, které zachycují veškerou dynamiku systému. Pro kvantově mechanický model definujeme počet stupňů volnosti, integrabilitu a dynamickou symetrii.

3. Konečně ve **třetí kapitole** budeme na symetrie nahlížet jako na transformace přenášející mezi sebou křivky řešení příslušných evolučních rovnic kvantové a klasické mechaniky. Zkoumání takových symetrií lze provádět ze stejného úhlu pohledu jak v klasické, tak v kvantové mechanice. Upozorníme zde ale na drobné odlišnosti. Širší třídou těchto symetrií jsou symetrie závislé explicitně na čase, které generují časově závislé integrály pohybu. Tyto symetrie jsou úzce spjaty s generátory „vhodné“ dynamické grupy a lze je použít k jejich nalezení. Bohužel rozsah práce a časové podmínky mi neumožňují tento přístup rozvést.

1. Standardní pojetí symetrie

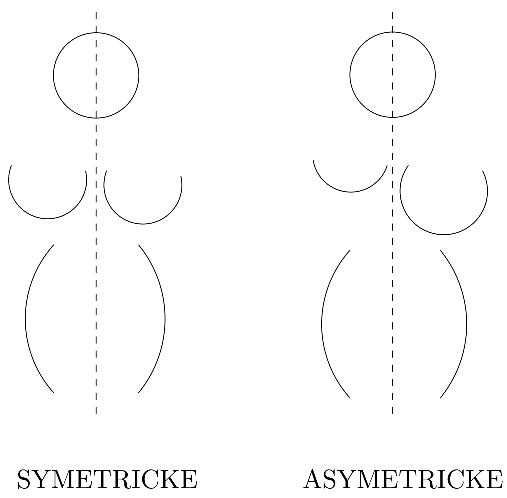
V této kapitole se budeme zabývat standardním pojetím symetrie jako transformace, vůči které je nějaký systém invariantní.

1. V **první** podkapitole připomeneme, jak bychom měli symetrii interpretovat fyzikálně a jak ji v souladu s tímto pohledem můžeme vhodně matematicky popsat.

2. Ve **druhé** podkapitole shrneme základní využití invariantních symetrií v kvantové mechanice, a to zejména s důrazem na uplatnění poznatků z teorie grup a reprezentací. Uvedeme a dokážeme některé matematické věty, jež lze použít při zkoumání spektra symetrického Hamiltoniánu, zejména co se degenerace hladin týče.

3. Ve **třetí** podkapitole prozkoumáme Keplerův problém a lineární harmonický oscilátor. Speciálně popíšeme všechny jejich invariantní symetrie, spektrum příslušných Hamiltoniánů a jejich degenerační grupy.

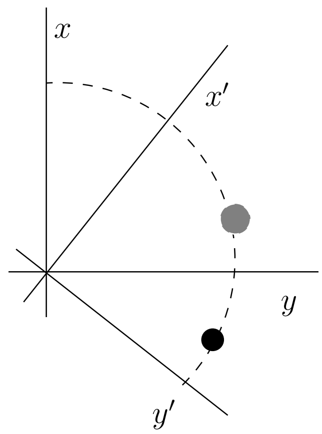
„*A thing is symmetrical if there is something you can do to it so that after you have finished doing it it looks the same as before.*“ (Hermann Weyl)



1.1 Symetrické transformace

Je-li objekt symetrický vůči nějaké transformaci znamená to, že pozorovatelé a ani celá fyzika nejsou schopni rozlišit, zda již byla uvažovaná transformace uskutečněna či ne. Průběh této transformace lze sice popsat, ale měřením nemůžeme získat žádnou evidenci o tom, ve které fázi se transformace nachází a ani o tom, zda se transformace náhodou neděje samovolně. Počáteční a koncový stav jsou z pohledu uvažované fyzikální teorie **nerozlišitelné**.

K popisu symetrií je potřeba porozumět dvěma pojmům, totiž co je to **aktivní a pasivní transformace**. První případ spíše vyhovuje matematickému uvažování a jedná se o situaci, kdy symetrická transformace transformuje jeden objekt na jiný. Oproti tomu pasivní transformace se týká změny úhlu pohledu. Jde tedy o přechod od jednoho pozorovatele k druhému. Typickým příkladem, kdy je toto rozlišování důležité, je časový vývoj v aktivním Schrödingerově obraze a v pasivním Heisenbergově obraze.



Obrázek 1: Při pasivní transformaci se $IS_1 = \{x, y\}$ otáčí po směru hodinových ručiček na $IS_2 = \{x', y'\}$. Poloha y' černé tečky je ta samá jako poloha y šedivé tečky. Šedivá tečka je ovšem černá tečka aktivně otočená proti směru hodinových ručiček.

Z hlediska symetrií nějaké rovnice $R(x) = 0$ se aktivní působení symetrické transformace chápe tak, že $R(F(x)) = 0$ pro každé x splňující $R(x) = 0$, kde F působí přímo na objektech x. Pasivní přístup by byl takový, že F transformuje rovnici $R(x) = 0$ na rovnici $\tilde{R}(y) = 0$ takovou, že $y = x$ je její řešení, právě když $F(x)$ je řešení rovnice původní. Symetrií se rozumí to, že řešení x původní rovnice je řešením pro všechny transformované rovnice, neboli $\tilde{R}(x) = 0$ pro všechna x, že $R(x) = 0$. Ve skutečnosi se ale jedná o různou interpretaci téhož.

To můžeme ilustrovat na příkladě **Galileovské invariance Newtonovské mechaniky**, tj. na tvrzení, že Newtonovy zákony jsou stejné pro všechny pozorovatele spojené Galileovskou transformací. Pasivně bychom mohli například říci, že volně se pohybující částice je řešením příslušných Newtonovských rovnic všech pozorovatelů, kteří spolu souvisejí Galileovou transformací. Aktivně pak řekneme, že po provedení Galileovy transformace na pohyb volné částice dostaneme opět pohyb volné částice, a to v rámci jednoho pozorovatele.

V kvantové mechanice jsou pozorovatelné, tj. aparáty pozorovatelů operátory $\hat{K}$ na Hilbertově prostoru dynamických stavů $\mathcal{H}$. Rozdílným pozorovatelům odpovídají rozdílné ortonormální báze $|\psi_i\rangle$, vůči kterým umějí pozorovatelé své pozorovatelné vyjádřit. Každé dvě báze, neboli každí dva pozorovatelé jsou spojení nějakou **unitární transformací** $\hat{U}$. Označíme-li čárkou veličiny po transformaci, můžeme $\hat{U}$ použít pasivně nebo aktivně.

$$\begin{aligned} \text{Aktivně}: \quad & |\psi'\rangle = \hat{U}\,|\psi\rangle\,, \quad && \hat{K}' = \hat{K} \\ \text{Pasivně}: \quad & |\psi'\rangle = |\psi\rangle\,, && \hat{K}' = \hat{U}\hat{K}\hat{U}^\dagger \end{aligned}$$

Význam prvního případu je zřejmý. Systém se aktivně transformuje v rámci jedné soustavy pozorovatele. Druhý případ myšlenkově odpovídá pouhé změně báze prostoru stavů na $|\psi_i'\rangle = \hat{U}\,|\psi_i\rangle$. Složky $|\psi\rangle$ se musejí transformovat skrze matici inverzního operátoru $\hat{U}^\dagger$ a požadavkem na transformovaný operátor $\hat{K}'$ je, aby působil na vektor se složkami c_i vzhledem k nové bázi $|\psi_i'\rangle$ stejně, jako působí $\hat{K}$ na vektor se stejnými složkami c_i ovšem vzhledem k bázi původní. Vyjadřujeme tedy skutečnost, že si pozorovatel „veze své měřící aparáty s sebou“, a tím pádem se jedná vzhledem k matematickému popisu o aparáty jiné. Navíc se snadno přesvědčíme, že takto definovaná aktivní a pasivní transformace by byly ve složkovém zápise ekvivalentní, pokud bychom v aktivnim přístupu vzali místo U inverzi $U^\dagger$. To proto, že změna báze o $\hat{U}$ je otočení vektorů o $\hat{U}^\dagger$.

Unitární jsou transformace proto, že jedině takové transformace zachovávají normalizaci, a tudíž pravděpodobnostní interpretaci kvantové mechaniky. Zachovávají navíc spektrum, což je něco, co identifikuje operátory jako pozorovatelné.

Časový vývoj v kvantové mechanice je popsán **Schrödingerovou rovnicí**

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\psi\rangle_t = \hat{H}\,|\psi\rangle_t\,,$$

kde $\hat{H}$ je Hamiltonián a kde jsme položili $\hbar = 1$. Při pasivním přístupu napíše druhý pozorovatel rovnici

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\psi\rangle_t = \hat{H}'\,|\psi\rangle_t$$

Jestliže pasivně chceme, aby každá křivku stavů $|\psi\rangle_t$, jež je řešením v první soustavě, byla řešením i v soustavě druhé, pak musí platit

$$\hat{H} = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger.$$

Pokud na druhou stranu aktivně požadujeme, aby pro řešení $|\psi\rangle_t$ bylo i $\hat{U}\,|\psi\rangle_t$ řešení pro stejného pozorovatele, dostaneme snadno z první rovnice

$$\hat{H} = \hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}.$$

Přímo se můžeme přesvědčit, že obě kritéria invariance jsou ekvivalentní a jedno dostaneme z druhého, uvážíme-li místo $\hat{U}$ inverzi $\hat{U}^\dagger$.

Symetrie Schrödingerovy rovnice tedy určuje Hamiltonián. Kupříkladu Galileova invariance se manifestuje speciálním tvarem Hamiltoniánu volné částice, totiž $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2}$, kde jsme položili hmotnost rovnou jedné.[1]

> Stejně jako zde, tak i v celém textu až do kapitoly (3) budeme uvažovat časově nezávislé Hamiltoniány $\hat{H}$ a časově nezávislé operátory $\hat{K}$. Dále bude $\hbar = 1$, $m = 1$, apod..

[1] V knize [19] je kupříkladu ukázáno, jak lze z pouhého požadavku Galileovské symetrie volné částice odvodit nutný tvar jejího Hamiltoniánu.

1.2 Invariantní symetrie v kvantové mechanice

Nejznámější symetrie kvantové mechaniky jsou symetrie Hamiltoniánu $\hat{H}$, neboli invariantní symetrie.

Definice 1.2.1. (Invariantní symetrie) Unitární operátor $\hat{V}$ je invariantní symetrií Hamiltoniánu $\hat{H}$ pokud splňuje

$$\hat{V}\hat{H}\hat{V}^{\dagger} = \hat{H}. \tag{1.2.1}$$

- Ze vztahů $(\hat{V}_1\hat{V}_2)^{\dagger} = \hat{V}_2^{\dagger}\hat{V}_1^{\dagger}$, $\hat{V}_i^{-1} = \hat{V}_i^{\dagger}$ platných pro všechny unitární operátory $\hat{V}_i$ se ihned nahlédne, že symetrie Hamiltoniánu mohou tvořit grupy, takzvané **grupy symetrie** G_S.
- Grupou symetrie budeme nazývat libovolnou množinu unitárních invariantních symetrií uzavírající se na grupu a nemyslíme jí tudíž nutně **úplnou grupu symetrie** obsahující všechny symetrie.

V textu se budeme zabývat výhradně **Lieovými grupami** G. Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ je pak **unitární reprezentací** G. To znamená, že je dáno spojité zobrazení z abstraktní grupy G do unitárních operátorů na $\mathcal{H}$ zachovávající grupovou operaci.

Často uvažujeme její **unitární jednoparametrické podgrupy**

$$\hat{V}_s = \exp(-is\hat{K}_i)\ ,\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\hat{V}_s = -i\hat{K}_i\hat{V}_s\ ,\ \hat{V}_0 = I$$

generované Hermitovskými operátory $\hat{K}_i$. Těmto operátorům říkáme generátory G a jejich počet n je roven dimenzi G. Generátory se uzavírají na Lieovu algebru se závorkou

$$[\hat{K}_1, \hat{K}_2] = i\hat{K}_3.$$

Kromě Lieovy algebry $\mathfrak{g}$ budeme ještě pracovat s **prostorem polynomů** $\mathcal{U}(\mathfrak{g})$ v generátorech $\mathfrak{g}$. Na něj je standardně rozšířena Lieova závorka a jedná se tedy též o Lieovu algebru. V širším smyslu ale budeme mít výrazem $\hat{T} \in \mathcal{U}(\mathfrak{g})$ zkráceně na mysli to, že operátor $\hat{T}$ je funkcí generátorů G.

Definice 1.2.2. (Integrál pohybu) Hermitovský operátor $\hat{K}$ nazveme integrálem pohybu pokud

$$[\hat{K}, \hat{H}] = 0 \tag{1.2.2}$$

- Operátory $\hat{V}_s$ tvoří unitární jednoparametrickou grupu invariantních symetrií, **právě když** je generátor $\hat{K}$ integrálem pohybu. Tento základní fakt je dokázán v knize [2].
- Speciálně je G_S grupou symetrie, **právě když** jsou její generátory $\hat{K}_i$ integrály pohybu.
- Z Jakobiho identity

  $$[\hat{K}_1, [\hat{K}_2, \hat{K}_3]] + [\hat{K}_3, [\hat{K}_1, \hat{K}_2]] + [\hat{K}_2, [\hat{K}_3, \hat{K}_1]] = 0$$

  se snadno ověří, že komutátor integrálů pohybu je opět integrálem pohybu. Integrály pohybu tudíž **tvoří Lieovu algebru**

Po připomenutí základních pojmů z teorie reprezentací následuje souhrn nejdůležitějších matematických vět, které se při studiu symetrií využívají.

- **Invariantní podprostor** grupy G je takový uzavřený podprostor $W \leq \mathcal{H}$, že $\hat{U}_g W \subseteq W$ pro každé $g \in G$.
- **Multiplet**, neboli **ireducibilní reprezentace** grupy G, je takový podprostor $\mathcal{H}$, že neobsahuje žádné netriviální invariantní podprostory. Multiplety grupy G umí teorie reprezentací klasifikovat až na unitární ekvivalenci. Třídy ekvivalence multipletů označujeme jako $[\alpha]$.
- **Casimirovým operátorem** grupy G míníme operátor $\hat{C}$, který je jednak polynomem v generátorech G, tedy $\hat{C} \in \mathcal{U}(\mathfrak{g})$, a který jednak se všemi generátory komutuje. Casimirovy operátory grupy G působí na multipletech jako konstanty.
- Důležité jsou takzvané **polojednoduché grupy** G dimenze n a ranku l. Existuje pro ně l Casimirových operátorů $\hat{C}_i$ takových, že přiřazení

  $$[\alpha] \to (C_1, \ldots, C_l),$$

  kde C_i jsou hodnoty $\hat{C}_i$ na multipletu typu $[\alpha]$, je prosté. Říkáme, že Casimirovy operátory jednoznačně označují (číslují) ireducibilní reprezentace.

Věta 1.2.3. (Invariance energetických hladin) Nechť je Hamiltonián $\hat{H}$ symetrický vůči G_S. Potom jsou vlastní podprostory $\hat{H}$ invariantními podprostory G_S. To slovy znamená, že všechny transformace z G_S a všechny generátory $\hat{K}_i$ zachovávají energii.

Důkaz : Pro libovolný $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, že $\hat{H}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$ a libovolný prvek $g \in G_S$ platí

$$\hat{H}(\hat{U}_g\,|\psi\rangle) = \hat{U}_g(\hat{U}_g^\dagger \hat{H}\hat{U}_g)\,|\psi\rangle = \hat{U}_g\hat{H}\,|\psi\rangle = E(\hat{U}_g\,|\psi\rangle).$$

Tedy $\hat{U}_g\,|\psi\rangle$ má opět energii E. Pro generátory je to zřejmé. □

Věta 1.2.4. (Komutující Hermitovské integrály pohybu) Casimirovovy operátory $\hat{C}$ grupy symetrie G_S komutují s $\hat{H}$ a mezi sebou navzájem. Každý Casimirův operátor generuje Hermitovské integrály pohybu $\hat{C} + \hat{C}^\dagger$, $\hat{C}^\dagger\hat{C}$, apod..

Důkaz : Že spolu Casimirovy operátory komutují je patrné z toho, že jsou funkcemi generátorů G_S a přitom každý z nich se všemi generátory komutuje. Ze stejného důvodu s nimi komutuje i $\hat{H}$. Hermitovskost je ze Stoneova teorému zaručena jen pro generátory G_S, ne pro Casimirovy operátory. K důkazu věty si zřejmě stačí uvědomit, že $\hat{C}^\dagger$ komutuje s G_S. Jestliže $\hat{U}_g^\dagger\hat{C}\hat{U}_g = \hat{C}$ pro každé $g \in G_S$, pak i $\hat{U}_g^\dagger\hat{C}^\dagger\hat{U}_g = \hat{C}^\dagger$, neboť $\hat{U}_g$ je unitární. □

Věta 1.2.5. (Společná báze komutujících operátorů) Nechť spolu Hermitovské operátory $\hat{K}_i$, $i = 1, \ldots, n$ po dvou komutují. Potom existuje společná ortonormální báze vlastních vektorů.

Důkaz : Rozložme prostor $\mathcal{H}$ na vlastní podprostory $\mathcal{H}_\lambda$ operátoru $\hat{K}_1$ příslušné vlastním číslům λ. Protože $\hat{K}_1\hat{K}_2\,|\psi\rangle = \hat{K}_2\hat{K}_1\,|\psi\rangle = \lambda\hat{K}_2\,|\psi\rangle$ pro $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_\lambda$, působí $\hat{K}_2$ jen v rámci $\mathcal{H}_\lambda$. Prostory $\mathcal{H}_\lambda$ se tedy rozkládají na podprostory $\mathcal{H}_{\lambda,\mu}$, což jsou zároveň vlastní podprostory $\hat{K}_1$ a zároveň vlastní podprostory $\hat{K}_2$ příslušné vlastnímu číslu μ. Dále lze postupovat indukcí podle i. □

Věta 1.2.6. (Rozklad $\mathcal{H}$ na multiplety) Unitární reprezentace $\mathcal{H}$ grupy G se direktně rozpadá na multiplety. Můžeme psát $\mathcal{H} = \bigoplus_{[\alpha]} \mathcal{H}_{[\alpha]}$, kde $\mathcal{H}_{[\alpha]}$ je direktní sumou $d([\alpha])$ multipletů $\mathcal{H}_\alpha$ typu $[\alpha]$. Číslo $d([\alpha])$ nazýváme multiplicitou $[\alpha]$ v $\mathcal{H}$.

Důkaz : Každá unitární reprezentace G je úplně reducibilní, neboli se direktně rozkládá na multiplety. Pokud celé $\mathcal{H}$ není ireducibilní reprezentací, pak existuje netriviální invariantní podprostor $\mathcal{H}_1$. Pro uzavřený podprostor $\mathcal{H}_1$ existuje v Hilbertově prostoru ortogonální doplněk $\mathcal{H}_2$, že $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus_\perp \mathcal{H}_2$. Prostor $\mathcal{H}_2$ je kvůli unitaritě operátorů z G také invariantním podprostorem. Jsou-li totiž $g \in G_S$, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1$ a $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_2$ libovolné, pak

$$\left\langle \psi \mid \hat{U}_g \varphi \right\rangle = \left\langle \hat{U}_g \hat{U}_g^\dagger \psi \mid \hat{U}_g \varphi \right\rangle = \left\langle \hat{U}_g^\dagger \psi \mid \varphi \right\rangle = 0,$$

protože $\hat{U}_g^\dagger |\psi\rangle$ je z $\mathcal{H}_1$. Takto lze postupovat indukcí až k nejmenším ireducibilním reprezentacím. □

Věta 1.2.7. (Multiplety jsou vlastní podprostory) Nechť je $\hat{H}$ symetrický vůči polojednoduché grupě G_S ranku l. Potom v každém $\mathcal{H}_{[\alpha]}$ existuje vlastní vektor $\hat{H}$. Speciálně když je $d([\alpha]) \leq 1$ pro každé $[\alpha]$, pak lze psát

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{C}_1, \ldots, \hat{C}_l). \tag{1.2.3}$$

Důkaz : Jelikož $\hat{H}$ komutuje se všemi $\hat{C}_i$, existuje báze jejich společných vektorů. Společné vlastní podprostory $\hat{C}_i$ jsou přitom prostory $\mathcal{H}_{[\alpha]}$ a v nich tedy leží i vlastní vektory $\hat{H}$. Když je $d([\alpha]) \leq 1$, pak vlastní vektory $\hat{H}$ leží v každém konkrétním $\mathcal{H}_\alpha$. Protože jsou vlastní podprostory $\hat{H}$ invariantní, musí být rovny celému $\mathcal{H}_\alpha$. Všechny $\mathcal{H}_\alpha$ jednoznačně označují $(C_1, \ldots, C_l)$, lze psát $E = E(C_1, \ldots, C_l)$ a potažmo $\hat{H} = \hat{H}(\hat{C}_1, \ldots, \hat{C}_l)$. □

Definice 1.2.8. (Degenerační grupa) Degenerační grupa je taková grupa invariantních symetrií, kdy energetické hladiny $\hat{H}$ jsou přesně její multiplety.

Zajímá-li nás **spektrum** $\hat{H}$ a jeho **degenerace**, je záhodné najít tak velkou grupu symetrie G_S, že Hamiltonián bude možné vyjádřit v jejích Casimirových operátorech. Znalost reprezentace G_S na $\mathcal{H}$ nám pak dává všechny hodnoty

$(C_1, \ldots, C_l)$ a z $E = E(C_1, \ldots, C_l)$ i celé spektrum. Známe-li též dimenze a multiplicity multipletů $(C_1, \ldots, C_l)$, můžeme zespoda odhadnout degenerace jednotlivých energetických hladin. Vidíme, že problém nalezení spektra a degenerace hladin lze s vhodnou grupou symetrie řešit **algebraicky**.

Hamiltonián ale může mít nějaký speciální tvar a funkce $E = E(C_1, \ldots, C_l)$, může například na dvou různých $(C_1, \ldots, C_l)$ nabývat stejné hodnoty. O této situaci mluvíme jako o **náhodné degeneraci**.

Je-li tato degenerace **systematická**, může to být známkou existence nějaké vyšší grupy symetrie $G_S^* \supset G_S$. Multiplety grupy G_S^* se totiž na multiplety podgrupy G_S rozkládají a v obráceném pohledu můžeme říci, že se různé multiplety G_S do multipletů G_S^* spojují. Takové vyšší symetrii také někdy říkáme **dynamická symetrie**. Typicky se vyšší symetrie nachází, když zkoumáme konkrétní systém ze třídy systémů s nějakou očekávanou **geometrickou symetrií**. Vyřešíme ho analytickými prostředky typickými pro danou geometrickou symetrii a teprve pak, když máme k dispozici energie vidíme, že multiplety grupy geometrické symetrie jsou systematicky degenerované. To je přesně případ Keplerova problému a izotropního harmonického oscilátoru. U těchto systému tvoří dynamická symetrie dokonce **degenerační grupu**.

1.3 Invariantní symetrie Keplerova problému a LHO

Z hlediska kvantové mechaniky mají Keplerův problém a izotropní harmonický oscilátor společné to, že se jedná o systémy se sféricky symetrickým potenciálem, které jsou **nezvykle hodně degenerované**. Kromě standardní rotační invariance shodné pro všechny sféricky symetrické systémy zde nalézáme symetrii vůči nečekaně **velké degenerační grupě**, která nemá geometrický původ.

V obou případech pracujeme na $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ a uvažované Hamiltoniány jsou

Keplerův problém : $\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{K}{q}$

Lineární harmonický oscilátor : $\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\omega_i(\hat{q}_i^2 + \hat{p}_i^2)$.

Izotropní LHO je charakterizován tím, že $\omega_i = \omega$ pro všechna $i = 1, \ldots, 3$.

U Hamiltoniánu izotropního LHO a Keplerova problému je sférická $SO(3)$ symetrie zřejmá, neboť zavisejí pouze na normách vektorových operátorů $\hat{\mathbf{q}}$ a $\hat{\mathbf{p}}$. Přitom se pozorovatelné $\hat{\mathbf{q}}$ a $\hat{\mathbf{p}}$ při působení operátoru rotace $\hat{R}$ transformují tak, jako bychom je násobili rotační maticí R.

Keplerův problém a izotropní LHO jsou **rotačně invariantní**. Příslušný integrál pohybu je **úhlový moment**

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{q}} \times \hat{\mathbf{p}}.$$

Casimirův operátor $\mathfrak{so}(3)$ je $\hat{\mathbf{L}}^2$ a platí komutační relace

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k \ , \ [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0 \ , \ [\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0 \ , \ [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0.$$

Kvůli těmto komutačním relacím se můžeme omezit pouze na společné vlastní vektory $\psi_{nlm} = R_{nl}Y_{lm}$ operátorů $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ a $\hat{\mathbf{L}}_z$ a separovat Schödingerovu rovnici na úhlovou a radiální část.

Řešením úhlové části jsou sférické harmonické funkce Y_{lm}, pro něž platí

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm} \ , \ \hat{L}_z Y_{lm} = mY_{lm}.$$

Pro pevné celé $l > 0$ jsou prostory $D_l = \mathrm{span}\{Y_{lm} : m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l\}$ multiplety $SO(3)$, které mají dimenzi $2l+1$.

Funkce R_{nl} a energie E_{nl} nalezneme vyřešením radiální Schrödingerovy rovnice. Spektrum LHO je kladné a diskrétní. Spektrum Keplerova problému se dělí na diskrétní vázané stavy $E < 0$ a spojité spektrum $E \geq 0$.

Vázané energie Keplerova problému a energie izotropního LHO s příslušnými degeneracemi $N(q)$ jsou $(n, l = 0, 1, 2, \ldots)$:

Keplerův problém : $E_{nl} = -\frac{K^2}{2(n+l+1)^2}$, $q = n + l + 1$

$N(q) = q^2$, $l = 0, 1, 2, \ldots, q-1$

Izotropní LHO : $E_{nl} = \omega(2n + l + \frac{3}{2})$, $q = 2n + l$

$N(q) = \frac{1}{2}(q+1)(q+2)$, $l = 0, 2, 4, \ldots, q$ pro q sudé, $l = 1, 3, 5, \ldots, q$ pro q liché

.

Je zřejmé, že systematická degenerace hladin se zde projevuje různými hodnotami l pro pevné q. Pro Keplerův problém je $l = 0, 1, 2, \ldots, q-1$. To by odpovídalo hodnotám, které by pro nějaké (zatím abstraktní) úhlové vektory $\hat{\mathbf{J}}^{\pm}$ nabýval celkový úhlový moment $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{J}}^{+} + \hat{\mathbf{J}}^{-}$ v rozkladu

$$D_{J^+} \otimes D_{J^-} = \bigoplus_{l=|j^+-j^-|}^{j^++j^-} D_l$$

$(2j^+ + 1)(2j^- + 1)$ rozměrného multipletu grupy $SU(2) \otimes SU(2)$ na multiplety $SU(2)$ s podmínkami

$$(\hat{\mathbf{J}}^{+})^2 = (\hat{\mathbf{J}}^{-})^2 \ , \ q = 2j^+ + 1. \tag{1.3.1}$$

Píšeme-li

$$\hat{\mathbf{J}}^{\pm} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}} \pm \hat{\mathbf{B}}),$$

dostaneme z komutačních relací

$$[\hat{J}_i^+, \hat{J}_j^+] = i\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k^+ \ , \ [\hat{J}_i^-, \hat{J}_j^-] = i\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k^- \ , \ [\hat{J}_i^+, \hat{J}_j^-] = 0$$

a z $(\hat{\mathbf{J}}^{+})^2 = (\hat{\mathbf{J}}^{-})^2$ podmínky na $\hat{\mathbf{B}}$ ve tvaru

$$[\hat{L}_i, \hat{B}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{B}_k \ , \ [\hat{B}_i, \hat{B}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k \ , \ \hat{\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{B}} = 0.$$

Je $q^2 = (2j^+ + 1)^2 = 4(j^+(j^+ + 1) + \frac{1}{4})$ a z výrazu pro energii vázaného stavu dostaneme další podmínku

$$-2\hat{H}\hat{\mathbf{B}}^2 = 2\hat{H}(\hat{\mathbf{L}}^2 + 1) + K^2. \tag{1.3.2}$$

Uvedené rovnice mají pro vektor $\mathbf{B}$ řešení a je jím $\hat{\mathbf{B}} = \frac{1}{\sqrt{-2\hat{H}}}\hat{\mathbf{A}}$, kde $\hat{\mathbf{A}}$ je tzv Runge-Lentzův vektor.

Runge-Lentzův vektor

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{K\hat{\mathbf{q}}}{q} = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{q}}p^2 - \hat{\mathbf{p}}(\hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \hat{\mathbf{q}}\hat{H}$$

splňuje vztahy $\hat{\mathbf{A}}^2 = 2\hat{H}(\hat{\mathbf{L}}^2 + 1) + K^2$, $\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = 0$ a komutační relace

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -2i\varepsilon_{ijk}\hat{H}\hat{L}_k \ , \ [\hat{L}_i, \hat{A}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{A}_k \ , \ [\hat{H}, \hat{\mathbf{A}}] = 0.$$

Speciálně je $\hat{\mathbf{A}}$ integrálem pohybu Keplerova problému.

Všimněme si, že $\hat{H}$ komutuje s $\hat{\mathbf{B}}$ na vázaných stavech již podle konstrukce, neboť je $\hat{H}$ konstantní na ireducibilních reprezentacích $D_{j^+} \otimes D_{j^-}$ grupy $SU(2) \otimes SU(2)$, v jejichž generátorech $\hat{\mathbf{J}}^{\pm}$ je $\hat{\mathbf{B}}$ vyjádřen.

Kvůli tomu, že generátory $SU(2) \otimes SU(2)$ a $SO(4)$ generují stejnou Lieovu algebru, a kvůli omezujícím podmínkám (1.3.1) na vyskytující se reprezentace dostáváme, že vázané stavy Keplerova problému mají $SO(4)$ symetrii.

Runge-Lentzův vektor $\hat{\mathbf{A}}$ je integrálem pohybu pro všechny energetické hladiny. Bohužel se ale integrály pohybu $\hat{\mathbf{A}}$ a $\hat{\mathbf{L}}$ neuzavírají v Lieovu algebru, jak je patrné z komutačních relací v rámečku, kde v $[\hat{A}_i, \hat{A}_j]$ vystupuje $\hat{H}$. Normovaný vektor $\hat{\mathbf{B}}$ lze ovšem definovat i pro spojité spektrum $E > 0$ a pro $E = 0$. Pokaždé bude $\hat{\mathbf{B}}$ spolu s $\hat{\mathbf{L}}$ bází jiné Lieovy algebry, která bude generovat jinou grupu symetrie.

Pro $E < 0$, $E > 0$ a $E = 0$ definujme vektory

$$\hat{\mathbf{B}}^- = \frac{1}{\sqrt{-2E}}\hat{\mathbf{A}} \ , \ \hat{\mathbf{B}}^+ = \frac{1}{\sqrt{2E}}\hat{\mathbf{A}} \ , \ \hat{\mathbf{B}}^0 = \hat{\mathbf{A}}.$$

Vektory $\hat{\mathbf{B}}^{\pm}$, $\hat{\mathbf{B}}^{0}$ splňují na příslušných oborech komutační relace

$$
\begin{array}{lll}
[\hat{L}_i, \hat{B}_j^-] = i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k & [\hat{L}_i, \hat{B}_j^+] = i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k & [\hat{L}_i, \hat{B}_j^0] = i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k \\
[\hat{L}_i, \hat{B}_j^-] = i\varepsilon_{ijk}\hat{B}_j^- & [\hat{L}_i, \hat{B}_j^+] = i\varepsilon_{ijk}\hat{B}_j^+ & [\hat{L}_i, \hat{B}_j^0] = i\varepsilon_{ijk}\hat{B}_j^0 \\
[\hat{B}_i^-, \hat{B}_j^-] = i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k & [\hat{B}_i^+, \hat{B}_j^+] = -i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k & [\hat{B}_i^0, \hat{B}_j^0] = 0
\end{array}
$$

a spolu s úhlovým momentem $\hat{\mathbf{L}}$ tvoří Lieovy algebry

$$\hat{\mathbf{B}}^- : \mathfrak{so}(4)\ ,\ \hat{\mathbf{B}}^+ : \mathfrak{so}(3,1)\ ,\ \hat{\mathbf{B}}^0 : \mathfrak{e}(3).$$

Casimirovy operátory $\mathfrak{so}(4)$ a $\mathfrak{so}(3,1)$ jsou prvky

$$\hat{C}_1^{\pm} = (\hat{\mathbf{B}}^{\pm})^2 \mp \hat{\mathbf{L}}^2\ ,\ \hat{C}_2^{\pm} = \hat{\mathbf{B}}^{\pm} \cdot \hat{\mathbf{L}} = 0.$$

Ty generují **grupu čtyřřozměrných rotací** $SO(4)$, **Minkovského grupu** $SO(3,1)$ a **Eukleidovskou grupu** $SE(3)$, které jsou pro $E < 0$, $E > 0$ a $E = 0$ degeneračními grupami Keplerova problém.[a]

[a] Přesněji jsou degeneračními grupami $O(4)$, $O(3,1)$ a $E(3) = O(3) \ltimes \mathbb{R}^3$.

S ohledem na definici $\hat{\mathbf{B}}^{\pm}$ dostáváme dosazením Casimirových operátorů do $\hat{\mathbf{A}}^2 = 2\hat{H}(\hat{\mathbf{L}}^2 + 1) + K^2$ a vyřešení vzhledem k $\hat{H}$ následující.

Hamiltonián Keplerova problému pro $E > 0$ a $E < 0$ lze zapsat jako

$$\hat{H} = \frac{K^2}{\pm 2((\hat{\mathbf{B}}^{\pm})^2 \mp \hat{\mathbf{L}}^2 \mp 1)} = \frac{K^2}{\pm 2(\hat{C}_1^{\pm} \mp 1)}.$$

.

Pro **izotropní LHO** se nejprve definují bosonové anihilační a kreační operátory.

Anihilační a kreační operátory lineárního harmonického oscilátoru

$$\hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q}_i + i\hat{p}_i)\ ,\ \hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q}_i - i\hat{p}_i)$$

splňují komutační relace

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0\ ,\ [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0\ ,\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}. \tag{1.3.3}$$

Generují takzvanou **Heisenberg-Weylovu algebru** $\mathfrak{hw}(3)$. Hamiltonián lze zapsat jako

$$\hat{H} = \omega \sum_{i=1}^{3} \left(\hat{N}_i + \frac{1}{2} \right), \tag{1.3.4}$$

kde $\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ je hermitovský **operátor počtu částic** splňující komutační relace

$$[\hat{N}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}\hat{a}_j^\dagger\ ,\ [\hat{N}_i, \hat{a}_j] = -\delta_{ij}\hat{a}_j\ ,\ [\hat{N}_i, \hat{N}_j] = 0.$$

Známým cvičením je algebraický důkaz faktu, že spektrum LHO je **ireducibilní reprezentací algebry** $\mathfrak{hw}(3)$. Existuje totiž stav s nejnižší energií $|0\rangle$ a všechny ostatní stavy vygenerujeme působením slov z operátorů $\hat{a}_i^\dagger$ jako

$$|n_1, n_2, n_3\rangle = \mathcal{N}_{n_1,n_2,n_3}\ (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{n_2}(\hat{a}_3^\dagger)^{n_3}\,|0\rangle\,,$$

kde $\mathcal{N}_{n_1,n_2,n_3}$ je normalizační konstanta. Takový stav má energii

$$E(n_1, n_2, n_3) = \omega(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}).$$

Hamiltonián (1.3.4) lze chápat jako normu $\|\mathbf{z}\| = \bar{z}_1 z_1 + \bar{z}_2 z_2 + \bar{z}_3 z_3$ komplexního vektoru $\mathbf{z}$, kde roli z_i hrají anihilační operátory $\hat{a}_i$. Normu $\|\mathbf{z}\|$ zachovávají právě všechny unitární transformace z $U(3)$. Grupa $U(3)$ ovšem může působit i na vektoru operátorů $\hat{a}_i^\dagger$, a to podle předpisu

$$U\hat{a}_i^\dagger U^\dagger = \sum_{i=1}^{3} U_{ji}\hat{a}_j^\dagger. \tag{1.3.5}$$

Protože jiné než unitární transformace normu nezachovávají, máme následující.

Degenerační grupou izotropního LHO je grupa $U(3)$. Algebra $\mathfrak{u}(3)$ se realizuje v operátorech

$$\hat{u}_{ij} = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$$

splňujících komutační relace

$$[\hat{u}_{ij}, \hat{u}_{kl}] = \delta_{jk}\hat{u}_{il} - \delta_{il}\hat{u}_{kj}, \tag{1.3.6}$$

Celkový operátor počtu částic $\hat{N} = \sum_{i=1}^3 \hat{N}_i = \sum_{i=1}^3 \hat{u}_{ii}$ je Casimirovým operátorem $U(3)$ a Hamiltonián lze zapsat jako

$$\hat{H} = \omega(\hat{N} + \frac{3}{2}).$$

Pro zajímavost uveďme, že všechny výpočty provedené výše lze jak pro LHO, tak pro Keplerův problém zopakovat i v obecných n rozměrech. Geometrickou symetrií pak bude grupa $SO(n)$ a úhlový moment bude $\frac{1}{2}n(n-1)$ rozměrný antisymetrický tenzor $\hat{L}_{ij}$. V definici Runge-Lentzova vektoru zaměníme $\times$ za obecnější antisymetrický produkt $\wedge$ a dostaneme Runge-Lentzův tenzor s analogickými vlastnostmi. Degenerační grupou vázaných stavů Keplerova problému bude $SO(n+1)$ a degenerační grupou izotropního LHO bude $U(n)$.

2. Dynamické grupy a dynamické symetrie

V této kapitole se budeme zabývat operátory, které s Hamiltoniánem obecně nekomutují,

$$[\hat{H}, \hat{K}] \neq 0,$$

ale které lze též vhodně využít. Budeme chtít dospět k obecné definici dynamické symetrie v moderním pojetí. Také budeme chtít popsat některé nejdůležitější důsledky její existence. K tomu je ovšem nutné nejprve porozumět algebraické struktuře kvantové mechaniky a dynamickým grupám. Pomocí dynamických grup definujeme kvantovou integrabilitu, která bude hlavním důsledkem existence dynamické symetrie. Kvantová integrabilita je pak zase situací, kdy existuje dostatečné množství dobrých kvantových čísel k jednoznačnému označování stavů. Struktura této kapitoly je tudíž následovná.

1. V **první** podkapitole budeme řešit obecný kvantový problém algebraicky. Budeme studovat, jaké operátory je potřeba přidat k integrálům pohybu tak, aby výsledná algebra byla po praktické stránce přínosná.

2. Ve **druhé** podkapitole definujeme pojmy dynamické grupy, čímž začneme na kvantové problémy nahlížet v rámci reprezentační teorie. Uvedeme též dostatečné množství názorných příkladů, které ovšem z důvodu udržení rozumných rozměrů této práce zde nebylo možné řešit úplně důsledně.

3. Ve **třetí** podkapitole definujeme úplnou množinu komutujících operátorů a kanonický řetězec podgrup. Budeme se zabývat tím, jak lze díky těmto pojmům jednoznačně označovat bázi prostoru stavů. V našem algebraickém pohledu dále definujeme nestandardní pojmy kvantových stupňů volnosti a integrability. Příklady také nebudou chybět.

4. **Čtvrtá** podkapitola je věnována dynamické symetrii, jejím implikacím a popisu dynamického narušení symetrie.

2.1 Algebraické řešení kvantového problému

Na konci podkapitoly (1.2) jsme obecně diskutovali, jak lze ze znalosti dostatečně velké grupy invariantních symetrií vydedukovat spektrum a degenerace energetických hladin. Za jistých předpokladů nám vše vyplývalo doslova „z tabulek“ o ireducibilních reprezentacích a tento problém jsme mohli vyřešit **algebraicky**. Potřebovali jsme k tomu

1. najít grupu symetrie G_S,
2. vyjádřit $\hat{H} = \hat{H}(\hat{C}_1, \ldots, \hat{C}_l)$, kde $\hat{C}_i$ jsou Casimirovy operátory G_S.

Dalším krokem k úplném řešení kvantového problému je nalezení stacionárních stavů. Pokračujíce v algebraickém duchu se budeme zabývat tím, jestli lze všechny vlastní vektory $\hat{H}$ **vygenerovat z nejlépe jednoho vlastního vektoru**. Tím si při řešení v mnohém ulehčíme práci a navíc úvahami provedenými zde se nám stane dostupnější pojem dynamické grupy, který se chystáme zavést v následující kapitole.

Příklad 2.1.1. (Generování vlastních vektorů LHO se stejnou energií) Uvažme izotropní případ n rozměrného LHO s degenerační grupou $U(n)$. Pro $i \neq j$ máme například

$$[\hat{N}_i, \hat{u}_{ij}] = \hat{u}_{ij} \ , \ [\hat{N}_i, \hat{u}_{ji}] = -\hat{u}_{ji} \ , \ [\hat{u}_{ij}, \hat{u}_{ji}] = \hat{N}_i - \hat{N}_j \ , \ \hat{u}_{ij}^\dagger = \hat{u}_{ji} \qquad (2.1.1)$$

a vidíme, že $\hat{u}_{ij}$, $i \neq j$ zdvihá a snižuje vlastní číslo operátoru i-tého počtu částic $\hat{N}_i$ o 1 a zároveň o 1 snižuje vlastní číslo operátoru $\hat{N}_j$. Protože ale $[\hat{u}_{ij}, \hat{H}] = 0$, $\hat{u}_{ij}$ nemění energii. Takto lze vygenerovat celé energetické hladiny.

Příklad 2.1.2. (Generování vlastních vektorů LHO s různou energií) Uvažme obecně anizotropní n rozměrný LHO s n frekvencemi ω_i. Hamiltonián je $\hat{H} = \sum_{i=1}^{n} \omega_i(\hat{N}_i + \frac{1}{2})$ a jsou splňeny komutační relace

$$[\hat{H}, \hat{a}_i] = -\omega_i \hat{a}_i \ , \ [\hat{H}, \hat{a}_i^\dagger] = \omega_i \hat{a}_i^\dagger \ , \ [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \qquad (2.1.2).$$

Pokud je $|E\rangle$ vlastní vektor s energií E, pak platí

$$\hat{H}\hat{a}_i \, |E\rangle = ([\hat{H}, \hat{a}_i] + \hat{a}_i \hat{H}) \, |E\rangle = \omega_i \hat{a}_i \, |E\rangle + E\hat{a}_i \, |E\rangle = (\omega_i + E)\hat{a}_i \, |E\rangle \, .$$

Přímo z komutačních relací (2.1.2) tedy plyne, že $\hat{a}_i/\hat{a}_i^\dagger$ snižují/zvyšují energii o hodnotu ω_i.

U oscilátoru jsou snižující a zvyšující operátory obzvláště důležité, neboť jeho spektrum je generováno maximálně n elementárními energetickými rozdíly $\Delta_i = \omega_i$. Postupnou aplikací $\hat{a}_i/\hat{a}_i^\dagger$ pro různé ω_i na vakuum $|0\rangle$ skutečně **„navštívíme" všechny energetické hladiny**.

Dostupnost všech stavů v jedné energetické hladině opakovaným působením prvků z Lieovy algebry $\mathfrak{u}(n)$ degenerační grupy $U(n)$ je implikována ireducibilností této energetické hladiny. To je pravda i o multipletech libovolné algebry.[a]

[a]Ekvivalentně lze říci, že je-li $\mathcal{H}$ ireducibilní reprezentací $\mathfrak{g}$, pak pro každé dva vektory existuje prvek z $\mathcal{U}(\mathfrak{g})$, který jeden přenáši na druhý.

Jako na jisté zobecnění degenerační grupy na celé spektrum je tedy možné pohlížet na následující pojem.

Definice 2.1.3. (Algebra generující spektrum - SGA) Algebra generující spektrum, zkráceně SGA, je taková algebra, že Hilbertův prostor je její ireducibilní reprezentací.

Příklad 2.1.4. (SGA izotropního oscilátoru)

SGA izotropního oscilátoru je například Heisenberg-Weylova algebra $\mathfrak{hw}(n)$. Protože je

$$[\hat{u}_{ij}, \hat{a}_k] = -\delta_{ik}\hat{a}_j \ , \ [\hat{u}_{ij}, \hat{a}_k^\dagger] = \delta_{jk}\hat{a}_i^\dagger, \tag{2.1.3}$$

tak také $\mathfrak{u}(n) \ltimes \mathfrak{hw}(n)$ je SGA.[2]

Po vzoru komutačních relací (2.1.2) můžeme zkusit zvyšující a snižující operátory nalézt pro obecný systém jako řešení rovnice

$$[\hat{H}_i, \hat{K}] = \Delta_i \hat{K} \tag{2.1.4}$$

pro nějaká reálná čísla Δ_i, kde $\hat{H}_i$ jsou všechny prvky algebry komutujících integrálů pohybu Hamiltoniánu $\hat{H}$. Algebru komutujících integrálů pohybu označíme jako $\mathfrak{h}$. Obecné vlastnosti řešení rovnice (2.1.4) jsou:

[2]Algebra $\mathfrak{u}(n) \ltimes \mathfrak{hw}(n)$ je takzvaný polopřímý součin. Ten se vyznačuje tím, že jedna algebra působí na druhou skrze závorky, viz rovnice (2.1.3).

- Pokud $\hat{K}_1$ splňuje (2.1.4) s Δ_i^1 a $\hat{K}_2$ s Δ_i^2, pak

$$[\hat{H}_i, [\hat{K}_1, \hat{K}_2]] = -[\hat{K}_2, [\hat{H}_i, \hat{K}_1]] - [\hat{K}_1, [\hat{K}_2, \hat{H}_i]] = -\Delta_i^1[\hat{K}_2, \hat{K}_1] + \\ + \Delta_i^2[\hat{K}_1, \hat{K}_2] = (\Delta_i^1 + \Delta_i^2)[\hat{K}_1, \hat{K}_2].$$

  Řešení rovnice (2.1.4) se tedy uzavírají na Lieovu algebru, kterou pro nyní označme jako $\mathfrak{g}$.

- Adjunkcí vztahu (2.1.4) máme

$$[\hat{H}, \hat{K}^\dagger] = -\Delta \hat{K}^\dagger, \tag{2.1.5}$$

  a tedy je-li $\hat{K}$ s Δ řešením, pak je jím i $\hat{K}^\dagger$ s $-\Delta$. Operátor $\hat{K}$ pak značíme jako $\hat{K}^+$ a operátor $\hat{K}^\dagger$ jako $\hat{K}^-$.

- Ze vztahu výše máme, že $[\hat{K}^+, \hat{K}^-]$ komutuje se všemi intergrály pohybu. Jelikož sem počítáme i Hamiltonián[3], je $[\hat{K}^+, \hat{K}^-] \in \mathfrak{h}$.

V těchto vztazích poznáváme takzvaný **Cartanův rozklad polojednoduché Lieovy algebry $\mathfrak{g}$.**

Polojednoduchá Lieova algebra je Lieovou algebrou polojednoduché grupy. Je charakterizována svou dimenzí n, rankem l a takzvaným kořenovým systémem. Rank l označuje dimenzi takzvané **Cartanovy podalgebry $\mathfrak{h}$**, což je maximální komutatitivní podalgebra složená z diagonalizovatelných prvků.

Platí matematická věta, že pro obecnou polojednoduchou Lieovu algebru $\mathfrak{g}$ lze najít **Cartan-Weylovu bázi $\mathfrak{g}$** složenou z $\hat{H}_i \in \mathfrak{h}, i = 1, \dots, l$ a $\hat{K}^\alpha$, pro kterou platí komutační relace

$$\begin{aligned} [\hat{H}_i, \hat{H}_j] &= 0 & [\hat{K}^\alpha, \hat{K}^{-\alpha}] &= \alpha^i \hat{H}_i \\ [\hat{H}_i, \hat{K}^\alpha,] &= \alpha^i \hat{K}^\alpha & [\hat{K}^\alpha, \hat{K}^\beta] &= N_{\alpha,\beta} \hat{K}^{\alpha+\beta}\ , \ (\alpha \neq -\beta), \end{aligned}$$

kde číselný vektor $\alpha = (\alpha^1, \dots, \alpha^l)$ je takzvaný kořen a jejich sada tvoří zmíněný kořenový systém. Pro ten platí, že pokud je v něm α, pak je v něm i $-\alpha$, a prvky $\hat{K}^\alpha$ můžeme opět rozdělit na zvyšující a snižující operátory.

Fyzikálními úvahami výše jsme tedy odvodili to, že systém zvyšujících a snižujících operátorů a příslušných integrálů pohybu může tvořit nějakou polojednoduchou Lieovu algebru. Nalezená algebra pak velmi pravděpodobně může být SGA daného systému. Proto mají polojednoduché algebry ve fyzice přední postavení a někteří autoři s předpokladem polojednoduchosti uvažovaných grup implicité pracují.

[3]Nebo nějaký ekvivalent Hamiltoniánu, viz Keplerův problém a operátor $\hat{K}_3$ dále.

2.2 Dynamické grupy

Začněme rovnou s definicí. Důsledky a fyzikální motivaci budeme diskutovat v bodech dále.

Definice 2.2.1. (Dynamická grupa) Grupu G_D, jejíž je $\mathcal{H}$ ireducibilní reprezentací, nazveme dynamickou grupou.

Srovnáním dynamické grupy G_D s SGA máme:

- Reprezentace SGA se nemusí exponenciovat do reprezentace nějaké grupy.
- SGA nemusí být ani Lieova algebru. V úvahu přicházejí obecné asociativní algebry, superalgebry, gradované algebry v případě fermionových a bosonových systémů, apod..
- Dynamická algebra $\mathfrak{g}_D$ je speciálním případem SGA.
- Generátory dynamické grupy jsou na rozdíl od prvků SGA nutně Hermitovské a mohou s nimi být spojeny měřitelné veličiny.
- Počet generátoru je roven dimenzi G_D, a tedy je konečný.

Početní vlastnosti SGA jako Lieovy algebry a dynamické algebry jsou stejné. Dynamické grupě je ovšem připisován mnohem fundamentálnější význam, protože skrze ní zavádíme následující pojem.

Definice 2.2.2. (Kvantově mechanický systém/model) Kvantově mechanickým systémem či modelem nazveme trojici

$$(G_D, \mathcal{H}, \hat{H}),$$

kde G_D je dynamická grupa, $\mathcal{H}$ je její unitární ireducibilní reprezentace a $\hat{H}$ je Hamiltonián vyjádřený v generátorech G_D. Algebře $\mathfrak{g}_D$ říkáme algebra pozorovatelných. Při práci s kvantově mechanickým modelem vyžadujeme dodržování následujících pravidel.

1. Hermitovské prvky z $\mathcal{U}(\mathfrak{g}_D)$ nazýváme pozorovatelnými.
2. Komutátor dvou operátorů z $\mathcal{U}(\mathfrak{g}_D)$ uvažujeme jako komutátor v algebře, ne jako komutátor operátorů.

Ihned odtud plynou následující pozorování.

- Algebraické závorky $[-,-]$ jsou definované „globálně". To znamená, že v každé konkrétně zvolené ireducibilní reprezentaci G_D budou generátory G_D a potažmo prvky z $\mathcal{U}(\mathfrak{g}_D)$ splňovat stejné komutační relace.
- Celá informace o „dynamické struktuře" kvantově mechanického modelu je obsažena v dynamické grupě a $\mathcal{H}$ pouze vybírá konkrétní realizovanou reprezentaci.
- Podle Schurova lemmatu tvoří prvky z $\mathfrak{g}$ ireducibilní množinu operátorů, aneb definují na prostoru stavů $\mathcal{H}$ jakési „souřadnice".
- Vezmeme-li libovolný pevný nenulový vektor vakua $|0\rangle \in \mathcal{H}$, pak lze ke každému jinému vektoru $|\psi\rangle$ najít prvek $\hat{T} \in \mathcal{U}(\mathfrak{g}_D)$, že $\hat{T}\,|0\rangle = |\psi\rangle$.

Dynamická grupa a její zvolený multiplet má tedy za úkol **zachytit všechny fyzikální atributy** studovaného systému. Jak lze ale k dynamické grupě vůbec přijít ?

1. Pro existující Hamiltonián ji můžeme buďto **najít či vhodně zvolit**. To je případ Keplerova problému a harmonického oscilátoru.
2. Můžeme ji ale také **postulovat předem** za účelem vybudování nějaké teorie. To je případ IBM teorie nebo $SU(3)$ modelu (viz dále). Zkoumané Hamiltoniány pak konstruujeme pouze v generátorech G_D.

Navzdory tomu všemu ale musíme zdůraznit jeden bod:

Dynamická grupa není definicí (2.2.1) jednoznačně určena.

Zmínili jsme se o hledání dynamické grupy. Pro klasické systémy ale zjišťujeme, že již jednu dynamickou grupu, ač nepolojednoduchou, máme implicité zadanou. O té mluví následující příklad.

Příklad 2.2.3. (Heisenbergova grupa)

Klasické systémy na $L^2(\mathbb{R}^n)$ jsou vybaveny ireducibilní unitární reprezentací $2n+1$ rozměrné Heisenbergovy grupy H_n. Grupa H_n není polojednoduchá, nýbrž nilpotentní. Její algebra $\mathfrak{h}(n)$, takzvaná **Heisenbergova algebra**,[4] je generovaná

[4] Heisenbergova algebra je to samé jako Heisenberg-Weylova algebra $\mathfrak{hw}(n)$ zmíněná u LHO. Matematicky korektně je ale $\mathfrak{hw}(n)$ komplexifikací $\mathfrak{h}(n)$. Každopádně je ale $\mathfrak{hw}(n) \leq \mathcal{U}(\mathfrak{h}(n))$.

operátory polohy $\mathbf{q}$, hybnosti $\mathbf{p}$ a imaginární jednotkou i. Ty splňují komutační relace

$$[\hat{q}_i, i] = 0 \ , \ [\hat{p}_i, i] = 0 \ , \ [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0 \ , \ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \ , \ [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\delta_{ij}.$$

Grupa H_n nám poskytuje stavební prvky pro všechny pozorovatelné.

U klasických bezespinových systémů tedy vždy vycházíme z kvantově mechanického modelu

$$(H_n, L^2(\mathbb{R}^n), \hat{H}) \tag{2.2.1}$$

Dalším typickým kvantově mechanickým modelem je spin S, totiž trojice

$$(SU(2), D_S, \hat{H}_S),$$

kde D_S je $2S+1$ rozměrná reprezentace $SU(2)$ a $\hat{H}_S = \hat{H}(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$. Pro klasický Hamiltonián se spinem je kvantově mechanickým modelem[5]

$$(H_n \otimes SU(2), L^2(\mathbb{R}^3) \otimes D_S, \hat{H}).$$

Následují příklady LHO, Keplerova problému a IBM modelu. U prvních dvou z nich budeme výhodnou dynamickou algebru hledat vnořenou do $\mathcal{U}(\mathfrak{h}_n)$. To proto, že model (2.2.1) poskytuje přílišnou redundanci, neboť je koncipován pro popis všech klasických modelů, a pro konkrétní systémy není příliš užitečný. Bylo by výhodné nalézt polojednoduchou dynamickou grupu se snižujícími a zvyšujícími operátory.

Příklad 2.2.4. (Izotropní LHO)

V článku [3] je uvedeno, že standardní dynamickou grupou n rozměrného izotropního oscilátoru je

$$G_D = Sp(2n, \mathbb{R}) \ltimes W(n),$$

kde $W(n)$ je takzvaná Weylova grupa a $Sp(2n, \mathbb{R})$ je grupa kanonických transformací, takzvaná symplektická grupa. Matematicky je příslušná unitární reprezentace $Sp(2n, \mathbb{R}) \ltimes W(n)$ na $L^2(\mathbb{R}^n)$ zkonstruována v článku [4], ovšem to přesahuje rámec tohoto textu. Pro naše účely stačí to, že příslušnou Lieovu algebru lze generovat tak, že přidáme ke generátorům algebry $\mathfrak{sp}(2n, \mathbb{R})$ i prvky $\{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j, 1\}$. Ukažme si, jak celá situace vypadá.

[5]Symbolem $G_1 \otimes G_2$ myslíme to, že součin různých grup $G_1 \otimes G_2$ působí na $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ reprezentací $\rho_1 \otimes \rho_2$, což je tenzorový součin reprezentace ρ_1 grupy G_1 na $\mathcal{H}_1$ a reprezentace ρ_2 grupy G_2 na $\mathcal{H}_2$. Lieova algebra grupy $G_1 \times G_2$ je pak součtem $\mathfrak{g}_1 \oplus \mathfrak{g}_2$ a stejně tak je součtem $\mu_1 \otimes \mu_2 = \mu_1 \otimes I + I \otimes \mu_2$ i jejich reprezentace na $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

Generátory dynamické grupy v $\mathcal{U}(\mathfrak{h}(n))$ se realizují jako dvojkombinace anihilačních a kreačních operátorů, totiž prvky

$$\hat{u}_{ij} = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \ , \ \hat{s}_{ij}^+ = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \ , \ \hat{s}_{ij}^- = \hat{a}_i \hat{a}_j.$$

Alebra $\mathfrak{sp}(2n, \mathbb{R}) = \mathrm{span}\{\hat{u}_{ij}, \hat{s}_{ij}^\pm\}$ je polojednoduchá a má dimenzi $n(2n+1)$. Má následující strukturu podalgeber

$$\begin{array}{ccccc} \mathfrak{sp}(2n,\mathbb{R}) & \geq & \mathfrak{u}(n) & \geq & \mathfrak{so}(n) \\ \hat{s}_{ij}^-, \hat{s}_{ij}^+, \hat{u}_{ij} & & \hat{u}_{ij} & & \hat{L}_{ij} = i(\hat{u}_{ij} - \hat{u}_{ji}). \end{array}$$

Grupa $Sp(2n, \mathbb{R})$ tedy obsahuje geometrickou symetrii $SO(n)$ i degenerační grupu $U(n)$. Komutační relace generátorů $\mathfrak{sp}(2n, \mathbb{R})$ s Hamiltoniánem jsou

$$[\hat{H}, \hat{u}_{ij}] = 0 \ , \ [\hat{H}, \hat{s}_{ij}^+] = 2\omega \hat{s}_{ij}^+ \ , \ [\hat{H}, \hat{s}_{ij}^-] = -2\omega \hat{s}_{ij}^-.$$

Operátor $\hat{s}_{ij}^+$ excituje i-tý a j-tý oscilátor najednou a zvyšuje energii o 2ω. V energetické hladině, ke které takto z vakua dospějeme, se lze mezi všemi vlastními vektory dostat působením generátorů degenerační grupy $\mathfrak{u}(n)$. Problémem je, že operátory $\hat{s}_{ij}^+$ lze excitovat vždy jen páry jednorozměných oscilátorů a z vakua se tudíž působením pouze prvků $\mathfrak{sp}(2n, \mathbb{R})$ nemusíme dostat do všech energetických hladin. Například u jednorozměrného oscilátoru se základnímem stavem $|0\rangle$ je $\hat{s}^+ = \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger$, $\hat{s}^- = \hat{a}\hat{a}$ a vidíme, že spektrum $\{|n\rangle : n = 0, 1, 2, \ldots\}$ se rozpadá na dvě ireducibilní reprezentace $\mathfrak{sp}(2, \mathbb{R})$ generované vektory $|0\rangle$ a $|1\rangle$. Proto je také dynamická grupa zkonstruována ještě připojením $W(n)$.

Příklad 2.2.5. (Keplerův problém)

Společné vlastní vektory operátorů $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{L}_z$ a Hamiltoniánu $\hat{H}$ se sféricky symetrickým potenciálem můžeme psát jako $\psi_{nlm}(\mathbf{q}) = R_{nl}(r) Y_{lm}\left(\frac{\mathbf{q}}{r}\right)$, kde $R_{nl}(r)$ splňují radiální Schrödingerovu rovnici

$$\hat{S}^{rad} R_{nl}(r) = \left(-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r)\right) R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r).$$

Naším prvním cílem je tedy vyjádřit $\hat{S}^{rad}$ v prvcích nějaké algebry a převést problém určení spektra $\hat{H}$ do algebraické roviny.

Je jasné, že se musíme omezit na speciální tvary potenciálu $\hat{V}(r)$. Pro obvyklé potenciály je výhodné pracovat s algebrou $\mathfrak{so}(2,1)$, která se podle knihy [5] realizuje v diferenciálních operátorech jako

$$\begin{aligned}
\hat{K}_1 &= -\frac{1}{2\alpha^2} r^{2-\alpha} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{1}{\alpha^2} r^{1-\alpha} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{\beta}{2} r^{-\alpha} - \frac{1}{2} r^{\alpha} \\
\hat{K}_2 &= \frac{-i}{\alpha} r \frac{\partial}{\partial r} - i \\
\hat{K}_3 &= -\frac{1}{2\alpha^2} r^{2-\alpha} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{1}{\alpha^2} r^{1-\alpha} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{\beta}{2} r^{-\alpha} + \frac{1}{2} r^{\alpha}
\end{aligned}$$

pro $\alpha \in \mathbb{R}$ a $\beta \in \mathbb{C}$. S využitím $-i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} = \frac{1}{r}\hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$, $\left[r, -i\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{1}{r}\right)\right] = i$ a $\hat{L} = \hat{\mathbf{q}} \times \hat{\mathbf{p}}$, $\hat{\mathbf{L}}^2 = r^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - (\hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 + i \hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ lze toto přepsat do tvaru v $\hat{\mathbf{q}}$ a $\hat{\mathbf{p}}$ jako

$$\begin{aligned}
\hat{K}_1 &= \frac{1}{2\alpha^2} r^{2-\alpha} \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{1}{2\alpha^2} r^{-\alpha} \hat{\mathbf{L}}^2 + \frac{\beta}{2} r^{-\alpha} - \frac{1}{2} r^{\alpha} \\
\hat{K}_2 &= \frac{1}{\alpha} \hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{p}} - \frac{i}{2}\left(1 + \frac{1}{\alpha}\right) \\
\hat{K}_3 &= \frac{1}{2\alpha^2} r^{2-\alpha} \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{1}{2\alpha^2} r^{-\alpha} \hat{\mathbf{L}}^2 + \frac{\beta}{2} r^{-\alpha} + \frac{1}{2} r^{\alpha}.
\end{aligned}$$

S tím se nám lépe pracuje, neboť jsou $\hat{K}_i$ vyjádřené v generátorech grupy H_n. Operátory splňují komutační relace

$$[\hat{K}_1, \hat{K}_2] = -i\hat{K}_3 \ , \ [\hat{K}_3, \hat{K}_1] = i\hat{K}_2 \ , \ [\hat{K}_2, \hat{K}_3] = i\hat{K}_1.$$

Rank $\mathfrak{so}(2,1)$ je 1 a existuje jeden kvadratický Casimirův operátor

$$\hat{K}^2 = -\hat{K}_1^2 - \hat{K}_2^2 + \hat{K}_3^2.$$

Ve zdroji [5] je uvedeno, že v realizaci $\mathfrak{so}(2,1)$ výše je $\hat{K}^2 = \beta + \frac{1-\alpha^2}{4\alpha^2}$.

Grupa $SO(2,1)$ je polojednoduchá, ale nekompaktní, a její unitární reprezentace tudíž budou nekonečně rozměrné. Při jejich hledání se postupuje stejně jako například pro algebru $\mathfrak{so}(3)$, akorát místo $\hat{L}_z$ vezmeme $\hat{K}_3$ a místo $\hat{L}^{\pm}$ bude $\hat{K}^{\pm} = \hat{K}_1 \pm i\hat{K}_2$. Takto lze odvodit, že ireducibilní reprezentace $\mathcal{D}^+(k)$ grupy $SO(2,1)$ se spektrem $\hat{K}_3$ omezeným zespoda jsou určeny celočíselným $k > 0$, což je hodnota Casimirova operátoru $\hat{K}^2$, respektive $\hat{K}^2 = k(k-1)$. Dále z tohoto postupu plyne, že se multiplety skládají z vlastních vektorů $\hat{K}_3$ s vlastními čísly $q + k$ pro $q = 0, 1, 2, \ldots$, a že operátory $\hat{K}^{\pm}$ zvyšují/snižují q o 1 při pevném l.

Konkrétní radiální Schrödingerova rovnice Keplerova problému je

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{K}{r} - E\right) R(r) = 0 \tag{2.2.2}$$

Z předchozích obecných vztahů se pro Keplerův problém používá realizace $\mathfrak{so}(2,1)$ s $\beta = l(l+1)$ a $\alpha = 1$. Tedy $\hat{\mathbf{K}}^2 = l(l+1)$, $k = l+1$ a vlastní číslo q operátoru $\hat{K}_3$ je $q = k, k+1, \ldots$. Po dosazení dostáváme generátory

$$\begin{aligned}
\hat{K}_1 =& \frac{1}{2}(\hat{r}\hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{r}) = \frac{1}{2}\left(-r\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l(l+1)}{r} - r\right) \\
\hat{K}_2 =& \hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{p}} - i = i\left(-r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - 1\right) \\
\hat{K}_3 =& \frac{1}{2}(\hat{r}\hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{r}) = \frac{1}{2}\left(-r\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l(l+1)}{r} + r\right)
\end{aligned}$$

Vynásobením rovnice (2.2.2) zleva poloměrem r můžeme ekvivalentně psát

$$\left(\frac{1}{2}(\hat{K}_3 + \hat{K}_1) + E(\hat{K}_3 - \hat{K}_1) - K\right) R(r) = 0 \tag{2.2.3}$$

Tuto rovnici lze unitární transformací $\exp(-i\theta\hat{K}_2)$, kde $\tanh(\theta) = \frac{E+\frac{1}{2}}{E-\frac{1}{2}}$. převést na tvar

$$(\sqrt{-2E}\hat{K}_3 - K)\tilde{R}(r) = 0.$$

Z toho plyne to, že radiální část vlnové funkce lze hledat jako vlastní vektory operátoru $\hat{K}_3$, a že lze psát

$$\hat{H} = -\frac{K^2}{2\hat{K}_3^2}\ ,\ E_{nl} = -\frac{K^2}{2q^2}.$$

Srovnáním s dříve obdrženým vztahem pro energii musí být $q = n + l + 1$, $n = 0, 1, \ldots$, neboť spektrum se dosud provedenými operacemi muselo zachovat. Operátor $\hat{K}_3$ je někdy ekvivalentně brán jako náhrada $\hat{H}$, protože se jejich záměnou nic nezmění.[6]

[6] V klasické mechanice se $\hat{K}_3$ vyskytuje také. Říká se mu regularizovaný Keplerův problém

Dynamická grupa Keplerova problému musí obsahovat degenerační grupu $SO(4)$ a grupu $SO(2,1)$ generující řešení radiální Schrödingerovy rovnice. Podle článku [7] je vhodná dynamická grupa $SO(4,2)$, která má následující generátory

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{L}} &= \hat{\mathbf{q}} \times \hat{\mathbf{p}} & \hat{K}_1 &= \frac{1}{2}(\hat{r}\hat{p}^2 - \hat{r}) \\
\hat{\mathbf{N}} &= \frac{1}{2}\hat{\mathbf{q}}p^2 - \hat{\mathbf{p}}(\hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) - \frac{1}{2}\hat{\mathbf{q}} & \hat{K}_2 &= \hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{p}} - i \\
\hat{\mathbf{M}} &= \frac{1}{2}\hat{\mathbf{q}}p^2 - \hat{\mathbf{p}}(\hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{q}} & \hat{K}_3 &= \frac{1}{2}(\hat{r}\hat{p}^2 + \hat{r}) \\
\hat{\mathbf{\Gamma}} &= \hat{r}\hat{\mathbf{p}}.
\end{aligned}
$$

Runge-Lentzův vektor odpovídá prvku $\hat{\mathbf{N}}$, neboť ten komutuje s $\hat{K}_3$. Grupa $SO(4,2)$ je 15-ti rozměrná, ranku 3 a nazývá se konformní grupa Minkovského prostoročasu. Její netriviální komutační relace jsou:

$\mathfrak{so}(3,1)$

$\mathfrak{so}(3)$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$$

$$[\hat{M}_i, \hat{M}_j] = -i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k \qquad [\hat{L}_i, \hat{M}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{M}_k$$

$$[\hat{N}_i, \hat{N}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k \qquad [\hat{L}_i, \hat{N}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{N}_k$$

$\mathfrak{so}(4)$

$$[\hat{N}_i, \hat{M}_j] = i\delta_{ij}\hat{K}_2 \qquad [\hat{K}_2, \hat{N}_i] = -i\hat{M}_i \qquad [\hat{K}_2, \hat{M}_i] = i\hat{N}_i \qquad [\hat{K}_2, \hat{L}_i] = 0$$

$\mathfrak{so}(4,1)$

$$
\begin{aligned}
&[\hat{K}_3, \hat{M}_i] = -i\hat{\Gamma}_i \\
&[\hat{K}_1, \hat{N}_i] = i\hat{\Gamma}_i \\
&[\hat{\Gamma}_i, \hat{\Gamma}_j] = -i\varepsilon_{ijk}\hat{L}_i \\
&[\hat{\Gamma}_i, \hat{M}_j] = -i\hat{K}_3 \\
&[\hat{\Gamma}_i, \hat{N}_j] = -i\hat{K}_1 \\
&[\hat{\Gamma}_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{\Gamma}_k \\
&[\hat{K}_1, \hat{\Gamma}_i] = i\hat{N}_i \\
&[\hat{K}_3, \hat{\Gamma}_i] = i\hat{M}_i
\end{aligned}
$$

$\mathfrak{so}(2,1)$ $\quad [\hat{K}_1, \hat{K}_2] = -i\hat{K}_3 \quad [\hat{K}_2, \hat{K}_3] = i\hat{K}_1 \quad [\hat{K}_3, \hat{K}_1] = i\hat{K}_2$

Grupa $SO(4,2)$ má bohatou strukturu podgrup. Například degenerační grupu $SO(4)$, která je generovaná $\hat{\mathbf{L}}$ a $\hat{\mathbf{N}}$, $SO(2,1)$ generovaná $\hat{K}_i$ a $SO(4,1)$ generovaná $\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{N}}$, $\hat{\mathbf{M}}$ a $\hat{K}_2$.

Vázané stavy $|nlm\rangle$ Keplerova problému jsou skutečně ireducibilní reprezentací $SO(4,2)$. Kromě $\hat{K}^{\pm}$ měnící energii q při pevném l lze totiž vybrat vhodně prvky generované $\hat{L}, \hat{N}$ měnící l při pevném q.

Příklad 2.2.6. (Model interagujících bosonů)

Podle článku [11] je jednou z nejhezčích aplikací algebraické teorie model interagujících bosonů (IBM), který se používá k popisu rotací a vibrací atomového jádra. Dynamická grupa je definována jako $G_D = U(6)$. Grupa $U(6)$ se realizuje v bosonových anihilačních a kreačních operátorech $\{\hat{b}_i, \hat{b}_i^\dagger\}$ stejně jako u LHO. Je tedy

$$\mathcal{H} = \operatorname{span}\left\{\mathcal{N}_{i_1,\ldots,i_N}\hat{b}_{i_1}^\dagger\hat{b}_{i_2}^\dagger\ldots\hat{b}_{i_N}^\dagger\left|0\right\rangle : i_j \in \{1,\ldots,N\}\right\},$$

kde $\mathcal{N}_{i_1,\ldots,i_N}$ je normalizační konstanta.[7] Hamiltoniány se uvažují v obecném tvaru s jednočásticovou a dvoučásticovou interakcí

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\alpha,\beta}\epsilon_{\alpha,\beta}\hat{u}_{\alpha,\beta} + \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}\hat{u}_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}\hat{u}_{\alpha,\beta}\hat{u}_{\gamma,\delta}. \tag{2.2.4}$$

Požadavkem aby byl (2.2.4) hermitovský, požadavkem rotační invariance a dalšími omezeními z IBM teorie se tvar Hamiltoniánu dále specifikuje. Celkem zbude 7 volných parametrů IBM Hamiltoniánu, které určují jeho vlastnosti.

[7] Jedná se tedy o část $\mathcal{H}_S^N = Sym(\mathcal{H}_0^{\otimes N})$ symetrického Fokova prostoru s $\mathcal{H}_0 = \mathbb{C}^6$.

2.3 Problém kvantových čísel a kvantová integrabilita

Abychom mohli postoupit dále, je nutné pochopit následující pojem a jeho význam. Demonstruje také odlišnost v matematickém a fyzikálním chápání reprezentací.

Definice 2.3.1. (Úplný systém komutujících operátorů) Systém komutujících Hermitovských operátorů $\{\hat{K}_i : i = 1, \ldots, M\}$ nazveme úplným systémem komutujících operátorů, ÚSKO, jestliže společné vlastní hodnoty $(K_1, \ldots, K_M)$ jednoznačně označují bázi $\mathcal{H}$.

- Při řešení problému kvantových čísel hledáme takové ÚSKO, které algebraicky komutuje s Hamiltoniánem (Hamiltonián může být prvkem tohoto ÚSKO) a je složeno z pozorovatelných z $\mathcal{U}(\mathfrak{g}_D)$. Vlastní čísla $(K_1, \ldots, K_M)$ operátorů z ÚSKO jsou pak **dobrými kvantovými čísly**, která jednoznačně označují bázi stacionárních stavů.
- Kdybychom znali bázi stacionárních stavů $|\psi_i\rangle$, pak bychom mohli vzít operátor
$$\hat{K} = \sum_j j \, |\psi_j\rangle \langle\psi_j| \,,$$
který by byl sám o sobě ÚSKO komutujícím jako operátor na $\mathcal{H}$ s operátorem $\hat{H}$. Pro rozumné využití je tedy nutné hledat prvky ÚSKO již v algebře pozorovatelných s globálně platnými komutačními relacemi.
- Předchozí bod je v souladu s chápáním kvantového systému. Prostor $\mathcal{H}$ je prostorem dynamických stavů, který nahlížíme skrze algebru pozorovatelných. Uvažujeme tedy „kompatibilní“ v rámci algebry komutující pozorovatelné a potřebujeme jich takové množství, aby jejich souběžně naměřitelná vlastní čísla dávala o systému úplnou informaci. Vycházíme tedy z předpokladu, že dopředu neznáme konkrétní podobu reprezentace, a abychom mohli napsat matice příslušné operátorům z $\mathfrak{g}_D$ potřebujeme nejprve určit bázi $\mathcal{H}$, a to jakoby zevnitř algebry pozorovatelných.

Maximální počet algebraicky nezávislých a algebraicky komutujících integrálů pohybu Hamiltoniánu $\hat{H}$ je omezen vlastnostmi dynamické algebry $\mathfrak{g}_D$.

V teorii reprezentací se standardně volí báze multipletu $\mathcal{H}$ polojednoduché algebry $\mathfrak{g}_D$ dimenze n a ranku l jako báze složená ze společných vlastních vektorů komutujících hermitovský operátorů z l rozměrné Cartanovy podalgebry

$\mathfrak{h} \leq \mathfrak{g}_D$. Kvantovým číslům $(K_1, \ldots, K_l)$ se pak říká váhy. Pokud platí, že hodota $(K_1, \ldots, K_l)$ odpovídá jedinému vektoru, tvoří $\{\hat{K}_i\} \subset \mathfrak{h}$ ÚSKO. Pokud ne, pak podle zdrojů [6], [7] a [8] lze tuto množinu vždy na ÚSKO doplnit $\frac{1}{2}(n-3l)$ takzvanými Racahovými operátory z $\mathcal{U}(\mathfrak{g}_D)$. Celkem má tato ÚSKO tudíž

$$M_0 = \frac{n-l}{2} \tag{2.3.1}$$

prvků, což je zaručeno algebraicky. Tato ÚSKO tedy řeší vždy problém kvantových čísel, pokud je $\hat{H}$ funkcí pouze prvků z Cartanovy podalgebry a $\mathfrak{h}$ je pak jeho komutující množinou operátorů.

To ale není obyklé, a proto tento postup zobecňujeme rozkladem reprezentace G na podreprezentace vhodného řetězce jejích podgrup.

Definice 2.3.2. (Kanonický řetězec podgrup) Řetězec podgrup $G_0 = G_D \supset G_1 \supset \ldots \supset G_n$ je kanonický, jestliže platí:

1. Ireducibilní reprezentace $[\lambda]$ grupy G_i se vyskytuje v ireducibilní reprezentaci $[\mu]$ grupy G_{i-1} maximálně jednou pro všechny vyskytující se reprezentace $[\mu]$ a $[\lambda]$.
2. Grupa G_n je Abelovská.

- Je nám známo, že reprezentace grupy G_i se direktně rozkládá na multiplety její podgrupy G_{i+1}.
- První bod v definici pak zajišťuje, že postupujeme-li při rozkladu zleva doprava tak, že si v dosaženém multipletu typu $[\lambda_i]$ grupy G_i vybereme multiplet typu $[\lambda_{i+1}]$ grupy G_{i+1} a na něj postoupíme, bude mít posloupnost

  $$([\lambda_0], [\lambda_1], \ldots, [\lambda_n]) \tag{2.3.2}$$

  jednoznačné zakončení právě v jednom multipletu grupy G_n.
- Druhý bod v definici říká, že nejmenší multiplety G_n budou jednorozměrné paprsky.
- Nechť jsou všechny G_i polojednoduché ranku l_i a tudíž různé typy multipletů $[\lambda_i]$ grupy G_i číslují hodnoty l_i Casimirových operátorů $(C_i^1, \ldots, C_i^{l_i})$. Značku (2.3.2) číslující bázi $\mathcal{H}$ lze pak nahradit vektorem vlastních hodnot

  $$(C_1^1, \ldots, C_1^{l_1}, C_2^1, \ldots, C_2^{l_2}, \ldots, C_n^1, \ldots, C_n^{l_n}), \tag{2.3.3}$$

  které na daném vektoru nabývají Casimirovy operátory $\hat{C}_j^\alpha$.

Kanonický řetězec tedy dává přirozené ÚSKO

$$\{\hat{C}_1^\alpha\} \cup \{\hat{C}_2^\alpha\} \cup \ldots \cup \{\hat{C}_n^\alpha\} \tag{2.3.4}$$

vybírající některou bázi.

Pokud $\hat{H}$ se všemi $\hat{C}_i^j$ komutuje, speciálně je funkcí některých z nich, pak ÚSKO (2.3.4) kanonického řetězce řeší problém kvantových čísel.

Řetězec podgrup, který nesplňuje první podmínku definice (2.3.2) nazýváme **nekanonickým řetězcem**. Množina operátorů (2.3.4) pak sama o sobě ÚSKO tvořit nebude a bude tudíž existovat více vektorů označených jednou sadou čísel (2.3.3). Vzniká problém takzvaných **„missing labels“**.

Podle již citovaných zdrojů [6], [7] a [8] lze Casimirovy operátory (2.3.4) libovolného řetězce podgrup G_D vždy doplnit na ÚSKO a co víc, operátorů v ÚSKO bude opět M_0. ÚSKO nějakého řetězce podgrup lze tedy vždy volit ve tvaru

$$\{\hat{C}_1^\alpha\} \cup \{\hat{C}_2^\alpha\} \cup \ldots \cup \{\hat{C}_n^\alpha\} \cup \{\hat{J}_i\}, \tag{2.3.5}$$

kde $\{\hat{J}_i\}$ jsou nějaké operátory komutující s $\hat{C}_i^j$ takové, že doznačují případná „missing labels“. Aby tato ÚSKO řešila problém kvantových čísel, již nestačí, aby Hamiltonián komutoval se všemi $\hat{C}_j^\alpha$. Nic by pak totiž nezaručovalo, že by měl komutovat i s $\hat{J}_i$.

Speciálně když je Hamiltonián funkcí jen $\hat{C}_j^\alpha$, pak automaticky s $\hat{J}_i$ komutuje a ÚSKO nekanonického řetězce řeší problém kvantových čísel.

Zatím jsme vše uvažovali v algebraickém smyslu a přitom se na konkrétní reprezentaci může stát, že některé operátory v tomto M_0 prvkovém ÚSKO budou úplně degenerované. Když takové prvky z ÚSKO vypustíme, zbylé operátory ÚSKO zůstávají nadále. Pro kvantově mechanický model $(G_D, \mathcal{H}, \hat{H})$ lze číslem M označit počet úplně nedegenerovaných operátorů ÚSKO, který je nejmenší, bráno přes všechny ÚSKO příslušné všem možným řetězcům podgrup. Zřejmě bude platit

$$M \leq M_0.$$

Nyní můžeme přistoupit k novým pojmům.

Definice 2.3.3. (Kvantové stupně volnosti) Pro kvantově mechanický model $(G_D, \mathcal{H}, \hat{H})$ označme symbolem M nejmenší počet úplně nedegenerovaných operátorů v ÚSKO příslušných všem možným řetězcům podgrup. Pak M nazveme počtem kvantových stupňů volnosti.

Definice 2.3.4. (Kvantová integrabilita) Řekneme, že kvantově mechanický systém $(G_D, \mathcal{H}, \hat{H})$ je kvantově integrabilní, pokud existuje M algebraicky nezávislých algebraických integrálů pohybu $\hat{H}$.

Podle zdroje [7] lze M dobrých kvantových čísel integrálů pohybu integrabilního systému vždy doplnit na ÚSKO. Platí tedy:

Kvantově integrabilní systém $(G_D, \mathcal{H}, \hat{H})$ má ÚSKO jejímiž prvky je M integrálů pohybu s M dobrými kvantovými čísly.

Následují příklady na řetězce podgrup a označování stacionárních stavů dobrými kvantovými čísly, respektive na kvantovou integrabilitu.

Příklad 2.3.5. (Harmonický oscilátor)

Pro izotropní harmonický oscilátor ve třech rozměrech máme řetězec

$$\begin{array}{ccccccc} Sp(6,\mathbb{R}) \ltimes W(3) & \supset & U(3) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2). \\ & & \{\hat{N}\} & & \{\hat{\mathbf{L}}^2\} & & \{\hat{L}_z\} \\ & & \{q\} & & \{l\} & & \{m\} \end{array}$$

Casimirovy operátory dynamické grupy neuvažujeme, neboť jsou stejně na spektru konstantní. Tento řetězec obsahuje geometrickou $SO(3)$ symetrii a degenerační grupu $U(3)$. ÚSKO $\{\hat{N}, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z\}$ vybírá bázi stacionárních stavů $|nlm\rangle$, že

$$\hat{N}\,|nlm\rangle = q\,|nlm\rangle \ , \ \hat{\mathbf{L}}^2\,|nlm\rangle = l(l+1)\,|nlm\rangle \ , \ \hat{L}_z\,|nlm\rangle = m\,|nlm\rangle \,,$$

přičemž

$$\hat{H}\,|nlm\rangle = \omega\left(q + \frac{3}{2}\right)|nlm\rangle \,.$$

Izotropní LHO má 3 kvantové stupně volnosti a je integrabilní.

Lze volit ještě jiný řetězec takový, že část $U(3) \supset SO(3) \supset SO(2)$ řetězce výše nahradíme za $U(3) \supset U(1) \otimes U(1) \otimes U(1)$. Jednotlivé $U(1)$ jsou generovány operátory $\hat{N}_i$, že $\hat{N} = \sum_{i=1}^{3} \hat{N}_i$ a $\{\hat{N}_1, \hat{N}_2, \hat{N}_3\}$ tvoří druhé ÚSKO. Spektrum $\hat{H}$ včetně vlastních podprostorů zůstává stejné, jen jeho bázi nyní tvoří stavy $|n_1 n_2 n_3\rangle$, že

$$\hat{N}_i\,|n_1 n_2 n_3\rangle = n_i\,|n_1 n_2 n_3\rangle \ , \ \hat{H}\,|n_1 n_2 n_3\rangle = \omega\left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)|n_1 n_2 n_3\rangle \,.$$

Lze ověřit, že tyto jednotlivé operátory $\hat{N}_i$ s $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$ nekomutují, a že tudíž báze $|n_1 n_2 n_3\rangle$ nerespektuje $SO(3)$ symetrii.

Příklad 2.3.6. (Keplerův problém)

Pro číslování vázaných stacionárních stavů $|nlm\rangle$ Keplerova problému se používá řetězec

$$\begin{array}{ccccccc} SO(4,2) & \supset & SO(4)\otimes U(1) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) \\ \{\hat{C}_0^2, \hat{C}_0^3, \hat{C}_0^4\} & & \{\hat{\mathbf{L}}^2+\hat{\mathbf{N}}^2, \hat{\mathbf{N}}\cdot\hat{\mathbf{L}}, \hat{K}_3\} & & \{\hat{L}^2\} & & \{\hat{L}_z\} \\ \{-3,0,0\} & & \{q^2-1,0,q\} & & \{l\} & & \{m\} \end{array}$$

Protože $\hat{\mathbf{N}}$ odpovídá Runge-Lentzovu vektoru $\hat{\mathbf{A}}$, je ze vztahů odvozených v podkapitole (1.3) Casimirův operátor $\hat{\mathbf{N}}\cdot\hat{\mathbf{L}}$ nulový. Hodnota druhého Casimirova operátoru $SO(4)$ je $\hat{\mathbf{L}}^2+\hat{\mathbf{N}}^2=\hat{K}_3^2-1=q^2-1$. Efektivně tedy stačí jako ÚSKO použít sadu $\{\hat{K}_3, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z\}$, která na $|nlm\rangle$ působí jako

$$\hat{K}_3\,|nlm\rangle=(n+l+1)\,|nlm\rangle \ \ ,\ \hat{\mathbf{L}}^2\,|nlm\rangle=l(l+1)\,|nlm\rangle \ \ ,\ \hat{L}_z\,|nlm\rangle=m\,|nlm\rangle\,.$$

Keplerův problém má 3 stupně volnosti a je kvantově integrabilní.

Systematicky je algebraická struktura nejenom vázaného, ale i spojitého spektra Keplerova problému popsána v článku [16]. V knize [2] je pak ukázáno, jak lze Keplerův problém separovat ještě v parabolických souřadnicích a dospět k ÚSKO $\{\hat{K}_3, \hat{L}_3, \hat{N}_3\}$. To by v našem formalizmu odpovídalo změně řetězce od $SO(4)\otimes U(1)$ doprava na $SO(4)\otimes U(1)\supset SO(2)\otimes SO(2)$, kde $SO(2)\otimes SO(2)\subset SO(4)$. Spektrum Hamiltoniánu včetně vlastních podprostorů by bylo samozřejmě stejné, jen nová báze by nerespektovala $SO(3)$ symetrii.

Příklad 2.3.7. (Částice se spinem)

V případě částice se spinem S čísluje kanonický řetězec $SU(2)\supset U(1)$ bázi $|SM_S\rangle$ prostoru D_S. Řetězec můžeme popsat jako

$$\begin{array}{ccc} SU(2) & \supset & U(1) \\ \{S\} & & \{M_S\}. \end{array}$$

a větvící pravidla[8] jsou $D_S=\bigoplus_{M_S=-S}^{S}\mathrm{span}\{|SM_S\rangle\}$. Pro dvě částice se spinem máme dva neekvivalentní kanonické řetězce

$$\begin{array}{cccc} I: & SU(2)\otimes SU(2) & \supset & SO(2)\otimes SO(2) \\ & \{S^{(1)},\, S^{(2)}\} & & \{M_{S^{(1)}},\, M_{S^{(2)}}\} \end{array}$$

[8]To je termín používaný pro rozklad reprezentace grup na její podgrupy.

$$
\begin{array}{lcccc}
II: & SU(2) \otimes SU(2) & \supset & SU(2) & \supset & SO(2). \\
 & \{S^{(1)},\, S^{(2)}\} & & \{S\} & & \{M_S\}
\end{array}
$$

Řetězec I odpovídá standardnímu rozkladu $D_{S^{(1)}} \otimes D_{S^{(2)}}$ na bázi vlastních vektorů $\hat{S}_z^{(1)}$ a $\hat{S}_z^{(2)}$ z Cartanovy podalgebry $\mathfrak{so}(2) \oplus \mathfrak{so}(2)$. V tomto případě je multiplicita každé váhy $(M_{S^{(1)}}, M_{S^{(2)}})$ jedna a řetězec je skutečně kanonický s bází

$$
\left| S^{(1)} S^{(2)} M_{S^{(1)}} M_{S^{(2)}} \right\rangle . \tag{2.3.6}
$$

Řetězec II odpovídá vnoření $SU(2)$ do $SU(2) \otimes SU(2)$ skrze celkový spin $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{(1)} + \hat{\mathbf{S}}^{(2)}$. Jedná se o kanonický řetězec. Větvící pravidla jsou známá

$$
D_{S^{(1)}} \otimes D_{S^{(2)}} = \bigoplus_{S=|S^{(1)}-S^{(2)}|}^{S^{(1)}+S^{(2)}} D_S
$$

a báze je očíslována jako

$$
\left| S^{(1)} S^{(2)} S M_S \right\rangle . \tag{2.3.7}
$$

Obě neekvivalentní báze (2.3.6) a (2.3.7) spojují Clebsch-Gordanovy koeficienty, které lze též získat z algebraické teorie.

Řetězec II použijeme například pro Hamiltoniány $\hat{H}_S = \lambda \mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}$ a řetězec I pak pro $\hat{H}_S = \hat{H}_S(\hat{S}_z^{(1)}, \hat{S}_z^{(2)})$.

Příklad 2.3.8. ($SU(3)$ model)

V částicové fyzice je dobře známý $SU(3)$ model pro klasifikaci baryonů a mezonů. Grupa $SU(3)$ má dimenzi 8 a rank 2. Počet stupňů volnosti je tudíž 3. V analogií s Pauliho maticemi pro $\mathfrak{su}(2)$ je $\mathfrak{su}(3)$ generována prvky $-\frac{1}{2}i\lambda_j$, $j = 1, \ldots, 8$, kde λ_i jsou hermitovské Gell-Mannovy matice

$$
\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
$$

$$
\lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ \lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}
$$

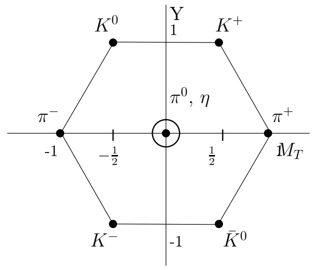
$$
\lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \ \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.
$$

Cartanova algebra je tvořena prvky λ_3 a λ_8, ve fyzice ale spíše isospinem $\hat{T}_3 = \frac{1}{2}\lambda_3$ a hypernábojem $\hat{Y} = \frac{1}{\sqrt{3}}\lambda_8$. Casimirovy operátory $\mathfrak{su}(3)$ nás příliš nezajímají, neboť většinou pracujeme jen s několika málo jejími ireducibilními reprezentacemi, které značíme nejvyšší vahou (λ, μ), blíže viz [9]. První nalezeným řetězcem podgrup grupy $SU(3)$ je tedy

$$\begin{array}{llc} I: & SU(3) & \supset U(1) \otimes U(1) \\ & (\lambda, \mu) & \{Y, M_T\} \end{array}$$

poskytující vlastní vektory $|\alpha Y M_T\rangle$, kde α je nějaký „missing label“.

Konkrétní ireducibilní reprezentaci znázorňujeme v (M_T, Y) grafu, ve kterém kolečky značíme multiplicitu stavu $|\alpha Y M_T\rangle$. Žádné kolečko znamená, že se $|\alpha Y M_T\rangle$ v reprezentaci nevyskytuje. Obecně platí, že váhy na kontuře vzniknuvšího obrazce mají multiplicitu 1 a s každou další obsazenou vrstvou blíže ke středu $(M_T, Y) = (0, 0)$ se multiplicita stavů $|\alpha Y M_T\rangle$ v této vrstvě zvyšuje o 1. Je je tedy jasné, že řetězec I není pro dimenzi reprezentace větší než tři kanonický a že je třeba dalšího identifikátoru. Proto se používá kanonický řetězec



Obrázek 2: Mezonový oktet. Částice π^0 má $T = 1$ a částice η má $T = 0$.

$$\begin{array}{lccccc} II: & SU(3) & \supset & U(1) \otimes SU(2) & \supset & SO(2). \\ & (\lambda, \mu) & & \{Y, T\} & & \{M_T\} \end{array}$$

Novým kvantovým číslem je celkový spin T nahrazující α a stavy označujeme $|T Y M_T\rangle$. Jak zavedení T řeší situaci s vícenásobnou multiplicitou je patrné z obrázku mezonového oktetu, tj. osmirozměrné ireducibilní reprezentace. Jako třetí bázi můžeme zvolit

$$\begin{array}{lccccc} III: & SU(3) & \supset & SU(2) & \supset & SO(2) \\ & (\lambda, \mu) & & \{T\} & & \{M_T\}. \end{array}$$

Ta je ovšem také nekanonická, neboť například K^0 a K^-, resp. K^+ a $\bar{K}^0$ mají stejné T a M_T ale $Y = 1$ u K^0 a K^+, zatímco $Y = -1$ u $\bar{K}^0$ a K^-. O vnoření $SU_{n+m} \supset SU(n) \otimes SU(m)$ se lze blíže dozvědět v knize [10] a o $SU(3)$ modelu konkrétně v knize [9].

Příklad 2.3.9. (Volná částice)

Dynamická grupa volné částice v $\mathbb{R}^n$ je H_n a integrály pohybu hledáme v $\mathcal{U}(\mathfrak{h}(n))$. Komutující množina z $\mathcal{U}(\mathfrak{h}(n))$ by měla mít (vycházeje z analogie v klasické mechanice) velikost maximálně n. Počet stupňů volnosti je tedy $M = n$ a volná částice je integrabilní, neboť s jejím Hamiltoniánem komutuje n složek hybnosti. Vlastní vektory jsou $|\mathbf{p}\rangle$ a je

$$\hat{p}_i\,|\mathbf{p}\rangle = p_i\,|\mathbf{p}\rangle \ \ , \ \ \hat{H}\,|\mathbf{p}\rangle = \frac{p^2}{2}\,|\mathbf{p}\rangle \, .$$

2.4 Dynamická symetrie

Dynamická symetrie ve slibovaném moderním pojetí je speciální situací, která na první pohled s klasickou představou symetrie jako transformace, při jejímž působení se něco nemění nesouvisí. Formalismus kvantově mechanického modelu však na dynamickou symetrii přímo navádí.

Definice 2.4.1. (Dynamická symetrie) Řekneme, že kvantově mechanický systém $(G_D, \mathcal{H}, \hat{H})$ má dynamickou symetrii, pokud existuje řetězec podgrup

$$G_D \supset G_1 \supset \ldots \supset G_n$$

takový, že Hamiltonián lze zapsat jako

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{C}_1^\alpha, \ldots, \hat{C}_n^\alpha),$$

kde $\hat{C}_i^\alpha$ jsou Casimirovy operátory grupy G_i.

- Grupou **invariantní symetrie** (ne nutně degenerační grupou) je ta nejmenší podgrupa G_i, na jejichž Casimirových operátorech Hamiltonián netriviálně závisí.
- ÚSKO řetězce podgrup určuje bázi stavů v $\mathcal{H}$ jako

  $$|\mathbf{C}\rangle = |\{C_1^\alpha\}, \{C_2^\alpha\}, \ldots, \{C_n^\alpha\}\rangle\,.$$

  Hamiltoniány $\hat{H}_1$ a $\hat{H}_2$ s dynamickou symetrií vzhledem k témuž řetězci pak mají stejné vlastní vektory lišící se jen energií

  $$\hat{H}_1\,|\mathbf{C}\rangle = E_1(\mathbf{C})\,|\mathbf{C}\rangle\ \ ,\ \ \hat{H}_2\,|\mathbf{C}\rangle = E_2(\mathbf{C})\,|\mathbf{C}\rangle\,.$$

  Téty vlastnosti říkáme, že $\hat{H}_1$ a $\hat{H}_2$ jsou **stejně analyticky řešitelné**.
- Definice zobecňuje „dynamickou symetrii“ ve smyslu vyšší symetrie Keplerova problému a izotropního LHO, neboť jak Hamiltonián Keplerova problému, tak Hamiltonián LHO jsou vyjádřeny v Casimirových operátorech svých degeneračních grup.

Je výhodné celou situaci uvažovat z pohledu takzvaného **dynamického narušení symetrie**. Vezměmě například Hamiltonián $\hat{H}_1$, který lze zapsat v Casimirových operátorech G_1, speciálně je vůči G_1 symetrický. Dále uvažme Hamiltonián

$$\hat{H}_2 = \hat{H}_1 + \alpha\hat{C}$$

invariantní vůči $G_2 \subset G_1$, kde $\hat{C}$ je Casimirův operátor G_2. Hamiltonián $\hat{H}_2$ již není invariantní vůči G_1, ale má dynamickou symetrii řetězce $G_1 \supset G_2$. Jaké výhodné skutečnosti tento fakt implikuje ?

- Energetické hladiny $\hat{H}_1$ jsou poskládány z ireducibilních reprezentací $[\alpha]$ grupy G_1. Díky tomu, že G_2 je podgrupa G_1, tak se tyto reprezentace rozpadají na reprezentace $[\beta]$ grupy G_2. Protože $\hat{H}_1$ je vůči G_2 též symetrický, tak lze vlastní vektory $\hat{H}_1$ volit vzhledem ke G_2 jako $|\nu[\alpha][\beta]\rangle$, kde ν jsou nějaká další kvantová čísla. Původní vlastní vektory $|\nu[\alpha][\beta]\rangle$ Hamiltoniánu $\hat{H}_1$ s energií $E^{(1)}([\alpha])$ **zůstávají vlastními vektory** $\hat{H}_2$, pouze s jinou energií $E^{(2)}([\alpha],[\beta])$.

- Energie $E^{(2)}([\alpha],[\beta])$ a $E^{(1)}([\alpha])$ se liší jen o hodnotu $\hat{C}$, která závisí jen na $[\beta]$. Dynamické narušení symetrie tedy sejme G_1-degeneraci spektra $\hat{H}_1$, ovšem **energetické hladiny se štěpí kontrolovaně**.

Důležitým důsledkem existence dynamické symetrie je následující věta.

Věta 2.4.2. (Dynamická symetrie implikuje integrabilitu) Má-li systém $(G_D, \mathcal{H}, \hat{H})$ dynamickou symetrii, pak je kvantově integrabilní. Dynamické narušení symetrie zachovává kvantovou integrabilitu.

Důkaz : Navažme na úvahy v předchozí kapitole ohledné ÚSKO z Casimirových operátorů řetězce podgrup. Je-li řetězec, vůči němuž má systém dynamickou symetrii, kanonický, pak ÚSKO tvoří přímo operátory (2.3.3). Je-li řetězec nekanonický, pak ÚSKO (2.3.5) obsahuje navíc $\{\hat{J}_i\}$, které se všemi $\hat{C}_i$ komutuje, ale kvůli $\hat{H} = \hat{H}(\hat{C}^\alpha_m, \ldots, \hat{C}^\alpha_1)$ komutuje i s $\hat{H}$. Podle definice kvantových stupňů volnosti je počet nedegenerovaných prvků v těchto ÚSKO větší nebo roven M a speciálně z nich lze vybrat M komutujících integrálů pohybu. □

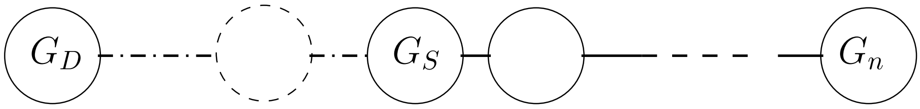
Jsou známy příklady kvantově integrabilních systémů bez dynamické symetrie.

Uvažme obecný kvantově mechanický systém $(G_D, \mathcal{H}, \hat{H})$ s M stupni volnosti. Obvykle zkoumáme systémy s nějakou **předepsanou grupou geometrické symetrie** G_S. Tedy

- Všechny Hamiltoniány jsou vůči G_S invariantní.

- Všechny řetězce podgrup volíme tak, aby procházely G_S.

r



Obrázek 3: Předepsaná geometrická symetrie G_S.

Klasifikací řetězců mezi G_D a G_S pak můžeme nalézt systémy s dynamickou symetrií, které jsou invariantní vzhledem ke G_S. Počet stupňů volnosti nám ale omezuje počet nedegenerovaných Casimirových operátorů vyšších grup symetrie.

Pro sféricky symetrické potenciály máme neekvivalentní řetězce Keplerova problému a LHO

$$\left.\begin{array}{ccc} Sp(6,\mathbb{R}) \rtimes W(3) & \supset & U(3) \\ SO(4,2) & \supset & SO(4) \end{array}\right\} \supset SO(3) \supset SO(2)$$

Příklady na dynamickou symetrii lze z těchto řetězců konstruovat snadno a nemá smysl je rozebírat. Místo toho uveďme příklady jiné.

Příklad 2.4.3. (Dynamické symetrie IBM modelu)

V modelu IBM se používají následující tři neekvivalentní řetězce

$$U(6) \supset \left\{\begin{array}{ccc} U(5) & \supset & O(5) \\ O(6) & \supset & O(5) \\ SU(3) & & \end{array}\right\} \supset SO(3) \supset SO(2)$$

Hamiltoniány s dynamickou symetrií se tedy dělí na tři typy. Díky tomu, že máme stejnou dynamickou grupu, můžeme tvořit Hamiltoniány závislé na prvcích z různých řetězců, takzvané přechodové systémy. Vše závisí na volbě zmíněných sedmi paramtetrů, viz příklad (2.2.6). Blíže o IBM modelu viz článek [11].

Příklad 2.4.4. (n rozměrný systém)

Mějme libovolný Hamiltonián $\hat{H}$ na $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$. Vzhledem k vlastní bázi $|\psi_i\rangle \langle\psi_j|$ Hamiltoniánu $\hat{H}$ uvažme definující reprezentaci $U(n)$. Potom je $G_D = U(n)$. Uvažme projekční operátory $\hat{P}_{ij} = |\psi_i\rangle \langle\psi_j|$ na vlastní stavy $\hat{H}$, které zřejmě tvoří bázi $\mathfrak{u}(n)$. Hermitovské operátory

$$\hat{C}_k = \hat{P}_{11} + \hat{P}_{22} + \ldots + \hat{P}_{kk}$$

reprezentují nějaké Casimirovy operátory podgrup $U(k)$ grupy $U(n)$. To proto, že

$$\hat{C}_k \hat{P}_{ij} = \begin{cases} 0 & i > k \\ \hat{P}_{ij} & i \leq k \end{cases}, \quad \hat{P}_{ij} \hat{C}_k = \begin{cases} 0 & j > k \\ \hat{P}_{ij} & j \leq k \end{cases}$$

a tedy $\hat{C}_k$ komutuje se všemi $\hat{P}_{ij},\ i, j \leq k$, což jsou generátory $U(k)$.

Dostáváme řetězec podgrup

$$\begin{array}{ccccccc} U(n) & \supset & U(n-1) & \supset & \dots & \supset & U(1) \\ \{C_n\} & & \{C_{n-1}\} & & & & \{C_1\}. \end{array}$$

Ten je očividně kanonický, což můžeme přímo ověřit.

Operátor $\hat{C}_k$ je nulový na $|\psi_i\rangle$ pro $i = k+1, \dots, n$ a roven jedné na $|\psi_i\rangle$ pro $i = 1, \dots, k$. Stav $|\psi_i\rangle$ je tedy jediný takový, že $(C_{n-1}, C_{n-2}, \dots, C_1) = (1, 1, 1, \dots, 1, 0, 0, 0,)$, kde poslední jednička je na k-té pozici zleva. Hamiltonián lze zapsat jako

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_{i=1}^{n} E_i \hat{P}_{ii} = E_1 C_1 + E_2 (C_2 - C_1) + E_3 (C_3 - C_2) + \dots + E_n (C_n - C_{n-1}) = \\ = (E_1 - E_2) C_1 + (E_2 - E_3) C_2 + \dots + (E_{n-1} - E_n) C_{n-1} + E_n. \end{aligned}$$

Je tedy vyjádřen v prvcích $\hat{C}_i,\ i = 1, \dots, n-1$ a podle definice (2.4.1) má dynamickou symetrii vzhledem k řetězci výše. Při správné volbě vnoření podgrup $U(k)$ do $U(n)$ lze dosáhnout i toho, že tento řetězec obsahuje libovolnou grupu symetrie, neboť ta se projevuje rovností nějakých dvou energetických hladin, a tedy možností jejich $U(2)$ promíchání.

Pracovali jsme s libovolným Hamiltoniánen a ukázali jsme tedy, že s dynamickou grupou $U(n)$ by byl každý takový Hamiltonián integrabilní.

Z toho vidíme, jak hodně integrabilita závisí na zvolené dynamické grupě. Každý Hamiltonián, jakožto operátor na $\mathbb{C}^n$, má podle výše uvedené dynamickou symetrie na řetězec $U(k+1) \supset U(k)$. Tento výsledek se ovšem týká umělého systému s dynamickou grupou $U(n)$.

3. Širší souvislosti

V kvantové mechanice je patrné odcizení pojmů dynamická grupa či dynamická symetrie od významu symetrie jako transformace, která zachovává nějaký objekt. Účelem této kapitoly je naznačit, že lze hledat jisté analogie v klasické mechanice, které by s těmito pojmy mohly souviset.

- V **první** podkapitole zmíníme kvantově mechanické integrály pohybu závislé na čase, kteréžto jsou někdy spojovány s generátory dynamické grupy. S těmi jsou spojeny časově závislé symetrie časové Schrödingerovy rovnice, které by mohly dát dynamickým grupám standardní význam symetrií jako transformacím přenášejícím mezi sebou řešení evolučních rovnic.
- **Druhá** podkapitola je úvahová a zamyslíme se nad tím, co by mohlo být analogií dynamického narušení symetrie v klasické mechanice.

3.1 Integrály pohybu závislé explicitně na čase

Vezměme operátor $\hat{K} = \hat{K}(\hat{T}_1, \dots, \hat{T}_n)$ zapsaný v generátorech $\hat{T}_i$ dynamické grupy G_D. Pro jeho časový vývoj v Heisenbergově obraze můžeme psát

$$\begin{aligned}\hat{K}(t) =& e^{it\hat{H}}\hat{K}(\hat{T}_1, \dots, \hat{T}_n)e^{-it\hat{H}} = \hat{K}(e^{it\hat{H}}\hat{T}_1 e^{-it\hat{H}}, \dots, e^{it\hat{H}}\hat{T}_n e^{-it\hat{H}}) = \\ =& \hat{K}(\hat{T}_1(t), \dots, \hat{T}_n(t)).\end{aligned}$$

Operátor $\hat{K}(t)$ vykazuje **explicitní závislost na čase**, pokud

$$\hat{K}(t) = \hat{K}(\hat{T}_1(t), \dots, \hat{T}_n(t), t) = \hat{K}_t((\hat{T}_1(t), \dots, \hat{T}_n(t)),$$

neboli $\hat{K}(t) = \hat{U}_t^\dagger \hat{K}_t(\hat{T}_1, \dots, \hat{T}_n)\hat{U}_t$. Formální závislost $\hat{K}_t$ na generátorech dynamické grupy se tudíž také mění s časem.

- Všimněme si, že časový vývoj kvantově mechanického systému je pouze změnou reprezentace $\mathfrak{g}_D$ z $\hat{T}_i$ na unitárně ekvivalentní reprezentaci $\mathfrak{g}_D$ operátory $\hat{T}_i(t)$.
- Explicitní závislost generátorů na čase naopak znamená, že se s časem vyvíjí i dynamická algebra, tedy $\mathfrak{g}_D \to (\mathfrak{g}_D)_t$. To můžeme chápat jako jistou deformaci této algebry.
- S použitím řetízkového pravidla a Heisenbergovy evoluční rovnice dostaneme
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{K}(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{K}_t + \frac{\partial \hat{K}}{\partial t} = i[\hat{H}, \hat{K}(t)] + \frac{\partial \hat{K}}{\partial t}(t).$$

Následující věta spojuje integrály pohybu definované výše s časem se zachovávajícími veličinami.

Věta 3.1.1. (Teorém Emmy Noetherové v kvantově mech. verzi)
Pro obecný časově závislý operátor $\hat{K}_t\,, \hat{K}_0 = \hat{K}$ platí

$$\langle\psi|_t\, \hat{K}_t \,|\psi\rangle_t = \langle\psi|\, \hat{K} \,|\psi\rangle \quad\Leftrightarrow\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{K}(t) = 0 \quad\Leftrightarrow\quad i[\hat{H}, \hat{K}_t] + \frac{\partial \hat{K}_t}{\partial t} = 0. \quad (3.1.1)$$

Slovy: střední hodnota $\hat{K}_t$ se s časem nemění podél časového vývoje každého $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, právě když $\hat{K}(t) = \hat{K}(0)$, právě když je splněna poslední rovnice. Operátor $\hat{K}_t$ nazveme **časově závislý integrál pohybu.**

- Pro závorku $[\hat{K}_t, \hat{G}_t]$ dvou časově závislých integrálů pohybu dostaneme

$$\begin{aligned} i[\hat{H}, [\hat{K}_t, \hat{G}_t]] &= - i[\hat{G}_t, [\hat{H}, \hat{K}_t]] - i[\hat{K}_t, [\hat{G}_t, \hat{H}]] = [\hat{G}_t, \frac{\partial \hat{K}_t}{\partial t}] + [\frac{\partial \hat{G}_t}{\partial t}, \hat{K}_t] \\ &= - \frac{\partial}{\partial t}[\hat{K}_t, \hat{G}_t]. \end{aligned}$$

  Časově závislé integrály pohybu se tedy **uzavírají v Lieovu algebru**.

- Operátor $\hat{K}_t$ je časově závislým integrálem pohybu, **právě když** přenáší každé řešení $|\psi\rangle_t$ Schrödingerovy rovnice na jiné její řešení. Je totiž

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{K}_t \, |\psi\rangle_t = \left(i\frac{\partial \hat{K}_t}{\partial t} + \hat{K}_t\hat{H} \right) |\psi\rangle_t = \left([\hat{H}, \hat{K}_t] + \hat{K}_t\hat{H} \right) |\psi\rangle_t = \hat{H}\hat{K}_t \, |\psi\rangle_t \, .$$

  Uvážením časově závislých integrálů pohybu se tudíž navracíme zpět k původnímu smyslu symetrií v Lieově teorii.

Otázka 1: Existují časově nezávislé generátory symetrií evoluční rovnice, které nejsou invariantními symetriemi ?

- V **kvantové mechanice ne**. Z podkapitoly (1.1) víme, že „býti časově nezávislou invariantní symetrií“ je ekvivalentní „býti časově nezávislou symetrií Schrödingerovy rovnice“. Při použití operátoru časového vývoje můžeme toto zapsat jako ekvivalenci

$$[\hat{H}, \hat{K}] = 0 \;\Leftrightarrow\; \hat{V}_s\hat{U}_t\hat{V}_s^\dagger = \hat{U}_t \quad , \text{ pro vsechna } t \text{ a } s,$$

  kde $\hat{V}_s = \exp(-is\hat{K})$.

- V **klasické mechanice ano**. Lze ukázat, že podmínka toho, aby transformace generovaná funkcí F na fázovém prostoru přenášela řešení Hamiltonových rovnic, je $\{F, H\} = C$, kde C je konstanta.[9] Invariantní, energii zachovávající transformace přitom musejí splňovat $\{F, H\} = 0$.

Příklad 3.1.2. (Jednorozměrný oscilátor klasicky)

Pro jednorozměrný LHO je $H = \frac{\omega}{2}(q^2 + p^2)$. Vyřešíme-li rovnici

$$C = \{F, H\} = \frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} = \omega p\frac{\partial F}{\partial q} - \omega q\frac{\partial F}{\partial p},$$

[9] Přenášení řešení Hamiltonových rovnic transformací generovanou F je ekvivalentní tomu, že $[X_F, X_H] = 0$, kde X_H a X_F jsou takzvaná Hamiltonovská vektorová pole příslušná H a F.

dostaneme

$$F(q,p) = \frac{C}{\omega}\mathrm{atg}\left(\frac{q}{p}\right) \ , \ G(q,p) = \frac{\omega}{2}(q^2+p^2).$$

Funkce F generuje jednoparametrické grupy symetrií označené parametrem s.[10] Pro pevné s je změna enegie

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}s} = \{F, H\} = C \ , \ \Delta E = \Delta s.$$

Graficky celá situace vypadá tak, že trajektorie ve fázovém prostoru $\mathbb{R}^2$ jsou kružnice s poloměrem určeným energií. Jediné integrály pohybu, tj. funkce konstantní podél kružnic, jsou již z geometrického pohledu funkce závisející na poloměru, tj. na energii. Pole X_F je normálou ke kružnicím a příslušná transformace zvětšuje/zmenšuje poloměr.

Víme, že kvantová mechanika uvažuje vektory z $\mathcal{H}$ „až na fázi“. Zkusíme tedy prozkoumat jednoparametrické grupy unitárních operátorů $\hat{V}_s = \exp(-is\hat{K})$, které splňují obecnější předpis

$$\hat{V}_s\hat{U}_t\hat{V}_s^\dagger = e^{istC}\hat{U}_t, \tag{3.1.2}$$

kde C je konstanta. Derivací tohoto vztahu podle t máme

$$-i\hat{V}_s\hat{H}\hat{U}_t\hat{V}_s^\dagger = isCe^{istC}\hat{U}_t - ie^{istC}\hat{H}\hat{U}_t. \tag{3.1.3}$$

Odtud pro $t \to 0$ dostáváme předně

$$\hat{V}_s\hat{H}\hat{V}_s^\dagger = -sC + \hat{H} \Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{V}_s] = sC\hat{V}_s. \tag{3.1.4}$$

Derivací (3.1.3) podle s dostaneme

$$-\hat{V}_s\hat{K}\hat{H}\hat{U}_t\hat{V}_s^\dagger + \hat{V}_s\hat{U}_t\hat{H}\hat{K}\hat{V}_s^\dagger = iCe^{istC}\hat{U}_t - stCe^{istC}\hat{U}_t + tCe^{istC}\hat{H}\hat{U}_t,$$

odkud máme limitou $(s,t) \to (0,0)$ komutační relaci

$$[\hat{H}, \hat{K}] = iC. \tag{3.1.5}$$

Infinitezimální generátory operátorů splňujících zobecněný transformační vztah (3.1.2) tedy splňují komutační relaci (3.1.5), která odpovídá případu $\{K, H\} = C$. Pro vlastní vektor $|\varphi\rangle$, že $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ dostáváme díky vztahu (3.1.4)

$$\hat{H}\hat{V}_s|\varphi\rangle = ([\hat{H}, \hat{V}_s] + \hat{V}_s\hat{H})|\varphi\rangle = Cs\hat{V}_s|\varphi\rangle + E\hat{V}_s|\varphi\rangle = (E+sC)|\varphi\rangle,$$

[10] Takzvaný tok φ_s pole X_F.

tedy $\hat{V}_s$ přenáší stacionární stav s energií E a na stacionární stav s energií $E+sC$.

Nejsou tedy tyto speciální operátory splňující (3.1.5) součástí dynamické grupy ve smyslu grupy obsahující transformace, které přenášejí vektory mezi různými energetickými hladinami ? Mohly by být, ale vzhledem k tomu, že pro $\Delta E \neq 0$ může být energetický rozdíl $\Delta E = sC$ prakticky libovolný a unitární operátor nemůže nenulový vektor zobrazovat na nulu, musel by mít Hamiltonián spojité spektrum. V klasické mechanice jsou ovšem spojitá spektra samozřejmostí a není se čemu divit, že funkce F splňující $\{F, H\} = C$ existují.

Otázka 2: Nesouvisejí s generátory dynamické grupy časově závislé integrály pohybu ?

- Snadno se ověří, že pro časově závislý integrál pohybu $\hat{K}_t$ je
$$\hat{K}_t = e^{-it\Delta}\hat{K} \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{H}, \hat{K}] = \Delta \hat{K}. \tag{3.1.6}$$
Podle konstrukce v podkapitole (2.1) bychom takto mohli dostat nějaké generátory dynamické grupy jako $\hat{K}_0$.

- V článku [3] tento přístup rozvíjí a v knize [12] dokonce dynamickou grupu jako algebru časově závislých integrálů pohybu v $t = 0$ definují. V článku [3] rovněž navrhují postup, jak lze časově závislé integrály pohybu hledat, totiž skrze **zobecněný teorém Emmy Noetherové** v Lagrangeovské verzi pro časově závislé variace. Pro Keplerův problém skutečně naleznou $SO(4,2)$ a pro izotropní LHO $Sp(2n, \mathbb{R}) \ltimes W(n)$.

Věta 3.1.3. (Zobecněný teorém Emmy Noetherové v Lagrangeovské verzi)

Pro Lagrangián $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ uvažme obecné variace souřadnic
$$q_i(t) \to q_i(t) + \delta q_i(t) \quad , \quad \delta q_i(t) = f_i(q_j(t), \dot{q}_j(t), t).$$
Jestliže lze výslednou variaci Lagrangiánu δL zapsat jako
$$\delta L = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Omega,$$
pro nějakou funkci Ω, pak je veličina
$$K_t = \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i - \Omega \tag{3.1.7}$$
časově závislým integrálem pohybu.

Následující příklad je úplně převzat z článku [3] a ilustruje postup autorů při hledání generátorů dynamické grupy.

Příklad 3.1.4. (LHO v jedné dimenzi)

Lagrangián je $L = \frac{1}{2}(\dot{q}^2 - q^2)$. Uvážením variace $\delta q = f(t)\dot{q} + g(t)q + h(t)$, dostáváme

$$\begin{aligned}\delta L =& \frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(\delta q)^{\cdot} = \\ =& (-q)(f\dot{q} + gq + h) + \dot{q}(\dot{f}\dot{q} + f\ddot{q} + \dot{g}q + g\dot{q} + \dot{h}).\end{aligned}$$

Pokud jsou splněny podmínky $\dot{f} = -2g$, $\ddot{g} + 4g = 0$ a $\ddot{h} + h = 0$, lze psát

$$\Omega = \frac{1}{2}f\dot{q}^2 + \frac{1}{2}(\dot{g} - f)q^2 + \dot{h}q. \tag{3.1.8}$$

Pro funkce f, g, h máme vyřešením těchto podmínek

$$\begin{aligned}f =& i(Ae^{2it} - B^{-2it}) + C \\ g =& Ae^{2it} + Be^{-2it} \\ h =& De^{it} + Ee^{-it},\end{aligned}$$

kde A, B, C, D, E jsou libovolné konstanty. Dosazením do vzorce (3.1.8), následně do (3.1.7) a uvážením libovolnosti integračních konstant dostáváme

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)\ ,\ K_t^{\pm} = \left(\mp\frac{i}{2}(p^2 - q^2) + qp\right)e^{\mp 2it}\ ,\ F_t^{\pm} = (p \pm iq)e^{\mp it}.$$

Tyto funkce splňují jak v t, tak v $t = 0$ komutační relace

$$\{K^+, K^-\} = 4iH\ ,\ \{H, K^{\pm}\} = \mp 2iK^{\pm}\ ,\ \{H, F^{\pm}\} = \mp iF^{\pm}$$

$$\{F^+, F^-\} = -2i\ ,\ \{K^{\pm}, F^{\pm}\} = 0\ ,\ \{K^{\pm}, F^{\mp}\} = 2F^{\pm}.$$

Skrze princip korespondence $\{-,-\} \to \frac{1}{i}[-,-]$ obdržíme příslušné kvantově mechanické generátory. Porovnáním s našimi předchozími výsledky pro oscilátor máme $K^{\pm} \simeq \hat{s}^{\pm}$ a $F^{\pm} \simeq \hat{a}^{\dagger}/\hat{a}$.

Zdá se ovšem, že pro libovolný operátor $\hat{K}$ je operátor definovaný předpisem

$$\hat{K}_t = \hat{U}_t\hat{K}\hat{U}_t^{\dagger}$$

časově závislým integrálem pohybu, neboť

$$\frac{\partial \hat{K}_t}{\partial t} = -i\hat{H}\hat{U}_t\hat{K}\hat{U}_t^\dagger + i\hat{U}_t\hat{K}\hat{H}\hat{U}_t^\dagger = -i[\hat{H}, \hat{K}_t].$$

To by odpovídalo klasické mechanice, kde má systém na $2n$ rozměrném prostoru $2n$ časově závislých integrálů pohybu, které reflektují počáteční podmínky.

V kvantově mechanickém modelu hrají roli dynamických souřadnic generátory $\hat{T}_i$ dynamické grupy. Každý systém má tudíž za algebraicky nezávislé časové integrály pohybu

$$(\hat{T}_i)_t = \hat{U}_t\hat{T}_i\hat{U}_t^\dagger = e^{-it\hat{H}}\hat{T}_i e^{it\hat{H}}.$$

Pokud bychom tedy definovali dynamickou algebru jako algebru časově závislých integrálů pohybu $(\hat{T}_i)_t$ v $t = 0$, pak sice dostaneme generátory dynamické grupy, ale jedná se o definici cyklickou.

Autoři článku [3] ovšem vycházeli z klasických systémů s operátory $\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}$ a hledali tudíž „vhodnější“ dynamickou grupu. Srovnáním s jejich výsledky zjišťuji, že veškeré jejich časově závislé integrály pohybu byly též ve tvaru $\hat{K}_t = e^{-it\Delta}\hat{K}$ pro nějaké Δ. Domnívám se tudíž, že za vším stojí omezení tvaru variace, která je lineární v souřadnicích a v rychlostech.

3.2 Analogie v klasické mechanice

Klasická mechanika pracuje s Hamiltonovskými systémy $(M, \{-,-\}, H)$, kde M je varieta, $\{-,-\}$ Poissonovy závorky a H Hamiltonián. To nás navádí na zkoumání korespondence

$$(M, \{-,-\}, H) \quad \simeq \quad (G_D, \mathcal{H}, \hat{H}).$$

Jen pro zajímavost uveďme, že v knize [13], která se zabývá speciálně Keplerovým problémem, dochází autor při jistém procesu zvaném redukce z klasického Keplerova problému také ke grupě $SO(4,2)$. A to tak, že jakoby faktoruje původní fázový prostor podle grupy symetrie $SO(4)$.

V článku [7] pracují naopak a s pomocí dynamické grupy kvantově mechanického systému se snaží konstruovat jeho klasický „ekvivalent“. Na tom pak zkoumají neintegrabilní systémy. Je tedy možné, že symetrické vlastnosti obou systémů, jakožto transformace přenášející jednu trajektorii v prostoru dynamických stavů na druhou a jejich komutační relace by byly v ekvivalentních Hamiltonovských systémech a kvantově mechanických systémech podobné.

Hledáme-li analogii dynamické symetrie v klasické symplektické mechanice, stačí se omezit na integrabilní systémy s n stupni volnosti. V tom případě existuje n komutujících integrálů pohybu I_i, že Hamiltonián lze zapsat jako $H = H(I_1, \ldots, I_n)$, a že omezené trajektorie systému se linou pouze po torech označených jako $\mathbf{I} = (I_1, \ldots, I_n)$.[11]. Platí, že n je maximální počet komutujících integrálů pohybu, ale že Hamiltonián může mít až $2n-1$ integrálů pohybu, z nichž ne všechny spolu komutují. Existence více nežli n integrálů pohybu má důsledky pro periodicitu drah. Systém s $2n-1$ integrály pohybu má například všechny omezené trajektorie uzavřené. Uzavřené trajektorie ale znamenají, že se jich na jednom toru se stejnou energií vyskytuje více, na rozdíl od případu, kdy existuje právě n komutujících integrálů pohybu a torus $\mathbf{I}$ je hustě vykryt právě jednou dráhou. To je analogie degenerace energetických hladin v kvantové mechanice, a proto bývají Keplerův problém a izotropní LHO každý s 5 ti nezávislými integrály pohybu i v klasické mechanice nazývány maximálně degenerované sféricky symetrické systémy.[12]

Analogií dynamického narušení vyšší symetrie by mohlo být například přičtení I_i k jejich Hamiltoniánům, které tory nezmění, ale jejich degenerace klesne. .

---

[11] Tory jsou podvariety fázového prostoru, na nichž je $\mathbf{I}$ konstantní. Toto je obsahem známé Liouville-Arnoldovy věty.

[12] Dokonce jiné maximálně degenerované sféricky symetrické systémy podle známé věty o uzavřených trajektoriích z klasické mechaniky neexistují.

4. Závěr

V práci byly studovány invariantní a dynamické symetrie a dynamické grupy. Jako poměrně přirozený se jeví pojem kvantově mechanického systému. Jednak je pro něj možné definovat kvantové stupně volnosti a kvantovou integrabilitu a jednak odpovídá představě, že systém nahlížíme zvenčí algebrou pozorovatelných. Dynamická grupa generuje spektrum Hamiltoniánu a je tak přínosná po početní stránce. Dovoluje také zavést dynamickou symetrii. Dynamická symetrie zahrnuje jednak vyšší symetrii Keplerova problému a LHO a jednak případ dynamického narušení symetrie. Existence dynamická symetrie má příznivé důsledky. Především je systém s dynamickou symetrií kvantově integrabilní a jako takový je analyticky řešitelný. Jeho spektrum je dále odvoditelné ze znalosti hodnot, které nabývají Casimirovy operátory příslušného řetězce podgrup na jednotlivých multipletech.

Krátce jsem se též zabýval souvislostí dynamických grup a časově závislých integrálů pohybu a analogií v klasické mechanice. Časově závislé integrály pohybu mezi sebou přenášejí řešení Schrödingerovy rovnice. Ty z nich, které se dají nalézt zobecněným teorémem Emmy Noetherové poskytují v případě LHO a Keplerova problému generátory dynamických grup.

Závěrem lze říci, že problematika symetrií je velice široká a na některé otázky v tomto textu nejsou doposud podány jasné odpovědi. Dostupná literatura se dynamickými grupami a dynamickými symetriemi zabývá spíše jen z početního hlediska a jejich intuitivní význam a původ nevysvětluje.

Literatura

[1] K. Brading, E. Castellani, Symmetry and Symmetry Breakings, The Stanford Encyclopedia of Philosophy, 2008 *http://plato.stanford.edu/archives/fall2008/entries/symmetry-breaking/*

[2] J. Formánek, Úvod do Kvantové Teorie I, II, 2. vydání, *Academia Praha*, 2004

[3] O. Castaños, A. Frank, R. Lopez-Peña, Noether's theorem and dynamical groups in quantum mechanics, *J. Phys.* A: Math. Gen. 23, 1990, 5141-5151

[4] G. Burdet, M. Perrin, M. Perroud, Generating Functions for the Affine Symplectic Group, *Comm. Math. Phys.*, Vol. 58, Number 3, 1978, p. 241-254

[5] G. W. F. Drake (Ed.), Springer Handbook of Atomic, Molecular and Optical Physics, *Springer Verlag*, 2006, p. 87-100

[6] N. Burić, Quantum Degrees of Freedom, Quantum Integrability and Entanglment Generators, *arXiv:1003.5184v1*, 2010

[7] Wei-Min Zhang, Da Hsuan Feng, Quantum Nonintegrability in Finite Systems, *Physics Reports* 252, 1995, p. 1-100

[8] R. Campoamor-Stursberg, Embeddings of Lie algebras, contractions and the state labelling problem, *arXiv:0805.2981v1*, 2008

[9] W. Greiner, B. Müller, Quantum Mechanics: Symmetries, 2nd. Edition, *Springer Verlag*, 2001

[10] J.-Q. Chen, J. Ping, F. Wang, Group Representation Theory for Physicists, 2nd Edition, *World Scientific Publishing*, 2002

[11] F. Iachello, Algebraic methods in quantum mechanics with applications to nuclear and molecular structure, *Nuclear Physics A*, Vol. 560, Issue 1, 12 July 1993, p. 23-34

[12] A. Frank, P. Van Isacker, Algebraic Methods in Molecular and Nuclear Structure Physics, *A Wiley-Interscience Publication*, John Wiley, 1994, p. 445-481

[13] B. Cordani, The Kepler Problem, *Progress in Mathematical Physics*, Birkhäuser Verlag, 2010

[14] A.O. Barut, Dynamical Group Quantitization, *Reports on Mathematical Physics*, Vol. 11, 1977, p. 401-413

[15] D. J. Rowe, J. L. Wood, Fundamentals of Nuclear Nodels: Foundational Models, Vol. 1. *World Scientific Publishing*, 2010, p. 143-161

[16] H. Kleinert, Group Dynamics of the Hydrogen Atom, *Lectures in Theoretical Physics*, edited by W.E. Brittin and A.O. Barut, Gordon and Breach, N.Y. 1968, p. 427-482.

[17] J.P. Elliott, P.G. Dawber, Symmetry in Physics, Vol. 1,2, *The Macmillan Press*, 1979

[18] K. W. McVoy, Symmetry Groups in Physics, *Rev. Mod. Phys.* Vol. 37, Issue 1, 1965, p. 84–104

[19] L. E. Ballentine, Quantum Mechanics: A Modern Development, *World Scientific Publishing*, 1998

[20] R. Goodman, N. R. Wallach, Symmetry, Representations, and Invariants, *Springer Verlag*, 2009

[21] Wikipedia, The Free Encyclopedia,
http://www.wikipedia.org