17. UNITÁRNE PRIESTORY

V paragrafe 12.1 sme videli, že kanonický diagonálny tvar ľubovoľnej symetrickej bilineárnej formy na konečnorozmernom vektorovom priestore nad poľom $\mathbb{C}$ všetkých komplexných čísel je jednoznačne určený jej hodnosťou. Zavádzať pre takéto formy niečo na spôsob signatúry a hovoriť o ich defitnosti vôbec nemá zmysel. Táto jednoduchosť v porovnaní s teóriou symetrických bilineárnych foriem na vektorových priestoroch nad poľom $\mathbb{R}$ má za následok, že symetrická regulárna bilineárna forma na komplexnom vektorovom priestore nevytvára geometrickú štruktúru analogickú reálnemu prípadu. Ukazuje sa však, že zdanlivo nepatrnou modifikáciou pojmu bilineárnej formy možno túto prekážku geometrizácie preklenúť.

Kapitolu začneme štúdiom tzv. *poldruhalineárnych foriem* na komplexných vektorových priestoroch. Pre takéto formy spĺňajúce istú mierne pozmenenú podmienku symetrie už možno prirodzene zaviesť pojmy signatúry a definitnosti a rozšíriť na ne platnosť tvrdení z kapitoly 12. Najdôležitejší bude pre nás opäť kladne definitný prípad, kedy hovoríme o *(komplexnom) skalárnom súčine.* Teória (konečnorozmerných) *unitárnych priestorov*, t.j. komplexných vektorových priestorov vybavených skalárnym súčinom, je natoľko priamočiarym zovšeobecnením teórie euklidovských priestorov, že väčšinu pojmov a výsledkov možno z jednej do druhej preniesť len s malými redakčnými úpravami. Preto miesto systematickej výstavby teórie unitárnych priestorov iba stručne naznačíme, ako to možno urobiť.

Záver kapitoly je venovaný stručnému náčrtu úlohy unitárnych priestorov v *kvantovej mechanike.* Tomu bude predchádzať krátke odbočenie do klasickej mechaniky a pojednanie o ťažkostiach, ktoré sa stavajú do cesty pokusom vytvoriť adekvátny fyzikálny obraz javov mikrosveta a matematický popis jeho zákonitostí.

17.1. Poldruhalineárne formy

Poldruhalineárnou formou na komplexnom vektorovom priestore V nazývame zobrazenie $F\colon V \times V \to \mathbb{C}$ také, že pre všetky $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \in V$, $c \in \mathbb{C}$ platí

$$\begin{aligned} F(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) &= F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) + F(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}), & F(c\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) &= cF(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}), \\ F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}+\boldsymbol{z}) &= F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) + F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}), & F(\boldsymbol{x}, c\boldsymbol{y}) &= \overline{c}F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}). \end{aligned}$$

Hovoríme, že F je lineárne v prvej premennej a *semilineárne* v druhej premennej.

Ak V je konečnorozmerný a $\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n)$ je jeho báza, tak maticu

$$\boldsymbol{A} = [F]_{\boldsymbol{\alpha}} = \big(F(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{u}_k)\big) \in \mathbb{C}^{n\times n},$$

rovnako ako v reálnom prípade, nazývame *maticou poldruhalineárnej formy* F v báze $\boldsymbol{\alpha}$. Potom pre ľubovoľné vektory $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$ so súradnicami $(\boldsymbol{x})_{\boldsymbol{\alpha}} = (x_1, \dots, x_n)^T$, $(\boldsymbol{y})_{\boldsymbol{\alpha}} = (y_1, \dots, y_n)^T$ platí

$$F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x})_{\boldsymbol{\alpha}}^T \cdot \boldsymbol{A} \cdot \overline{(\boldsymbol{y})_{\boldsymbol{\alpha}}} = \sum_{j=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} a_{jk} x_j \overline{y}_k,$$

kde $\overline{(\boldsymbol{y})}_{\boldsymbol{\alpha}} = (\overline{y}_1, \dots, \overline{y}_k)^T$. Pritom $\boldsymbol{A} = (a_{jk})_{n\times n} = [F]_{\boldsymbol{\alpha}}$ je jediná matica s touto vlastnosťou.

Ak $\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n)$ je druhá báza priestoru V, tak matice $\boldsymbol{A} = [F]_{\boldsymbol{\alpha}}$, $\boldsymbol{B} = [F]_{\boldsymbol{\beta}}$ sú zviazané vzťahom

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{P}^T_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} \cdot \boldsymbol{A} \cdot \overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}},$$

kde $\overline{\boldsymbol{P}}_{\alpha,\boldsymbol{\beta}} = (\overline{p}_{jk})$ je matica komplexne združená k matici prechodu $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} = (p_{jk})$. Z toho vyplýva, že $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ sú maticami tej istej poldruhalineárnej formy vzhľadom na (možno) rôzne bázy $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ práve vtedy, keď $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{P}^T \cdot \boldsymbol{A} \cdot \overline{\boldsymbol{P}}$ pre nejakú regulárnu maticu $\boldsymbol{P} \in \mathbb{C}^{n\times n}$, t.j. práve vtedy, keď existuje regulárna matica $\boldsymbol{Q} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ taká, že

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{Q}^* \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{Q},$$

kde $\boldsymbol{Q}^* = \overline{\boldsymbol{Q}^T} = \overline{\boldsymbol{Q}}^T$ označuje maticu transponovanú a komplexne združenú k matici $\boldsymbol{Q}$ – hovoríme, že $\boldsymbol{Q}^*$ je *hermitovsky združená* alebo tiež *adjungovaná matica* k matici $\boldsymbol{Q}$. Naozaj, ak položíme $\boldsymbol{Q} = \overline{\boldsymbol{P}}$, tak $\boldsymbol{Q}^* = \boldsymbol{P}^T$.

Keďže pole $\mathbb{C}$ všetkých komplexných čísel je rozšírením poľa $\mathbb{R}$ všetkých reálnych čísel, každý vektorový priestor V nad poľom $\mathbb{C}$ možno zároveň považovať za vektorový priestor nad poľom $\mathbb{R}$ (pozri príklad 1.6.1). Tento vektorový priestor budeme značiť $V_{\mathbb{R}}$ a nazývať *reálnym zúžením* alebo tiež *zreálnením* priestoru V.

Každé zobrazenie $F\colon V \times V \to \mathbb{C}$ určuje predpismi

$$F_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \operatorname{Re} F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}), \qquad F_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \operatorname{Im} F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}),$$

pre $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$, dve zobrazenia $F_0 = \operatorname{Re} F$, $F_1 = \operatorname{Im} F\colon V \times V \to \mathbb{R}$; potom, samozrejme, $F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = F_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) + \mathrm{i}F_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$.

Dôkaz nasledujúceho tvrdenia prenechávame ako jednoduché cvičenie čitateľovi.

17.1.1. Tvrdenie. *Nech $F\colon V \times V \to \mathbb{C}$ je ľubovoľné zobrazenie. Potom F je poldruhalineárna forma práve vtedy, keď $F_0 = \operatorname{Re} F$, $F_1 = \operatorname{Im} F$ sú bilineárne formy na reálnom vektorovom priestore $V_{\mathbb{R}}$ a pre všetky $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$ platí*

$$F_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = F_1(\mathrm{i}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}), \qquad F_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = F_0(\boldsymbol{x}, \mathrm{i}\boldsymbol{y}).$$

To okrem iného znamená, že každá zo zložiek F_0, F_1 poldruhalineárnej formy F jednoznačne určuje druhú.

17.2. Hermitovské formy a hermitovské matice

Hovoríme, že *poldruhalineárna forma* F na komplexnom vektorovom priestore V je *hermitovská* alebo tiež *kososymetrická*, ak pre všetky $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$ platí

$$F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \overline{F(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x})}.$$

Nasledujúce tvrdenie je bezprostredným dôsledkom našej definície.

17.2.1. Tvrdenie. *Poldruhalineárna forma $F\colon V \times V \to \mathbb{C}$ je hermitovská práve vtedy, keď jej zložky $F_0 = \operatorname{Re} F$, $F_1 = \operatorname{Im} F$ spĺňajú podmienky*

$$F_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = F_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}), \qquad F_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = -F_1(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x})$$

pre všetky $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$.

Podľa tvrdení 17.1.1 a 17.1.2 možno teda každú hermitovskú formu $F\colon V \times V \to \mathbb{C}$ rozložiť na súčet $F = F_0 + \mathrm{i}F_1$ dvoch bilineárnych foriem F_0, $F_1\colon V_{\mathbb{R}} \times V_{\mathbb{R}} \to \mathbb{R}$, z ktorých prvá je symetrická, druhá antisymetrická a platí $F_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = F_0(\boldsymbol{x}, \mathrm{i}\boldsymbol{y})$ alebo, čo vyjde vďaka (anti)symetrii narovnako, $F_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = F_1(\mathrm{i}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$.

Štvorcová *matica* $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ sa nazýva *hermitovská* alebo tiež *kososymetrická*, ak $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^*$, t. j. $a_{jk} = \overline{a}_{kj}$ pre všetky $j, k \leq n$. Špeciálne, $a_{jj} = \overline{a}_{jj}$, čiže všetky diagonálne prvky hermitovskej matice sú reálne. Zrejme $\boldsymbol{A}$ je hermitovská práve vtedy, keď poldruhalineárna forma $F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \boldsymbol{x}^T \cdot \boldsymbol{A} \cdot \overline{\boldsymbol{y}}$ na (stĺpcovom) vektorovom priestore $\mathbb{C}^n$ je hermitovská.

Ak $F\colon V \times V \to \mathbb{C}$ je hermitovská forma, tak $F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \overline{F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})}$ pre každé $\boldsymbol{x} \in V$, čiže všetky hodnoty $F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})$ sú reálne, teda má zmysel pýtať sa na ich znamienko. To nám v komplexnom prípade umožňuje zaviesť pre hermitovské formy a hermitovské matice všetky pojmy súvisiace s definitnosťou a so signatúrou rovnako, ako v reálnom prípade pre symetrické bilineárne formy a symetrické matice (pozri paragrafy 12.1 a 12.2). Navyše, v dôsledku antisymetrie formy $F_1 = \operatorname{Im} F$ platí

$$F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = F_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}), \qquad F_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = 0,$$

takže na $F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})$ sa možno dívať ako na kvadratickú formu na reálnom vektorovom priestore $V_{\mathbb{R}}$.

Signatúru hermitovskej matice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$, a tým aj hermitovskej formy $F\colon V^2 \to \mathbb{C}$ na konečnorozmernom vektorovom priestore V nad $\mathbb{C}$, možno zistiť jej úpravou na diagonálny tvar podľa schémy

$$\boldsymbol{A} \xrightarrow[\text{ERO}]{\overline{\text{ESO}}} \boldsymbol{B}$$

$$\boldsymbol{I}_n \xrightarrow{\text{ESO}} \boldsymbol{P}$$

Na matici $\boldsymbol{A}$ teda vždy vykonáme jednu ERO a jej zodpovedajúcu ESO s *komplexne združeným skalárom* (teda výmene dvoch riadkov zodpovedá výmena príslušných stĺpcov, avšak vynásobeniu j-teho riadku nenulovým skalárom $c \in \mathbb{C}$ zodpovedá vynásobenie j-teho stĺpca skalárom $\overline{c}$ a pripočítaniu c-násobku j-teho riadku ku k-temu riadku zodpovedá pripočítanie $\overline{c}$-násobku j-teho stĺpca ku k-temu stĺpcu). Na jednotkovej matici vykonáme príslušnú ESO s pôvodným skalárom. (Porovnaj s podobnou schémou z paragrafu 11.3). Potom $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{P}^T \cdot \boldsymbol{A} \cdot \overline{\boldsymbol{P}}$ a stĺpce matice $\boldsymbol{P}$ tvoria bázu $\boldsymbol{\beta}$ priestoru $\mathbb{C}^n$, vzhľadom na ktorú má hermitovská forma $\boldsymbol{x}^T \cdot \boldsymbol{A} \cdot \overline{\boldsymbol{y}}$ diagonálnu (preto tiež nevyhnutne reálnu) maticu $\boldsymbol{B}$. Ak $\boldsymbol{A}$ bola maticou hermitovskej formy F na n-rozmernom vektorovom priestore V v báze $\boldsymbol{\alpha}$, tak diagonálna matica $\boldsymbol{B}$ je maticou formy F v báze $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{P}$, čiže $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ je maticou prechodu z bázy $\boldsymbol{\beta}$ do bázy $\boldsymbol{\alpha}$.

V podstate rovnako ako v paragrafe 11.3 sa dá dokázať, že uvedený postup vedie vždy k cieľu. Navyše možno dosiahnuť, aby matica $\boldsymbol{B}$ mala na diagonále len skaláry ± 1 a 0. Napriek istej nejednoznačnosti výsledných matíc $\boldsymbol{B}$ a $\boldsymbol{P}$, i v tomto prípade platí Sylvestrov zákon zotrvačnosti, teda signatúra hermitovskej formy či matice je dobre definovaná a sú splnené jednoduché analógie výsledkov pre reálne symetrické bilineárne formy a matice z paragrafu 12.1. Detaily prenechávame na samostatné premyslenie čitateľovi.

17.3. Komplexný skalárny súčin a unitárne priestory

Skalárnym alebo tiež *vnútorným súčinom* na komplexnom vektorovom priestore V nazývame ľubovoľnú kladne definitnú hermitovskú poldruhalineárnu formu na V; jej hodnotu na vektoroch $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$ budeme značiť opäť $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle$. Komplexný vektorový priestor V vybavený skalárnym súčinom nazývame *unitárny priestor.*

Nezávisle na znalosti uvedených pojmov možno skalárny súčin na V definovať ako binárnu operáciu $V \times V \to \mathbb{C}$, ktorá každej dvojici $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ vektorov z V priradí komplexné číslo $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle$ také, že pre všetky $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \in V$ a ľubovoľné $c \in \mathbb{C}$ platí:

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{y} \rangle &= \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{y} \rangle + \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{y} \rangle && \text{(aditivita)},\\
\langle c\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle &= c\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle && \text{(homogenita)},\\
\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle &= \overline{\langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{x} \rangle} && \text{(kosá symetria)},\\
\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0} \ &\Rightarrow\ \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle > 0 && \text{(kladná definitnosť)}.
\end{aligned}
$$

Spojenie aditivity a homogenity skalárneho súčinu dáva jeho linearitu ako funkcie prvej premennej (pri pevnej druhej premennej). Vďaka kosej symetrii z toho vyplýva semilinearita skalárneho súčinu ako funkcie druhej premennej (pri pevnej prvej premennej), t. j. rovnosti

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}_1 + \boldsymbol{y}_2 \rangle &= \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}_2 \rangle + \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}_2 \rangle,\\
\langle \boldsymbol{x}, c\boldsymbol{y} \rangle &= \overline{c}\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle,
\end{aligned}
$$

pre všetky $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2 \in V$ a $c \in \mathbb{C}$. Rovnako z kosej symetrie vyplýva reálnosť výrazu $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle = \overline{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle}$ pre každé $\boldsymbol{x} \in V$, čo teprv dáva zmysel podmienke kladnej definitnosti; z poldruhalinearity potom vyplýva jej nasledujúci podrobnejší rozpis

$$
\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle \geq 0 \ \&\ \big(\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle = 0 \ \Leftrightarrow\ \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}\big)
$$

pre každé $\boldsymbol{x} \in V$.

Ako sme naznačili predchádzajúcimi dvoma odstavcami, ktoré verne sledujú formulácie prvých dvoch odstavcov z paragrafu 13.1, teória konečnorozmerných unitárnych priestorov je pomerne priamočiarym zovšeobecnením teórie euklidovských priestorov. Väčšinu pojmov, ktoré sme definovali pre euklidovské priestory, možno zaviesť aj pre (konečnorozmerné) unitárne priestory a väčšinu výsledkov o euklidovských priestoroch možno s malými modifikáciami dokázať aj pre (konečnorozmerné) unitárne priestory. S istou dávkou zjednodušenia možno povedať, že jediný formálny rozdiel spočíva v tom, že v komplexnom prípade si musíme dávať pozor na poradie činiteľov v skalárnom súčine, občas nad niektoré skaláry primaľovať pruh a rozlišovať medzi c^2 a $|c|^2$. Z toho dôvodu nebudeme čitateľa unavovať systematickým budovaním teórie unitárnych priestorov; miesto toho sa obmedzíme len na zopár základných pojmov a výsledkov, a kde to bude možné, odvoláme sa na zodpovedajúce analógie z euklidovských priestorov.

Keďže $0 \leq \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle \in \mathbb{R}$, *dĺžku* alebo tiež *normu vektora* $\boldsymbol{x}$ v unitárnom priestore V možno definovať ako nezáporné reálne číslo

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle}.$$

Zrejme $\|\boldsymbol{x}\|$ je norma na vektorovom priestore $V_{\mathbb{R}}$ pochádzajúca od reálneho skalárneho súčinu $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle_0 = \mathrm{Re}\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle$, teda sú pre ňu splnené všetky tri definujúce podmienky (trojuholníková nerovnosť, pozitívna homogenita, oddeliteľnosť) z paragrafu 13.3. Navyše podmienka pozitívnej homogenity

$$\|c\boldsymbol{x}\| = |c|\,\|\boldsymbol{x}\|$$

platí pre všetky $\boldsymbol{x} \in V$, $c \in \mathbb{C}$ (a nielen pre $c \in \mathbb{R}$). Naozaj,

$$\|c\boldsymbol{x}\|^2 = \langle c\boldsymbol{x}, c\boldsymbol{x} \rangle = c\overline{c}\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle = |c|^2\,\|\boldsymbol{x}\|^2\,.$$

Pozornejší čitateľ možno v tejto chvíli pojal podozrenie, že poldruhalineárne formy, ako modifikácia bilineárnych foriem, boli vymyslené len nato, aby nám v práve vykonanom výpočte prešiel trik so skalárom c. Až na časticu „len" mu toto podozrenie nehodláme vyvracať.

Z Cauchyho-Schwartzovej nerovnosti (tvrdenie 13.2.3) pre reálny skalárny súčin dostávame nerovnosť $|\mathrm{Re}\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle| \leq \|\boldsymbol{u}\|\,\|\boldsymbol{v}\|$, z ktorej už vyplýva trojuholníková nerovnosť pre normu. S trochou úsilia však možno dokázať silnejší odhad.

17.3.1. Tvrdenie. *(Cauchyho-Schwartzova nerovnosť) Nech V je unitárny priestor. Potom pre ľubovoľné vektory $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V$ platí*

$$|\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle| \leq \|\boldsymbol{u}\|\,\|\boldsymbol{v}\|\,,$$

pričom rovnosť nastane práve vtedy, keď $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ sú lineárne závislé.

Dôkaz. Označme si $c = \cos\alpha + \mathrm{i}\sin\alpha$, kde $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle = |\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle|\,(\cos\alpha + \mathrm{i}\sin\alpha)$ je vyjadrenie čísla $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle \in \mathbb{C}$ v goniometrickom tvare. Potom $|c| = 1$, $c^{-1} = \overline{c}$ a

$$|\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle| = c^{-1}\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle = \overline{c}\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle = \langle \boldsymbol{u}, c\boldsymbol{v} \rangle = \mathrm{Re}\langle \boldsymbol{u}, c\boldsymbol{v} \rangle,$$

lebo ide o reálne číslo. Keďže $\mathrm{Re}\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle$ je kladne definitná bilineárna forma na $V_{\mathbb{R}}$, podľa reálnej verzie Cauchyho-Schwartzovej nerovnosti platí

$$|\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle| = \mathrm{Re}\langle \boldsymbol{u}, c\boldsymbol{v} \rangle \leq \|\boldsymbol{u}\|\,\|c\boldsymbol{v}\| = |c|\,\|\boldsymbol{u}\|\,\|\boldsymbol{v}\| = \|\boldsymbol{u}\|\,\|\boldsymbol{v}\|\,.$$

Rovnosť nastane práve vtedy, keď vektory $\boldsymbol{u}$, $c\boldsymbol{v}$ sú lineárne závislé nad $\mathbb{R}$. Z toho zrejme vyplýva lineárna závislosť vektorov $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ nad $\mathbb{C}$. Naopak, ak $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ sú lineárne závislé nad $\mathbb{C}$, tak rovnosť $|\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle| = \|\boldsymbol{u}\|\,\|\boldsymbol{v}\|$ možno jednoducho overiť priamym výpočtom.

Pre nenulové vektory $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V$ predstavuje výraz $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle / \|\boldsymbol{u}\| \, \|\boldsymbol{v}\|$ komplexné číslo s absolútnou hodnotou ≤ 1. Analógia s reálnym prípadom nás zvádza pokúsiť sa na jeho základe nejako zadefinovať uhol vektorov $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$. Núkajú sa nám tri možnosti:

(1) Vychádzajúc z toho, že reálna časť $\operatorname{Re}\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle$ skalárneho súčinu $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle$ je skalárnym súčinom na reálnom zúžení $V_{\mathbb{R}}$ unitárneho priestoru V, ktorý plne určuje jeho normu, môžeme sa sústrediť len na ňu a ignorovať imaginárnu časť. V takom prípade

$$\alpha = \arccos \frac{\operatorname{Re}\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle}{\|\boldsymbol{u}\| \, \|\boldsymbol{v}\|}$$

predstavuje uhol, ktorý zvierajú vektory $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ v priestore $V_{\mathbb{R}}$.

(2) Uhol vektorov $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ môžeme definovať ako uhol priamok $[\boldsymbol{u}]$, $[\boldsymbol{v}]$, t. j. ako reálne číslo

$$\alpha = \arccos \frac{|\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle|}{\|\boldsymbol{u}\| \, \|\boldsymbol{v}\|}.$$

V reálnom prípade by také niečo zodpovedalo nahradeniu odchýlky vektorov $\sphericalangle(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ odchýlkou priamok $\sphericalangle([\boldsymbol{u}], [\boldsymbol{v}])$; to znamená, že medzi odchýlkami dvojíc $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ a $(\boldsymbol{u}, -\boldsymbol{v})$ by sme nerozlišovali a z pôvodných uhlov $\sphericalangle(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$, $\sphericalangle(\boldsymbol{u}, -\boldsymbol{v})$ by sme vybrali ten menší. (Nezabúdajme však, že priamky $[\boldsymbol{u}]$, $[\boldsymbol{v}]$ v komplexnom vektorovom priestore V sú z reálneho hľadiska dvojrozmerné, t. j. sú to vlastne roviny vo $V_{\mathbb{R}}$.)

(3) Prostriedkami teórie funkcií komplexnej premennej možno definičný obor reálnej funkcie arccos, t. j. interval $\langle -1, 1 \rangle$, rozšíriť na jednotkový kruh $\{c \in \mathbb{C};\ |c| \leq 1\}$ (dokonca na celú komplexnú rovinu $\mathbb{C}$). Potom odchýlka $\sphericalangle(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ by bola *komplexné číslo*

$$\alpha = \arccos \frac{\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle}{\|\boldsymbol{u}\| \, \|\boldsymbol{v}\|}$$

také, že

$$\cos \alpha = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}}{2} = \frac{\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle}{\|\boldsymbol{u}\| \, \|\boldsymbol{v}\|}.$$

Tento spôsob by bol, samozrejme, matematicky najčistejší, hoci z geometrického hľadiska pre nás zatiaľ nie príliš názorný. Navyše by si vyžadoval istú znalosť teórie funkcií komplexnej premennej, ktorú u čitateľa nepredpokladáme.

My sa však nebudeme rozhodovať medzi uvedenými troma alternatívami, teda uhol dvoch nenulových vektorov v unitárnom priestore vôbec nebudeme skúmať ani definovať. Najdôležitejšou interpretácia výrazu $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle / \|\boldsymbol{u}\| \, \|\boldsymbol{v}\|$ v unitárnom priestore je totiž jeho interpretácia v kvantovej mechanike. Tou však nie je kosínus uhla, ale – akokoľek čudne to znie – „amplitúda pravdepodobnosti“. K tejto otázke sa vrátime až v záverečnom paragrafe 17.6.

I keď na uhol dvoch vektorov v unitárnom priestore sme rezignovali, nemienime rezignovať na vzťah ortogonality (kolmosti). Relácia ortogonality

$$\boldsymbol{x} \perp \boldsymbol{y} \ \Leftrightarrow\ \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = 0$$

na vektoroch $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$ a operácia ortokomplementu

$$X^{\perp} = \{\boldsymbol{y} \in V;\ (\forall\, \boldsymbol{x} \in X)(\boldsymbol{x} \perp \boldsymbol{y})\}$$

na množinách $X \subseteq V$ majú rovnaké vlastnosti ako v reálnom prípade. Aj pojmy ortogonálnej či ortonormálnej množiny alebo usporiadanej k-tice vektorov, a najmä ortogonálnej a ortonormálnej bázy sú definované rovnako.

Gramovým-Schmidtovým ortogonalizačným procesom – či už ho vykonáme podľa vety 13.4.5 alebo diagonalizáciou Gramovej matice $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{\alpha}) = \big(\langle \boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{u}_k\rangle\big)$ nejakej bázy $\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n)$ priestoru V – možno dokázať, že konečnorozmerný unitárny priestor V má ortonormálnu bázu. Vzhľadom na takúto bázu $\boldsymbol{\beta}$ nadobúda skalárny súčin na V tvar tzv. *štandardného komplexného skalárneho súčinu* na $\mathbb{C}^n$, t. j. pre ľubovoľné vektory $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$ so súradnicami $(\boldsymbol{x})_{\boldsymbol{\beta}} = (x_1, \dots, x_n)^T$, $(\boldsymbol{y})_{\boldsymbol{\beta}} = (y_1, \dots, y_n)^T$ platí

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle = \sum_{j=1}^{n} x_j \overline{y}_j = (\boldsymbol{x})_{\boldsymbol{\beta}}^T \cdot \overline{(\boldsymbol{y})_{\boldsymbol{\beta}}} = \sum_{j=1}^{n} \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_j\rangle \langle \boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{y}\rangle,$$

keďže jednotlivé zložky súradníc vektorov $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ sú

$$x_j = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_j\rangle, \qquad y_j = \langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{u}_j\rangle.$$

Špeciálne pre $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ dostávame *Parsevalovu rovnosť*

$$\|\boldsymbol{x}\|^2 = \sum_{j=1}^{n} |x_j|^2 = \sum_{j=1}^{n} |\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_j\rangle|^2$$

(porovnaj s vetou 13.4.4).

17.4. Stavové priestory v klasickej mechanike

Cieľom tohto paragrafu nie je systematický výklad klasickej mechaniky. Hodláme len zbežne zaviesť a motivovať pojem stavového priestoru a stručne naznačiť prednosti v ňom fungujúceho Hamiltonovho formalizmu. Hlavne nám však ide o vybudovanie aspoň akej-takej názornej predstavy, či aspoň analógie, o ktorú by sme sa mohli oprieť v poslednom paragrafe, kde sa chystáme zaviesť stavové priestory v kvantovej mechanike, čo je oblasť, kde naša intuícia z viacerých dôvodov zlyháva.

Uvažujme hmotný bod pohybujúci sa vo fyzikálnom priestore, ktorý prostredníctvom voľby nejakej pravouhlej súradnicovej sústavy zvykneme stotožňovať s euklidovským priestorom $\mathbb{R}^3$. Priestorové súradnice (rádius-vektora) jeho polohy v čase t označme $\boldsymbol{x}(t) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t))$. Jeho okamžitá rýchlosť v čase t je potom daná ako derivácia

$$\boldsymbol{v}(t) = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t}, \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t}, \frac{\mathrm{d}x_3}{\mathrm{d}t}\right).$$

Ak navyše poznáme jeho hmotnosť m, tak jeho pohybový stav v čase t je jednoznačne určený dvoma vektormi: polohovým vektorom $\boldsymbol{x}(t)$ a vektorom hybnosti $\boldsymbol{p}(t) = m\boldsymbol{v}(t)$, t. j. jednotlivé zložky v_j rýchlosti a p_j hybnosti v smere súradných osí sú zviazané vzťahmi $p_j = mv_j = m(\mathrm{d}x_j/\,\mathrm{d}t)$ pre $j = 1, 2, 3$. Inak povedané, okamžitý pohybový stav hmotnej častice je jednoznačne určený jediným v čase premenným vektorom (bodom) $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p})$ v *stavovom priestore* $\mathbb{R}^6$. Tento priestor chápeme ako priamy súčin $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ dvoch exemplárov euklidovského priestoru $\mathbb{R}^3$ (so štandardným skalárnym súčinom), z ktorých prvý slúži na zaznamenávanie polohy a druhý hybnosti.

Kvôli jednoduchosti ďalej predpokladajme, že pohyb nášho hmotného bodu sa odohráva v tzv. *konzervatívnom* silovom poli, t. j. potenciálna energia $U = U(\boldsymbol{x})$ hmotného bodu v ňom je iba funkciou jeho polohy $\boldsymbol{x}$ a nezávisí od času. Sila pôsobica na časticu v danom mieste teda je

$$\boldsymbol{F} = -\operatorname{grad} U = -\left(\frac{\partial U}{\partial x_1}, \frac{\partial U}{\partial x_2}, \frac{\partial U}{\partial x_3}\right).$$

S využitím Newtonovej pohybovej rovnice

$$\boldsymbol{F} = \frac{\mathrm{d}(m\boldsymbol{v})}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}$$

dostávame

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -\operatorname{grad} U, \qquad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{v} = \frac{1}{m}\,\boldsymbol{p}.$$

Celková energia hmotného bodu v danom mieste a čase je súčtom jeho kinetickej a potenciálnej energie

$$H = \frac{1}{2}\,m\,\|\boldsymbol{v}\|^2 + U(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2m}\,\|\boldsymbol{p}\|^2 + U(\boldsymbol{x}).$$

Výraz $H = H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p})$ nazývame *Hamiltonovou funkciou* príslušnej pohybujúcej sa sústavy. Jednoduchý výpočet dáva

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial x_j} &= \frac{\partial U}{\partial x_j} = -\frac{\mathrm{d}p_j}{\mathrm{d}t},\\
\frac{\partial H}{\partial p_j} &= \frac{1}{2m}\cdot\frac{\partial\,\|\boldsymbol{p}\|^2}{\partial p_j} = \frac{1}{2m}\cdot\frac{\partial(p_1^2+p_2^2+p_3^2)}{\partial p_j} = \frac{1}{m}\,p_j = \frac{\mathrm{d}x_j}{\mathrm{d}t},
\end{aligned}$$

pre $j = 1, 2, 3$. Ak si ešte zavedieme skrátené označenie

$$\left(\frac{\partial H}{\partial x_1}, \frac{\partial H}{\partial x_2}, \frac{\partial H}{\partial x_3}\right) = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}, \qquad \left(\frac{\partial H}{\partial p_1}, \frac{\partial H}{\partial p_2}, \frac{\partial H}{\partial p_3}\right) = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}},$$

dostávame parciálne diferenciálne rovnice, popisujúce pohyb hmotného bodu, v tzv. *Hamiltonovom tvare*

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}, \qquad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}},$$

ktorý vyniká mimoriadnou symetriou a jednoduchosťou.

Podobne, okamžitý stav sústavy pohybujúcich sa n hmotných bodov je jednoznačne určený dvoma usporiadanými n-ticami: $(\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n)$ ich polohových vektorov a $(\boldsymbol{p}_1, \dots, \boldsymbol{p}_n)$ ich hybností, ktoré možno výhodne reprezentovať ako blokovú maticu

$$(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{P}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{p}_1 \\ \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{x}_n & \boldsymbol{p}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & x_{n3} & p_{n1} & p_{n2} & p_{n3} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times 6},$$

pričom jednotlivé zložky $x_{ij} = x_{ij}(t)$ matice $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}(t)$, resp. $p_{ij} = p_{ij}(t)$ matice $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}(t)$ predstavujú j-tu súradnicu polohy resp. hybnosti i-tej častice a sú zviazané vzťahom $p_{ij} = m_i(\mathrm{d}x_{ij}/\,\mathrm{d}t)$, kde m_i je jej hmotnosť. Teda okamžitý pohybový stav sústavy n hmotných bodov sme zachytili ako *jediný* od času závislý bod či vektor $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{P})$ v $6n$-rozmernom *stavovom priestore* $\mathbb{R}^{n\times 6}$, chápanom ako priamy súčin $2n$ exemplárov euklidovského priestoru $\mathbb{R}^3$, zodpovedajúcich zložkám matice $(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{p}_i) \in (\mathbb{R}^3)^{n\times 2}$, nazývaným tiež *zovšeobecnené súradnice* a *zovšeobecnené hybnosti* sústavy.

Celkom analogicky ako v prípade jedinej častice, i pre n hmotných bodov v konzervatívnom silovom poli (dokonca aj za podstatne všeobecnejších predpokladov) možno odvodiť, že ich pohyb sa riadi parciálnymi diferenciálnymi rovnicami

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{X}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{P}}, \qquad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{P}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{X}}.$$

ktoré nazývame *Hamiltonovými rovnicami.* Uvedené výrazy označujú matice

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{X}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\mathrm{d}x_{ij}}{\mathrm{d}t}\right)_{n\times 3}, \qquad \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{X}} = \left(\frac{\partial H}{\partial x_{ij}}\right)_{n\times 3},$$
$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{P}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\mathrm{d}p_{ij}}{\mathrm{d}t}\right)_{n\times 3}, \qquad \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{P}} = \left(\frac{\partial H}{\partial p_{ij}}\right)_{n\times 3},$$

a $H = H(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{P})$ je opäť Hamiltonova funkcia, vyjadrujúca celkovú energiu sústavy. Jej explicitný tvar je

$$H = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2m_i}\,\|\boldsymbol{p}_i\|^2 + \sum_{i=1}^{n} U_i(\boldsymbol{x}_i) + \sum_{i<j} U_{ij}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j),$$

kde prvý člen predstavuje súčet kinetických energií jednotlivých častíc, druhý súčet ich potenciálnych energií $U_i(\boldsymbol{x}_i)$ vo vonkajšom silovom poli a tretí súčet potenciálnych energií $U_{ij}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j)$ vzájomného pôsobenia i-tej a j-tej častice, ktoré (vďaka tretiemu Newtonovmu zákonu) závisia len od vektora $\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j$.

Číslo $3n$ udáva *počet stupňov voľnosti* danej sústavy. Keby sme miesto hmotných bodov uvažovali reálne pevné telesá, ktoré sa okrem translačného pohybu môžu navyše otáčať okolo ľubovoľnej osi, pohybový stav každého z nich by bol okrem polohy a hybnosti charakterizovaný ešte troma uhlami a troma momentmi hybnosti vzhľadom na dané súradné osi. Celá sústava n telies by tak mala nie $3n$ ale $6n$ stupňov voľnosti a jej okamžitý stav by predstavoval nejaký bod v $12n$-rozmernom priestore (maticu rozmeru $n \times 12$).

Na konkrétnej dimenzii stavového priestoru však teraz nezáleží. Náš výklad klasickej mechaniky totiž v tejto chvíli ukončíme a sústredíme sa len na stručné zhodnotenie prínosu jej matematického modelovania v mnohorozmernom priestore. Predstavme si, že by sme pohyb sústavy n hmotných bodov či telies popisovali v trojrozmernom priestore. Prišlo by nám rozpletať motanicu n trajektórií a pre každú z nich zvlášť sledovať časový vývoj rýchlosti resp. hybnosti, nehovoriac už o uhloch a momentoch. Namiesto toho sme celý tento spletenec zakódovali do *trajektórie jediného bodu* v priestore dimenzie $2d$, kde d je počet stupňov voľnosti celej sústavy.

Časový vývoj tejto trajektórie sa riadi Hamiltonovými rovnicami, to znamená, že na predpoveď budúceho alebo rekonštrukciu minulého stavu stačí poznať Hamiltonovu funkciu sústavy a jediný okamžitý stav – tzv. *počiatočnú podmienku*.

Teda opustením trojrozmerného fyzikálneho priestoru a využitím matematických priestorov vyšších dimenzií možno získať účinné prostriedky aj na popis dejov odohrávajúcich sa v pôvodnom trojrozmernom priestore. Rozbitie okov, ktorými nás pútajú tri rozmery fyzikálneho priestoru, a následný rozlet do vyšších dimenzií, vedený potrebami klasickej mechaniky, je dodnes plne nedoceneným titanským výkonom geniálneho intelektu Lagrangeovho. Bol to precedens, ktorý mal za následok, že sa matematika i fyzika v priestoroch ľubovoľných dimenzií postupne pevne a natrvalo usadili a zároveň tento ich „úlet“ plne legalizoval. Následné dotvorenie Lagrangeovej mechaniky Hamiltonom do uvedenej definitívnej podoby – akokoľvek matematicky elegantnej – už nenesie onú pečať oslobodzujúceho titanského činu.

17.5. Kvantová mechanika

Kvantová mechanika je teóriou mikrosveta – popisuje správanie atómov, elementárnych častíc (elektrónov, protónov, neutrónov atď.) a svetelných kvánt (fotónov), teda objektov, s ktorými ľudstvo nemalo a nemá nijakú priamu, bezprostrenú zmyslovú skúsenosť. V dôsledku toho si pre javy mikrosveta nemohlo vytvoriť náležité porozumenie ani jazykové pojmy, pomocou ktorých by sa o týchto javoch dalo primerane hovoriť. Zostávajú teda len analógie vypracované na základe klasických fyzikálnych predstáv a makroskopických prejavov atomárnych a subatomárnych objektov. Tieto prejavy sú však značne rôznorodé, ba priam protichodné, takže klasické fyzikálne teórie sú schopné adekvátne popísať vždy len istú ich stránku. Skĺbenie ich dielčich popisov do jedného logicky konzistentného celku sa v rámci klasickej fyziky ukazuje ako principiálne nemožné.

Ešte Newton si svetlo predstavoval ako prúd malých svetelných čiastočiek, t. j. korpuskúl. Rad javov, ako interferencia, lom, spektrálny rozklad, ohyb či polarizácia svetla však jasne svedčí o jeho vlnovej povahe. Preto svetlo dnes chápeme prevažne ako elektromagnetické vlnenie o vlnovej dĺžke z istého rozsahu. Ale napr. tzv. *fotoelektrický jav* (t. j. uvoľnenie elektrónov z atómov pôsobením svetla) sa v rámci vlnovej teórie svetla nepodarilo vysvetliť. Podarilo sa to až Einsteinovi pomocou Planckovej kvantovej hypotézy. Za tým účelom však bolo potrebné považovať svetlo za prúd diskrétnych energetických kvánt (s energiou $E = h\nu$, kde $h \approx 6,63 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$ je *Planckova konštanta* a ν je frekvencia príslušného svetelného žiarenia). Tieto svetelné kvantá dostali názov *fotóny*. Svetlo má teda – aspoň v rámci súčasných fyzikálnych predstáv – zároveň vlnovú i korpuskulárnu povahu. No čestnejšie by asi bolo povedať, že pravdepodobne nie je ani jedným ani druhým, len sa prejavuje raz ako vlnenie, raz ako prúd fotónov.

Naopak, elektróny si predstavujeme ako malé, hmotné, elektricky nabité guľôčky, obiehajúce okolo atómového jadra, podobne ako planéty okolo Slnka, alebo sa len tak voľne „poflakujúce“ v kovoch. Ale v mnohých prípadoch sa elektróny správajú ako vlnenie: napr. homogénny zväzok elektrónov sa pri prechode kryštalickou mriežkou, rovnako ako svetelný lúč, ohýba a vytvára difrakčný obrazec. Napokon i samotný planetárny model atómu je v rozpore s predstavou elektrónu ako nabitej častice. Elektrón pohybujúci sa po uzavretej krivke (teda premennou rýchlosťou) v elektrickom poli jadra by totiž musel vyžarovaním strácať energiu a rýchlo spadnúť na jadro. Väčšina atómov je však značne stabilných a vlnová teória elektrónu vie túto ich stabilitu vysvetliť. Podobne je tomu aj s inými elementárnymi časticami – tak ako svetlo sa raz prejavujú ako vlnenie, inokedy ako častice. Najskôr nebudú ani jedno ani druhé, presnejšie otázka, „zmenšením akého makroskopického javu sú naozaj“, zrejme vôbec nemá zmysel. Avšak práve vlnovo-korpuskulárny dualizmus kvantovej mechaniky umožňuje opísať a vysvetliť ich prejavy podstatne úplnejším spôsobom, než je v silách ktoréhokoľvek jedného z oboch hľadísk.

Fyzikálne experimenty majú v zásade štatistický charakter. Aj pri zabezpečení prakticky identických podmienok sa pri opakovaní pokusu objavuje istý rozptyl nameraných hodnôt pozorovaných veličín. V klasickej fyzike zvykneme malé odchýlky od priemeru pripisovať na vrub nepresnosti meracích prístrojov alebo si ich vykladáme ako dôsledky istých (malých) zmien v podmienkach pokusu, ku ktorým dochádza pri jeho opakovaní a ktorým nevieme zabrániť. Stále si zachovávame presvedčenie, že s „absolútne presnými“ prístrojmi a pri „absolútne identických“ podmienkach by rozptyl nameraných hodnôt bol nulový. Veľké odchýlky nás vedú k hypotézam o *skrytých parametroch*, t. j. neznámych fyzikálnych veličinách ktoré, spolu s veličinami fixovanými podmienkami pokusu, majú tiež vplyv na jeho výsledok. Neraz vedú takéto pokusy k objaveniu dovtedy skrytých parametrov a ich zahrnutiu do novoformulovaných fyzikálnych zákonov. Krátko povedané, ani značný rozptyl nameraných hodnôt pri klasických experimentoch nijako nenarúša našu dôveru v kauzalitu a matematický determinizmus zákonitostí fyzikálneho sveta.

Na atomárnej a subatomárnej úrovni však táto naša viera už ďalej neobstojí. Sám výsledok kvantovomechanického experimentu je vlastne prírodou uskutočneným štatistickým spracovaním (spriemerovaním) veľkého množstva individuálnych pokusov s identickými časticami. Napríklad difrakčný obrazec vytvorený homogénnym zväzkom elektrónov prechádzajúcich kryštálom nám vlastne premennou intenzitou zobrazuje čosi ako rozdelenie pravdepodobnosti dopadu jednotlivého elektrónu na rôzne miesta detekčnej plochy. Podobne, intenzity spektrálnych čiar nejakého atómu predstavujú, veľmi zjednodušene povedané, rozdelenie pravdepodobnosti pobytu jeho elektrónov na rozličných orbitách, t. j. energetických hladinách.

Doteraz všetky pokusy vysvetliť chovanie elementárnych častíc v rámci deterministickej paradigmy klasickej fyziky zlyhali. Napr. zavedenie skrytých parametrov do kvantovej mechaniky sa ukázalo matematicky nezlučiteľné s lokálnym charakterom teórie, čiže s podmienkou, ktorá – obrazne povedané – nepripúšťa okamžité (t. j. šíriace sa nekonečnou rýchlosťou) vzájomné pôsobenie častíc na diaľku. Navyše pokusy o spresnenie podmienok experimentu alebo výsledkov merania narazili na principiálne neprekonateľnú bariéru. Každé meranie totiž ovplyvňuje skúmaný jav. Tieto vplyvy možno na makroskopickej úrovni zanedbať, no na atomárnej a subatomárnej úrovni už hrajú významnú úlohu. Napríklad lúč svetla prakticky nijako neovplyvní pohyb letiaceho kameňa, no z hľadiska elektrónu, ktorého polohu zisťujeme pomocou svetelného žiarenia, je energia naň dopadajúcich fotónov nezanedbateľná. Čím presnejšie chceme fixovať polohu elektrónu, tým kratšiu vlnovú dĺžku λ, teda tým väčšiu frekvenciu $\nu = c/\lambda$, musí mať použité svetlo. Tým väčšia je aj energia $E = h\nu$ jednotlivého fotónu a jeho vplyv na „osvetlený“ elektrón. K týmto otázkam sa ešte vrátime, keď sa budeme zaoberať vzťahom meraných veličín a istých lineárnych operátorov v kvantovej mechanike.

Kvantová mechanika teda nepopisuje správanie elementárnych častíc „ako takých“, ale výsledky ich meraní, t. j. ich interakcií s vhodnými makroskopickými objektmi – meracími prístrojmi. Výsledkami takýchto meraní (okrem výnimočných prípadov) nie sú konkrétne hodnoty meraných veličín ale pravdepodobnostné rozdelenia, určujúce s akou pravdepodobnosťou nadobúda meraná veličina tú-ktorú hodnotu. Priraďovať objektom mikrosveta jednoznačne určené „objektívne“ hodnoty makroskopických veličín (ako poloha, hybnosť, rýchlosť, energia a pod.), ktoré by im prislúchali nezávisle od spôsobu merania, nemá podľa všeobecne prevládajúceho poňatia kvantovej mechaniky vôbec žiadny zmysel. V zhode s tým nie je úlohou kvantovej mechaniky predpovedať určité hodnoty a časový vývoj meraných veličín, ale predpovedať ich pravdepodobnostné rozdelenia a časový vývoj týchto rozdelení. Ten je podriadený *Schrödingerovej rovnici* (t. j. istej parciálnej diferenciálnej rovnici, ktorá je komplexným analógom vlnovej rovnice) pre tzv. *vlnovú funkciu* (t. j. určitý druh v čase premennej *amplitúdy pravdepodobnosti*).

Základné postuláty kvantovej mechaniky nemajú charakter v názorných pojmoch sformulovaných a experimentálne overených axióm. Práve naopak, niektoré z týchto princípov zo zásadných dôvodov ani experinentálne overiť nemožno. Kvantovej mechanike vlastne poriadne nerozumieme a diskusie o tej „pravej“ interpretácii jej matematického formalizmu sprevádzajú túto disciplínu od čias jej vzniku až podnes. Čitateľ by preto nemal k štúdiu tohto a nasledujúceho paragrafu pristupovať s príliš optimistickým očakávaním, že po ich prečítaní nebodaj kvantovej mechanike porozumie. Náš cieľ je ďaleko skromnejší. Autor tejto učebnice si bude považovať za úspech, ak sa mu podarí čitateľa presvedčiť, že komplexný skalárny súčin a unitárne priestory sú naozaj na niečo dobré, a nie sú to len výplody bezuzdnej fantázie zovšeobecňovania chtivých matematikov.

Kvantová mechanika totiž – a to je na nej asi to najzáhadnejšie – skvele funguje. Jej makroskopicky overiteľné predpovede sa plnia s udivujúcou presnosťou, siahajúcou zrejme ďalej než presnosť našich meraní. Práve na tomto fakte je založená naša dôvera v jej matematický formalizmus. Aplikácie kvantovej mechaniky sa dnes už stali neoddiskutovateľnou realitou nášho sveta. Pritom nemáme na mysli len tie najznámejšie príklady vojenského použitia, ako sú nukleárne zbrane, ani značne kontroverzné využitie v jadrovej energetike, ale tiež aplikácie ďaleko subtílnejšie, napr. lasery, masery, polovodiče, supravodivosť, diagnostické a terapeutické vyžitie rádioizotopov v medicíne, či známu uhlíkovú metódu určovania veku skamenelín a archeologických nálezov. V súčasnosti značnú pozornosť vzbudzuje zatiaľ prevažne v teoretickej rovine sa rozvíjajúca oblasť informatiky známa pod názvom *quantum computing*. Už teraz však možno povedať, že zostrojenie fungujúceho kvantového počítača by asi od základu zmenilo všeobecne uznávané názory na možnosti počítačov a, okrem iného, by si zrejme vynútilo fundamentálne prepracovanie používaných systémov kódovania, dekódovania a ochrany informácií.

17.6. Stavovové priestory v kvantovej mechanike

Matematický model kvantovej mechaniky sa zakladá na troch postulátoch, nazývaných *princípom superpozície*, *princípom amplitúd pravdepodobnosti* a *princípom pozorovateľných veličín*. V tomto paragrafe sa stručne zoznámime len s prvými dvoma; tretí z nich odložíme až na dobu, keď podrobnejšie preskúmame štruktúru a vlastnosti tzv. *samoadjungovaných lineárnych operátorov* v unitárnych priestoroch, ktorými hodláme tieto veličiny reprezentovať.

V analógii s klasickou mechanikou je každému kvantovomechanickému systému (ako napr. elektrón, atóm vodíka a pod.) priradený istý *stavový priestor* V, ktorého prvky nazývame *stavovými vektormi.* V tomto prípade však ide o unitárny priestor, v typickom prípade nekonečnorozmerný. Konečnorozmerné unitárne priestory sa vyskytujú len ako stavové priestory pevne lokalizovaných častíc – takým je napr. dvojrozmerný priestor spinových stavov elektrónu. V nekonečnorozmernom prípade navyše pristupuje požiadavka *úplnosti* priestoru V, ktorú tu nebudeme vyslovovať. Poznamenajme len, že má topologický charakter a v konečnorozmernom prípade je splnená automaticky. Dodajme, že úplný unitárny priestor sa nazýva aj (komplexný) *Hilbertov priestor.* Popri nich sa študujú aj reálne Hilbertove priestory t. j. úplné reálne vektorové priestory so skalárnym súčinom.

Stavy kvantovomechanického systému však nezodpovedajú priamo vektorom jeho stavového priestoru V, ale jeho jednorozmerným podpriestorom, t. j. priamkam $[\boldsymbol{u}]$, kde $\boldsymbol{0} \neq \boldsymbol{u} \in V$. Lineárne závislé nenulové vektory $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V$ tak reprezentujú ten istý stav. Uvedené stavy sa presnejšie nazývajú *čistými stavmi*; okrem nich sa vyskytujú ešte tzv. *zmiešané stavy*, ktorými sa tu ale nebudeme zaoberať. Každý (čistý) stav kvantovomechanického systému tak možno reprezentovať nejakým vektorom $\boldsymbol{u}$ jeho stavovového priestoru jednotkovej dĺžky $\|\boldsymbol{u}\| = 1$. Táto reprezentácia je jednoznačná až na tzv. *fázový činiteľ*, t. j. číslo tvaru $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vartheta} = \cos\vartheta + \mathrm{i}\sin\vartheta$, kde $0 \leq \vartheta < 2\pi$. Trochu nepresne nazývame (čistými) stavmi aj jednotkové vektory $\boldsymbol{u} \in V$.

Lineárnu kombináciu $a_1\boldsymbol{u}_1 + \ldots + a_n\boldsymbol{u}_n$ nazývame *superpozíciou* stavových vektorov $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n$ s koeficientmi $a_1, \ldots, a_n$. Podobne ako stavové vektory $\boldsymbol{u}_j$, ani koeficienty a_j nie sú určené jednoznačne a nemajú bezprostredný fyzikálny význam. Značne reduntantná reprezentácia stavov kvantovomechanického systému unitárnym priestorom V je vedená väčšmi potrebou zabezpečiť hladké fungovanie výpočtov, než snahou o „bezprostredné“ zobrazenie „skutočnosti“.

Predstavme si kvôli jednoduchosti hypotetickú elementárnu časticu, ktorá môže zaujímať n rôznych polôh v priestore, prípadne n energetických hladín, ktoré očíslujeme od 1 po n. Zdanlivo, t. j. z klasického hľadiska, by jej stavový priestor mal byť totožný s množinou $\{1, 2, \ldots, n\}$. No kvantová mechanika vo všeobecnosti neumožňuje určiť, v ktorom zo stavov $1, \ldots, n$ sa častica nachádza. Môže nám poskytnúť len pravdepodobnosti $p_1, \ldots, p_n$ výskytu v jednotlivých stavoch. Takéto pravdepodobnostné rozdelenie $\boldsymbol{p} = (p_1, \ldots, p_n)$, teda nový kandidát na to, čo by sme mohli nazvať stavom systému, leží vo vektorovom priestore $\mathbb{R}^n$. Takže sa zdá, že pri pravdepodobnostnej formulácii kvantovej mechaniky by sme mali vystačiť s reálnymi vektorovými priestormi (a s reálnym skalárnym súčinom). Komplexné unitárne priestory, v našom prípade to bude $\mathbb{C}^n$, sú potrebné na zachytenie vlnového charakteru kvantovomechanických javov. Pri zobrazení v $\mathbb{R}^n$ (či v inom reálnom vektorovom priestore), by boli všetky vlnenia nevyhnutne vo fáze, takže typické vlnové javy, ako napr. interferenciu, by nebolo možné zachytiť. Normovaný stavový vektor $\boldsymbol{u} = (u_1, \ldots, u_n) \in \mathbb{C}^n$ teda v sebe nesie informáciu nielen o pravdepodobnostnom rozdelení $\boldsymbol{p} = \left(|u_1|^2, \ldots, |u_n|^2\right)$ ale aj o fázach „pravdepodobnostnej vlny“, presnejšie *amplitúdy pravdepodobnosti*,

$$\boldsymbol{u} = \left(|u_1|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vartheta_1}, \ldots, |u_n|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vartheta_n}\right).$$

V typickom prípade sa stavový priestor kvantovomechanickej sústavy realizuje ako nekonečnorozmerný Hilbertov priestor istých komplexných funkcií definovaných na klasickom „fyzikálnom“ priestore sústavy. Napríklad stavový priestor V pre realistickejšiu časticu – elektrón „uväznený v krabici“ $\langle 0,1\rangle \times \langle 0,1\rangle \times \langle 0,1\rangle \subseteq \mathbb{R}^3$ – pozostáva z určitých „dostatočne dobre“ integrovateľných komplexných funkcií[1] $f\colon \langle 0,1\rangle^3 \to \mathbb{C}$ so skalárnym súčinom

$$\langle f,g\rangle = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 f(x,y,z)\,\overline{g}(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z.$$

Istotne netreba zvlášť podotýkať, že ide o nekonečnorozmerný priestor. Pravdepodobnosť, že sa elektrón s normovanou stavovou funciou f nachádza v nejakej (merateľnej) množine $A \subseteq \langle 0,1\rangle^3$, t. j. v istej časti krabice, je vyjadrená trojným integrálom

$$\iiint\limits_{(x,y,z)\in A} |f(x,y,z)|^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z.$$

Samotná funkcia f taká, že $\|f\|^2 = \langle f,f\rangle = 1$, predstavuje svojimi jednotlivými hodnotami $f(x,y,z)$ *hustotu amplitúdy pravdepodobnosti*, že sa daná častica nachádza v tom-ktorom bode (x,y,z) krabice $\langle 0,1\rangle^3$.

Ak sa kvantovomechanický systém, reprezentovaný stavovým priestorom V, nachádza v istom okamihu v stave $[\boldsymbol{u}]$, tak pravdepodobnosť, že ho vzápätí nájdeme v stave $[\boldsymbol{v}]$, sa rovná číslu

$$\frac{|\langle \boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle|^2}{\|\boldsymbol{u}\|^2\,\|\boldsymbol{v}\|^2} = \frac{|\langle \boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle|^2}{\langle \boldsymbol{u},\boldsymbol{u}\rangle\langle \boldsymbol{v},\boldsymbol{v}\rangle}.$$

Všimnite si, že uvedený výraz naozaj závisí len na stavoch $[\boldsymbol{u}]$, $[\boldsymbol{v}]$ a nie na samotných vektoroch $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$. Keďže ide o nezáporné reálne číslo, ktoré je podľa Cauchyho-Schwartzovej nerovnosti ≤ 1, môžeme ho oprávnene interpretovať ako pravdepodobnosť. Pre normované vektory $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ je táto pravdepodobnosť rovná priamo $|\langle \boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle|^2$, čo je vlastne druhá mocnina dĺžky kolmého priemetu $\mathrm{pr}_{[\boldsymbol{v}]}(\boldsymbol{u}) = \langle \boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle\boldsymbol{v}$ vektora $\boldsymbol{u}$ do podpriestoru $[\boldsymbol{v}]$. Samotné komplexné číslo $\langle \boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle$, nazývané *amplitúdou pravdepodobnosti* prechodu zo stavu $\boldsymbol{u}$ do stavu $\boldsymbol{v}$, nemá ani v tomto prípade bezprostredný fyzikálny význam. Umožňuje však elegantné výpočty.

Ak je stavový priestor V konečnorozmerný a $\boldsymbol{\gamma} = (\boldsymbol{w}_1,\dots,\boldsymbol{w}_n)$ je jeho ortonormálna báza, tak ľubovoľný vektor $\boldsymbol{u} = a_1\boldsymbol{w}_1 + \ldots + a_n\boldsymbol{w}_n$ z V je normovaný práve vtedy, keď pre jeho súradnice $a_j = \langle \boldsymbol{u},\boldsymbol{w}_j\rangle$ platí

$$|a_1|^2 + \ldots + |a_n|^2 = 1.$$

Pravdepodobnosť, že systém v stave $\boldsymbol{u}$ prejde do niektorého z bázických stavov $\boldsymbol{w}_j$, teda je $|a_j|^2$, a všetky tieto pravdepodobnosti dávajú v súčte jednotku. Ak aj vektor

[1] Komplexnú funkciu reálnej premmennej $h\colon \langle a,b\rangle \to \mathbb{C}$ možno písať v tvare $h = h_0 + \mathrm{i}h_1$, kde $h_0(x) = \mathrm{Re}\,h(x)$ a $h_1(x) = \mathrm{Im}\,h(x)$, čiže $h_0, h_1 : \langle a,b\rangle \to \mathbb{R}$. Potom h je integrovateľná (v akomkoľvek bližšie špecifikovanom zmysle) práve vtedy, keď h_0 aj h_1 sú integrovateľné, pričom $\int_a^b h(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b h_0(x)\,\mathrm{d}x + \mathrm{i}\int_a^b h_1(x)\,\mathrm{d}x$.

$\boldsymbol{v} = b_1\boldsymbol{w}_1 + \ldots + b_n\boldsymbol{w}_n$ je normovaný, tak pre amplitúdu pravdepodobnosti prechodu zo stavu $\boldsymbol{u}$ do stavu $\boldsymbol{v}$ dostávame

$$\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle = \sum_{j=1}^{n} \langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{w}_j \rangle \langle \boldsymbol{w}_j, \boldsymbol{v} \rangle = \sum_{j=1}^{n} a_j \bar{b}_j .$$

Inak povedané, amplitúda pravdepodobnosti prechodu $\boldsymbol{u} \to \boldsymbol{v}$ je súčtom súčinov amplitúd pravdepodobnosti prechodov $\boldsymbol{u} \to \boldsymbol{w}_j \to \boldsymbol{v}$ cez jednotlivé bázické stavy. Posledná formula umožňuje ďalekosiahle zovšeobecnenie.

Ľubovoľnú konečnú postupnosť $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{v})$ normovaných vektorov v stavovom priestore V nazývame *trajektóriou* dĺžky $k+1$ z $\boldsymbol{u}$ do $\boldsymbol{v}$. Táto postupnosť zrejme predstavuje obdobu klasickej trajektórie. Jej amplitúdou pravdepodobnosti rozumieme súčin $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{x}_1 \rangle \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \rangle \ldots \langle \boldsymbol{x}_{k-1}, \boldsymbol{x}_k \rangle \langle \boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{v} \rangle$, chápaný ako „komplexná pravdepodobnosť“ prechodu systému zo stavu $\boldsymbol{u}$ do stavu $\boldsymbol{v}$ po naznačenej trajektórii. Matematickou indukciou podľa k možno dokázať, že pre ľubovoľné stavy $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ a ortonormálne bázy $\boldsymbol{\gamma}_1 = (\boldsymbol{w}_{11}, \ldots, \boldsymbol{w}_{1n})$, ..., $\boldsymbol{\gamma}_k = (\boldsymbol{w}_{k1}, \ldots, \boldsymbol{w}_{kn})$ platí

$$\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle = \sum_{j_1, \ldots, j_k = 1}^{n} \langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{w}_{1j_1} \rangle \langle \boldsymbol{w}_{1j_1}, \boldsymbol{w}_{2j_2} \rangle \ldots \langle \boldsymbol{w}_{k-1 j_{k-1}}, \boldsymbol{w}_{kj_k} \rangle \langle \boldsymbol{w}_{kj_k}, \boldsymbol{v} \rangle .$$

Inak povedané, amplitúdu pravdepodobnosti prechodu $\boldsymbol{u} \to \boldsymbol{v}$ možno vypočítať ako súčet amplitúd pravdepodobnosti cez všetky trajektórie $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{w}_{1j_1}, \ldots, \boldsymbol{w}_{kj_k}, \boldsymbol{v})$ pevnej dĺžky $k+1$.

Na značne sofistikovanom nekonečnorozmernom zovšeobecnení poslednej formuly je založené vyjadrenie amplitúd pravdepodobnosti pomocou tzv. *Feynmanovho integrálu* cez trajektórie v stavovom priestore. Ako zaujímavosť poznamenajme, že hoci fyzici pri svojich výpočtoch Feynmanov integrál hojne a úspešne používajú, matematikom sa dodnes nepodarilo vypracovať jeho uspokojivú teóriu a zaradiť ho do teoreticko-množinového rámca súčasnej matematiky.