Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Jiří Černý

Hamiltonova funkce v mechanice klasické a kvantové

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce:	RNDr. Otakar Svítek, Ph.D.
Studijní program:	Fyzika
Studijní obor:	Obecná Fyzika

Praha 2016

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 Praze dne   Podpis autora

Název práce: Hamiltonova funkce v mechanice klasické a kvantové

Autor: Jiří Černý

Katedra: Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Otakar Svítek, Ph.D., Ústav teoretické fyziky

Abstrakt: Cílem této práce je prozkoumat Hamiltonovu funkci, její základní vlastnosti a její vztah k amplitudě přechodu. Derivace Hamiltonovy funkce podle polohy a času mají význam hybnosti a energie. Znalost Hamiltonovy funkce systému postačuje pro nalezení trajektorie popisující vývoj systému. Hamiltonovu funkci lze spočítat jako akci na konkrétní fyzikální trajektorii určené počátečním a koncovým časem a polohou, ale také z řešení dvou Hamiltonových-Jacobiho rovnic v proměnných počátečního času a polohy a koncového času a polohy. Ukazuje se, že v kvantové mechanice je amplituda přechodu mezi počátečním a koncovým stavem přímo úměrná komplexní exponenciále Hamiltonovy funkce. Práce s Hamiltonovou funkcí je předvedena na příkladech volné částice, harmonického oscilátoru a částečně také na poli centrální síly.

Klíčová slova: Hamiltonova, akce, amplituda, přechodu, trajektorie.

Title: Hamilton's function in classical and quantum mechanics

Author: Jiří Černý

Department: Institute of Theoretical Physics

Supervisor: RNDr. Otakar Svítek, Ph.D., Institute of Theoretical Physics

Abstract: In this work we will examine an on-shell action, its basic properties and its relation to transition amplitude. Derivatives of on-shell action with respect to position and time are equal to momentum and energy. On-shell action of a system is sufficient for determining the trajectory describing time evolution of the system. On-shell action can be computed as (off-shell) action of specific physical trajectory connecting initial position in initial time with final position in final time but it can also be found from solutions to two Hamilton-Jacobi equations, one in initial time and position variables and the other in final time and position variables. In quantum mechanics a transition amplitude is directly proportional to the complex exponential of the on-shell action. Work with on-shell action is demonstrated on examples such as free particle, harmonic oscillator and partly also on central force problem.

Keywords: on-shell, off-shell, action, transition, amplitude, trajectory.

Především bych chtěl poděkovat mému vedoucímu, Otakaru Svítkovi, za jeho čas strávený na konzultacích, za zodpovídání mých otázek, upozorňování na chyby a nedostatky, které jsem udělal při psaní této práce, a za trpělivost, kterou se mnou po celou dobu měl. Mé díky patří i ostatním přednášejícím a cvičícím z MFF, kteří zodpověděli některé mé dotazy z matematiky a kvantové mechaniky.

Obsah

Úvod **3**

1 Matematický úvod **7**
1.1 Variety . . . 7
1.1.1 Přechod mezi různými souřadnicemi na varietách . . . 13
1.2 Zobecněné souřadnice v $\mathbb{R}^n$ . . . 15
1.3 Pojem variace . . . 19

2 Fyzikální úvod **23**
2.1 Hamiltonův variační princip . . . 23
2.2 Hamiltonova mechanika . . . 27
2.3 Hamiltonova-Jacobiho rovnice . . . 30
2.4 Unitární evoluce v kvantové mechanice . . . 33

3 Hamiltonova funkce **37**
3.1 Vlastnosti Hamiltonovy funkce . . . 39
3.2 Variační odvození některých vlastností Hamiltonovy funkce . . . 50
3.3 Příklady . . . 52
3.3.1 Volná částice . . . 52
3.3.2 Harmonický oscilátor . . . 55
3.3.3 Pohyb v poli centrální síly . . . 58

4 Amplituda přechodu **61**
4.1 Amplituda přechodu pro volnou částici . . . 62
4.2 Amplituda přechodu pro obecnější hamiltoniány . . . 64

Závěr **73**

Seznam použité literatury **75**

Úvod

V klasické mechanice můžeme dynamiku systémů, částic apod. studovat a popisovat mnoha různými způsoby. Prvním přesnějším aparátem pro studium dynamiky těles byla trojice Newtonových zákonů pohybu a zákon gravitace, formulované Newtonem na konci 17. století. Spojením již dříve známých Keplerových zákonů pohybu planet s Galileiho "pozemskými" pozorováními zformuloval Isaac Newton teorii o dynamice všech těles pozemských i nebeských, která dodnes zůstává jednou z nejobecnějších klasických teorií. Spolu s Newtonem přichází také koncept síly jakožto původce veškeré dynamiky ve vesmíru. Newtonova teorie byla v následujících třech staletích mohutně rozvíjena a zdokonalována. Krátce po Newtonovy přicházejí v první polovině 18. století Johann Bernoulli a Jean d'Alembert s konceptem virtuálních posunutí a virtuální práce. Jedná se o první větší pokrok od dob Newtona, který si vyžadoval jistou míru abstrakce. D'Alembertův a Bernoulliův princip virtuální práce je dynamicky ekvivalentní Newtonovým rovnicím, ale umožňuje studovat mechaniku v novém světle. Velké množství pozdějších formulací mechaniky pak vytvořily rozsáhlou základnu, což se ukázalo býti klíčové pro přechod od klasické mechaniky k mechanice kvantové na jedné straně, a relativistické na straně druhé. V polovině 18. století přichází Pierre Maupertuis se svým principem. Maupertiův princip byl Maupertiem formulován pouze pro světelné paprsky. Pro světlo vyslovil, v polovině 17. století podobné tvrzení též Pierre de Fermat. Ve stejné době jako Maupertius formuloval Leonard Euler, pro dynamiku hmotných těles formálně stejný princip. Tento významný princip říká, že ta pravá fyzikální trajektorie, řekněme nějaké pohybující se částice s okamžitou hybností mv, je taková trajektorie, která minimalizuje funkcionál

$$\int mv\, ds$$

v němž integrujeme hybnost mv částice přes všechny možné dráhy s. Přestože se Maupertiův princip na scéně fyziky objevil poměrně brzo ("pouhých" 50 let po Newtonovy), byl nesmírně důležitý a převratný pro pozdější vývoj mechaniky. Tvoří totiž předvoj Hamiltonova variačního principu. Významný krok v klasické mechanice učinil, ke konci 18. století (téměř přesně 100 let po Newtonovy), Joseph-Louise Lagrange. Lagrange odvodil své Lagrangeovy rovnice 1. druhu, které jsou pořád ještě ideově velmi blízké Newtonovým rovnicím, a také Lagrangeovy rovnice 2. druhu (známé též jako Eulerovy-Lagrangeovy rovnice). Tyto rovnice přináší nový pohled na klasickou dynamiku, namísto sil totiž pracují s potenciální a kinetickou energií těles. Zavádí přitom novou funkci, lagrangián, rovnou rozdílu kinetické a potenciální energie a ukazuje, že právě tento rozdíl obou energií v sobě obsahuje "zakódovanou" informaci o dynamickém vývoji systémů. V první polovině 19. století formuloval Rowan Hamilton svůj princip nejmenší akce, který je podobný tomu Maupertiovu, ale namísto hybnosti přes dráhu se integruje rozdíl kinetické a potenciální energie (tedy lagrangián) přes čas. Tento integrál nazýváme akcí. Stejně jako u Maupertia pak fyzikální trajektorie minimalizují, nebo obecně extrémalizují, tuto akci. O 10 let později odvozuje Hamilton své kanonické rovnice, které na rozdíl od Lagrangeova rozdílu kinetické a potenciální energie, "extrahují" esenciální skryté informace o dynamickém vývoji systémů z tzv. hamiltoniánu, což je součet kinetické a potenciální energie. Hamiltonův postup je též doprovázen přechodem od konfiguračního prostoru všech možných poloh systému, k (dvakrát tak velkému co se dimenze týče) fázovému prostoru všech poloh a hybností systému. Krátce nato odvodil Hamilton důležitou diferenciální rovnici, Hamiltonovu-Jacobiho rovnici, popisující dynamiku systému. Hamilton tuto rovnici odvodil nejprve v souvislosti s geometrickou optikou. Mechanickou interpretaci Hamiltonovy-Jacobiho rovnice pak vytvořil Carl Jacobi. Hamiltonovy a Lagrangeovy rovnice jsou obyčejné diferenciální rovnice 1. a 2. řádu. Hamiltonova-Jacobiho rovnice je naproti tomu parciální diferenciální rovnice 1. řádu, a řeší se tedy hůře. Velký přínos Hamiltonovy-Jacobiho rovnice nebyl ani tak v klasické mechanice, ale především při přechodu do kvantové mechaniky. Roku 1925 tak učinil Ervin Schrödinger, když užitím eikonálové aproximace tuto rovnici zobecnil na rovnici, popisující evoluci kvantových stavů.

V této práci se zaměřuji na prostudování základních vlastností tzv. Hamiltonovy funkce, a stručně také o jejím významu v mechanice kvantové. Hamiltonova funkce, je na rozdíl od hamiltoniánu (součet kinetické a potenciální energie), funkcí čtyř parametrů, počátečního času, počáteční polohy, koncového času a koncové polohy, a její hodnotou je hodnota akce na fyzikální trajektorii, procházející počáteční polohou v počátečním čase a koncovou polohou v koncovém čase. Zatímco hamiltonián udává celkovou energii systému, Hamiltonova funkce má rozměr lagrangiánu vynásobeného časem, tedy energie krát čas. V angličtině se pro Hamiltonovu funkci užívá termín "on-shell action", tedy "akce na slupce", zatímco klasická akce se nazývá "off-shell action", tj. "akce mimo slupku". Tyto anglické termíny velmi dobře vystihují podstatu rozdílu mezi akcí a Hmiltonovou funkcí. Akci totiž počítáme přes obecné trajektorie v celé určité oblasti konfiguračního prostoru, zatímco Hamiltonovu funkci počítáme pouze přes skutečné, fyzikální trajektorie, splňující námi zadané okrajové podmínky, proto také termín off-shell a on-shell. Další zmatení pojmů vzniká mezi Hamiltonovou funkcí, Hamiltonovou principiální funkcí a Hamiltonovou charakterictickou funkcí. Jak bude názorně předvedeno v sekci 3.3 Příklady, Hamiltonovy principiální a charakteristické funkce mají stejný rozměr jako Hamiltonova funkce. Jako Hamiltonova principiální funkce se označuje řešení Hamiltonovy-Jacobiho rovnice. U systémů, jejichž celková energie E se s časem nemění, lze pak řešení Hamiltonovy-Jacobiho rovnice, tedy Hamiltonovu principiální funkci, napsat jako součet Hamiltonovy charakteristické funkce a faktoru $\pm Et$. Abychom se vyhnuly zmatení pojmů, budeme nadále používat pouze termíny hamiltonián a Hamiltonova funkce. Ty budou ještě jednou, v dalším textu dobře definovány.

V této práci budeme tématicky sledovat kapitolu 2, sekce 2.1 a 2.2 knihy [1] *Covariant Loop Quantum Gravity*, od autorů Carla Rovelliho a Francescy Vidotto. Sekce 2.1 knihy [1] velmi stručně pojednává právě o Hamiltonově funkci, a sekce 2.2 pak, též velmi stručně o amplitudě přechodu, která s Hamiltonovou funkcí souvisí. Hamiltonovu funkci, její význam v klasické mechanice, a nejdůležitější vlastnosti budeme rozebírat v kapitole 3 této práce. V kapitole 4 této práce pak budeme studovat souvislost mezi Hamiltonovou funkcí a amplitudou přechodu, a ukážeme, že je amplituda přechodu úměrná exponenciále Hamiltonovy funkce. Takovýto vztah Hamiltonovy funkce a amplitudy přechodu dává Hamiltonově funkci velký význam. Jak bude níže patrné na konkrétních příkladech Hamiltovových funkcí pro různé fyzikální systémy, řešit dynamiku systému pomocí Hamiltonovy funkce je velmi nevýhodné. Hamiltonovu funkci je totiž, i pro poměrně jednoduché systémy obtížné spočítat. Pokud bychom tedy chtěli studovat klasickou dynamiku nějakého systému, bude pro nás výrazně jednodušší, a celkově efektivnější použít Lagrangeovy rovnice, popřípadě Hamiltonovy kanonické rovnice, které se řeší výrazně lépe. Význam Hamiltonovy funkce se tedy neprojevuje ani tak v klasické mechanice, ale až v mechanice kvantové. Amplitudu přechodu totiž můžeme jednoduše spočítat z její definice jen pro velmi omezené množství systémů, jako je například volná částice. Pro jednodimenzionální harmonický oscilátor je výpočet amplitudy přechodu z definice již podstatně složitější. Naproti tomu lze Hamiltonovu funkci harmonického oscilátoru spočítat poměrně snadno. Z těchto důvodů má pak smysl studovat Hamiltonovu funkci v klasické mechanice.

V úvodních kapitolách 1 a 2 zavedeme základní matematické a fyzikální pojmy, se kterými budeme dále pracovat. Jedná se o pojmy z diferenciální geometrie, které se zde v této práci mohou zdát poněkud nadbytečné, budou se nám však hodit při zavedení a pochopení konceptu zobecněných souřadnic. Důležitým prostředkem pak bude variace funkcionálů kterou stručně nastíníme v sekci 1.3 první kapitoly. V kapitole 2 pak ozřejmíme nejdůležitější pojmy klasické mechaniky jako je Hamiltonův princip nejmenší akce, Hamiltonovskou mechaniku a Hamiltonovu-Jacobiho teorii. Postupy zde zavedené se pak budou často uplatňovat při studiu Hamiltonovy funkce.

1. Matematický úvod

1.1 Variety

Tato sekce byla v mnohém inspirována textem [2] *Lecture Notes on Differential Geometry for Physicists 2011* od Amitabhi Lahiriho. Převzato odtud bylo především užitečné značení. Některé úvodní definice související s topologickými prostory byly v pozměněné podobě převzaty z [3] od Martina Klazara.

Mějme nějakou množinu prvků X. Množinu (systém) všech podmnožin množiny X označme jako $\mathscr{P}(X)$ a nazývejme ji potenční množinou množiny X. Systém $\mathscr{A}$ podmnožin množiny X, neboli $\mathscr{A} \in \mathscr{P}(X)$, se nazve *topologií* na množině X, pokud $\mathscr{A}$ splňuje:

(i) $\emptyset$, $X \in \mathcal{A}$.

(ii) Pokud jsou $B_\xi \in \mathscr{A}$ pro $\xi \in I$, kde I je libovolná (libovolně veliká) množina indexů, pak je i $\left(\bigcup_{\xi \in I} B_\xi\right) \in \mathscr{A}$. Libovolné sjednocení libovolných podsystémů systému $\mathscr{A}$ tedy leží v $\mathscr{A}$.

(iii) Pokud jsou $B_1, B_2 \in \mathscr{A}$, pak je i $B_1 \cap B_2 \in \mathscr{A}$. Libovolný konečný průnik libovolných podsystémů systému $\mathscr{A}$ tedy leží v $\mathscr{A}$.

Topologický prostor je dvojice $(X, \mathscr{A})$, kde systém množin $\mathscr{A}$ je topologií na X.

Prvky topologie $\mathscr{A}$ se nazývají *otevřené množiny.*

Množina $U \subset X$ se nazve *uzavřená*, pokud je množina $X \setminus U$ otevřená. Pro obecnou množinu A definujeme uzávěr množiny A jako nejmenší uzavřenou množinu $\mathsf{cl}(A) \subset X$ takovou, že $A \subset \mathsf{cl}(A)$. Vnitřek obecné množiny A definujeme jako největší množinu $\mathsf{int}(A) \subset X$ takovou, že $\mathsf{int}(A) \subset A$. Hranici obecné množiny A definujeme jako množinu $\partial A \equiv \mathsf{cl}(A) \setminus \mathsf{int}(A)$.

Pro libovolný bod $p \in X$ definujeme *okolí bodu* p jako libovolnou otevřenou množinu $U \subset X$ takovou, že $p \in \mathsf{int}(U)$.

Bází topologického prostoru $(X, \mathscr{A})$ rozumíme systém $\mathscr{B} \subset \mathscr{A}$ otevřených množin $B \in \mathscr{A}$ takový, že každou libovolnou (otevřenou) množinu $A \in \mathscr{A}$ lze zapsat jako sjednocení $A = \bigcup_{B \in \mathscr{B}} B$ nějakých množin $B \in \mathscr{B}$.

Topologický prostor $(X, \mathscr{A})$ je *hausdorffovský*, pokud pro libovolné body a, $b \in X$, $a \neq b$ existují okolí U a V, kde $a \in U$, $b \in V$, takové, že $U \cap V = \emptyset$.

Mějme dva topologické prostory $(X, \mathscr{A})$ a $(Y, \mathscr{B})$, a zobrazení $f : X \longrightarrow Y$. Zobrazení f nazveme spojité, pokud pro libovolnou množinu $V \in \mathscr{B}$ platí, že $f^{-1}(V) \equiv \{p \in X\,;\, f(p) \in V\} \in \mathcal{A}$. Zobrazeni f nazveme spojité v bodě $p \in X$, pokud pro libovolnou množinu $V \subset Y$, $V \in \mathscr{B}$ takovou, že $f(p) \in V$ existuje množina $U \subset X$, $U \in \mathscr{A}$ taková, že $p \in U$, a platí $f(U) \subset V$, $f(U) \in \mathscr{B}$. Zobrazení f nazveme spojité na $W \subset X$, pokud je spojité ve všech bodech $p \in W$.

Topologický prostor $(M, \mathscr{M})$ nazveme *n-dimenzionální varietou*, pokud :

(i) Topologický prostor $(M, \mathscr{M})$ je hausdorffovský.

(ii) Existuje spočetná báze topologického prostoru $(M, \mathscr{M})$.

(iii) Pro libovolný bod $p \in M$ existuje otevřená množina $U \subset M$, $U \in \mathscr{M}$ taková, že $p \in U$ (tj. množina U je okolím bodu p), a existuje zobrazení

$$\psi : U \longrightarrow V \subset \mathbb{R}^n \,, \quad p \longmapsto (y^1, \ldots, y^n) \tag{1.1}$$

které je spojité [1], vzájemně jednoznačné, a k němu inverzní zobrazení

$$\psi^{-1} : V \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow U \,, \quad (y^1, \ldots, y^n) \longmapsto p \tag{1.2}$$

je spojité[2].

Souřadnicové zobrazení ψ přiřazuje každému bodu $p \in U \subset M$ n-tici reálných čísel $\boldsymbol{y}(p) \equiv \big(y^1(p), \ldots, y^n(p)\big) \in V \subset \mathbb{R}^n$, kde $y^i(p) \in V_i \subset \mathbb{R}$ je i-tá (obecná) souřadnice příslušející bodu p, a kde množina $V = V_1 \times \ldots \times V_n$ je obraz množiny U, tj. $V = \psi(U)$.

Pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$ ještě definujme zobrazení

$$\psi^i : M \longrightarrow V \subset \mathbb{R} \,, \quad p \longmapsto \psi^i(p) = y^i \tag{1.3}$$

které bodu $p \in M$ přiřazuje i-tou složku jeho obrazu $\boldsymbol{y} = (y^1, \ldots, y^n)$ v $\mathbb{R}^n$. Souřadnicová zobrazení ψ lze pak psát jako n-tice funkcí

$$\psi(p) = \big(\psi^1(p), \ldots, \psi^n(p)\big) = (y^1, \ldots, y^n) \,. \tag{1.4}$$

Dvojice (U, ψ) se nazývá *mapa* na varietě. Na libovolné varietě $(M, \mathscr{M})$ pak máme zavedený systém map (U_α, ψ_α), $\alpha \in A$ (A je libovolná množina indexů), takový, že množiny U_α pokrývají celou varietu $(M, \mathscr{M})$, tj. $M = \bigcup_{\alpha \in A} U_\alpha$. Množina $\{(U_\alpha, \psi_\alpha)\,;\, \alpha \in A\}$ všech map na varietě M se nazývá *atlas map*.

Uvažujme dvě různé mapy (U_α, ψ_α) a (U_β, ψ_β) na varietě $(M, \mathcal{M})$ takové, že $U_\alpha \cap U_\beta \neq \emptyset$, a volme bod $p \in U_\alpha \cap U_\beta$. Obrazy bodu p označme jako $\psi_\alpha(p) = (y^1, \ldots, y^n) \equiv \boldsymbol{y}$ a $\psi_\beta(p) = (z^1, \ldots, z^n) \equiv \boldsymbol{z}$, kde $\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n$, a definujme množiny $V_\alpha \equiv \psi_\alpha(U_\alpha) \subset \mathbb{R}^n$, a analogicky $V_\beta \equiv \psi_\beta(U_\beta) \subset \mathbb{R}^n$. Zřejmě je $\boldsymbol{y} \in V_\alpha$ a $\boldsymbol{z} \in V_\beta$. Protože bod p leží jak v množině U_α, tak v množině U_β, platí pak $\psi_\beta^{-1}(\boldsymbol{z}) = p = \psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y})$, a tedy $\boldsymbol{z} = \psi_\beta(\psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y}))$. Na množině $\psi_\alpha(U_\alpha \cap U_\beta) \subset \mathbb{R}^n$ tedy definujeme tzv. *překryvové zobrazení* jako zobrazení

$$\psi_\beta \circ \psi_\alpha^{-1} \;:\; \psi_\alpha(U_\alpha \cap U_\beta) \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \psi_\beta(U_\alpha \cap U_\beta) \subset \mathbb{R}^n \,. \tag{1.5}$$

[1] Spojitost je zde chápána tak, že pro $\forall p \in U$, a pro libovolnou množinu $W \subset \psi(U) \subset \mathbb{R}^n$ takovou, že $\psi(p) \in W$ existuje množina $A \subset U$, $A \in \mathcal{M}$ taková, že $p \in A$, a platí $\psi(A) \subset W$, $\psi(A) \in \mathscr{M}$.

[2] Obecné zobrazení ψ, které je spojité, vzájemně jednoznačné a má spojitou inverzi se běžně označuje jako *homeomorfismus*.

Z definice variet víme, že jsou obě zobrazení ψ_α a ψ_β spojitá a vzájemně jednoznačná na množinách U_α a U_β, a jejich inverze ψ_α^{-1} a ψ_β^{-1} jsou spojité a vzájemně jednoznačné na množinách V_α a V_β. Složené zobrazení $\psi_\beta \circ \psi_\alpha^{-1}$ je pak na množině $\psi_\alpha(U_\alpha \cap U_\beta) \subset V_\alpha$ spojité a vzájemně jednoznačné, a také inverzní překryvové zobrazení $\psi_\alpha \circ \psi_\beta^{-1} = (\psi_\beta \circ \psi_\alpha^{-1})^{-1}$ je pak spojité a vzájemně jednoznačné na množině $\psi_\beta(U_\alpha \cap U_\beta) \subset V_\beta$. Množiny $\psi_\alpha(U_\alpha \cap U_\beta)$ a $\psi_\beta(U_\alpha \cap U_\beta)$ jsou tedy izomorfní.

Varieta $(M, \mathscr{M})$ se nazve diferencovatelnou varietou třídy C^k pokud jsou všechna překryvová zobrazení $\psi_\beta \circ \psi_\alpha^{-1}$ (pro $\forall \alpha, \beta \in A$) vzájemně jednoznačná, k-krát spojitě diferencovatelná, a také $\psi_\alpha \circ \psi_\beta^{-1}$ je k-krát spojitě diferencovatelné[3]. Varieta $(M, \mathscr{M})$ se nazve hladkou varietou, pokud je diferencovatelnou varietou třídy C^∞. Variety $(M, \mathscr{M})$ budeme nadále zkráceně označovat jako $\mathcal{M} \equiv (M, \mathscr{M})$, a otevřené podmnožiny $U \subset M$, $U \in \mathscr{M}$ variet pak budeme obdobně označovat jako $\mathcal{U} \equiv U$.

Křivkou na varietě $\mathcal{M}$ nazveme zobrazení

$$\gamma : I \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathcal{M}\,, \quad t \longmapsto \gamma(t)\,, \tag{1.6}$$

které je spojité[4] na uzavřeném intervalu $I \subseteq \mathbb{R}$.

Křivka γ na varietě $\mathcal{M}$ tak každému libovolnému bodu $t \in I$ přiřazuje bod $p = \gamma(t) \in \mathcal{M}$ na varietě. Číslo $t \in I$ je parametr křivky γ, a množina $\Gamma = \gamma(I)$ se nazývá grafem (obrazem) křivky γ na varietě.[5]

Mějme nějaký interval $I \subset \mathbb{R}$ a libovolnou křivku $\gamma : I \to \mathcal{M}$ na varietě $\mathcal{M}$. Volme nějaký libovolný bod $p \in \gamma(I) \subset \mathcal{M}$. Z definice variet existuje na varietě $\mathcal{M}$ mapa $(\mathcal{U}_\alpha, \psi_\alpha)$ taková, že $\mathcal{U}_\alpha$ je okolí bodu p a ψ_α je homeomorfismus mezi $\mathcal{U}_\alpha$ a $\mathbb{R}^n$. Definujme interval $I_\alpha \equiv \{t \in I\,;\, \gamma(t) \in \mathcal{U}_\alpha\}$. Z definice I_α zřejmé, že $I_\alpha \subset I$, $\gamma(I_\alpha) \subset \mathcal{U}_\alpha$ a $p \in \gamma(I_\alpha)$. Zobrazení γ je spojité na I, tedy i na $I_\alpha \subset I$, a zobrazení ψ_α je spojité na $\mathcal{U}_\alpha$, a je tedy spojité i na $\gamma(I_\alpha) \subset \mathcal{U}_\alpha$. Celkově je pak složené zobrazení $\psi_\alpha \circ \gamma$ spojité na intervalu $I_\alpha \subset \mathbb{R}$. Toto zobrazení

$$\psi_\alpha \circ \gamma : I_\alpha \longrightarrow \mathbb{R}^n\,, \quad t \longmapsto \psi_\alpha\left(\gamma(t)\right)\,, \tag{1.7}$$

které libovolnému parametru $t \in I_\alpha \subset \mathbb{R}^n$ přiřazuje bod

$$\psi_\alpha\big(\gamma(t)\big) \;=\; \Big(\psi_\alpha^1\big(\gamma(t)\big)\,, \ldots,\, \psi_\alpha^n\big(\gamma(t)\big)\Big) \;=\; (y^1, \ldots,\, y^n) \,\in\, \mathbb{R}^n \tag{1.8}$$

je pak křivkou v $\mathbb{R}^n$.[6] Je-li složené zobrazení $\psi_\alpha \circ \gamma \in C^k(I_\alpha)$, nazveme pak křivku γ k-krát diferencovatelnou na I_α. Křivku γ nazveme hladkou na I_α, je-li zobrazení

[3]Zobrazení je třídy C^k, pokud je k-krát spojitě diferencovatelná. Zobrazení, která jsou vzájemně jednoznačná, třídy C^k, a jejich inverze je též třídy C^k se nazývají C^k difeomorfismy.

[4]Spojitost je zde opět chápána tak, že pro libovolnou množinu $G \subset \Gamma$ je $\gamma^{-1}(G) \in I$, kde $\gamma^{-1}(G) \equiv \{t \in I\,;\, \gamma(t) \in G\}$.

[5]Křivka na varietě $\mathcal{M}$ se někdy definuje také jako množina $\Gamma \subset \mathcal{M}$, ke které existuje uzavřený interval $I \subseteq \mathbb{R}$ a spojité zobrazení $\gamma : I \longrightarrow \mathcal{M}$ tak, že $\gamma(I) = \Gamma$. V tomto případě se pak dvojice $(\gamma,\, I)$ nazývá parametrizací křivky Γ.

[6]Křivkou v $\mathbb{R}^n$, definovanou na intervalu $J \subset \mathbb{R}$ totiž obecně rozumíme zobrazení $\kappa : J \longrightarrow \mathbb{R}^n$, které je spojité na intervalu J, a které libovolnému bodu $t \in J$ přiřazuje bod $\kappa(t) = (\kappa^1(t), \ldots,\, \kappa^n(t)) \in \mathbb{R}^n$.

$\psi_\alpha \circ \gamma$ hladké, tj. je-li $\psi_\alpha \circ \gamma \in C^\infty(I_\alpha)$.

Funkce na varietě $\mathcal{M}$ je zobrazení

$$f : \mathcal{M} \longrightarrow \mathbb{R}\,, \quad p \longmapsto f(p)\,, \tag{1.9}$$

které bodu $p \in \mathcal{M}$ přiřazuje reálné číslo $f(p) \in \mathbb{R}$.

Volme nějaký libovolný bod $p \in \mathcal{M}$, kde $\mathcal{M}$ je nějaká varieta, a najděme mapu $(\mathcal{U}_\alpha, \psi_\alpha)$, takovou, že $p \in \mathcal{U}_\alpha$. Označme $V_\alpha \equiv \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n\,;\ \psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y}) \in \mathcal{U}_\alpha\}$. Pokud máme na varietě $\mathcal{M}$ definovanou nějakou funkci f, pak můžeme sestrojit zobrazení

$$f \circ \psi_\alpha^{-1} : V_\alpha \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}\,, \quad \boldsymbol{y} \longmapsto f(\psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y})) \in \mathbb{R}\,, \tag{1.10}$$

které představuje (skalární) funkci v $\mathbb{R}^n$. Funkce $f \circ \psi_\alpha^{-1}$ odpovídá vyjádření funkce f v $\mathbb{R}^n$. Řekneme, že je $f \in C^k$, tj. k-krát spojitě diferencovatelná, v bodě $p \in \mathcal{U}_\alpha$, pokud je funkce $f \circ \psi_\alpha^{-1} \in C^k$ v bodě $\boldsymbol{y} = \psi_\alpha(p) \in \mathbb{R}^n$.

Zaveďme nyní vektory na varietách. Varieta jakožto množina bodů obecně není vektorovým prostorem. Problémem je především to, že na varietách není obecně jasné jak body variety sčítat a násobit skalárem. Okolí každého bodu variety lze ale spojitě a vzájemně jednoznačně zobrazit do prostoru $\mathbb{R}^n$, který už vektorovým prostorem je. Sčítání a násobení reálných n-tic je již dobře definováno.

Uvažujme nejprve nějakou n-rozměrnou diferencovatelnou varietu $\mathcal{M}$ třídy C^k, kde $k \geq 1$. Mějme dále nějakou C^k funkci $f : \mathcal{M} \longrightarrow \mathbb{R}$, a C^k křivku $\gamma : I \subset \mathbb{R} \longrightarrow \mathcal{M}$ na varietě $\mathcal{M}$. Složené zobrazení

$$f \circ \gamma : I \subset \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}\,, \quad t \longmapsto f\big(\gamma(t)\big) \in \mathbb{R}\,. \tag{1.11}$$

je pak C^k funkcí z $\mathbb{R}$ do $\mathbb{R}$.

Vyberme nějakou mapu $(\mathcal{U}_\alpha, \psi_\alpha)$ na varietě $\mathcal{M}$ takovou, že f je definováno na $\mathcal{U}_\alpha$ a $\gamma(I) \cap \mathcal{U}_\alpha \neq \emptyset$. Označme $V_\alpha \equiv \psi_\alpha(\mathcal{U}_\alpha) \subset \mathbb{R}^n$ a $I_\alpha \equiv \{t \in I\,;\ \gamma(t) \in \mathcal{U}_\alpha\} \subset I$. Zřejmě platí $\psi_\alpha \circ \psi_\alpha^{-1} = \psi_\alpha^{-1} \circ \psi_\alpha = \mathsf{id}$, kde id je identické zobrazení. Složené zobrazení (1.11) si pak rozepíšeme jako $f \circ \gamma = (f \circ \psi_\alpha^{-1}) \circ (\psi_\alpha \circ \gamma)$, čímž dostáváme složení dvou C^k zobrazení

$$f \circ \psi_\alpha^{-1} \ : \ V_\alpha \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}\,, \tag{1.12}$$

$$\psi_\alpha \circ \gamma \ : \ I_\alpha \subset \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^n\,, \tag{1.13}$$

kde část $f \circ \psi_\alpha^{-1}$, viz. (1.10), představuje vyjádření funkce f v $\mathbb{R}^n$, a část $\psi_\alpha \circ \gamma$, viz (1.7), zase představuje vyjádření křivky γ v $\mathbb{R}^n$.

Volme libovolný bod $p \in \mathcal{U}_\alpha$, a položme $p = \gamma(t)$ pro nějaké $t \in I_\alpha \subset \mathbb{R}$ a $\boldsymbol{y} = \psi_\alpha(p) \in V_\alpha \subset \mathbb{R}^n$. Derivace složeného zobrazení $f \circ \gamma = (f \circ \psi_\alpha^{-1}) \circ (\psi_\alpha \circ \gamma)$ v bodě $t \in I_\alpha$ je pak

$$\begin{aligned} \frac{d\,(f \circ \gamma)}{dt}(t) \ &= \ \frac{d\,(f \circ \psi_\alpha^{-1}) \circ (\psi_\alpha \circ \gamma)}{dt}(t) \ = \ \frac{d}{dt}\, f \circ \psi_\alpha^{-1}\big(\boldsymbol{y}(\gamma(t))\big) \ = \\ &= \ \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial\,(f \circ \psi_\alpha^{-1})}{\partial y^k}(\boldsymbol{y}) \cdot \frac{d\,(\psi_\alpha^k \circ \gamma)}{dt}(t)\,, \end{aligned} \tag{1.14}$$

Tečný vektor ke křivce γ v bodě $p = \gamma(t)$ pak definujeme jako zobrazení

$$\dot{\gamma}_p \,:\, C^k(\mathcal{M}) \longrightarrow \mathbb{R}\,, \quad f \longmapsto \frac{d\,(f\circ\gamma)}{dt}(t)\,. \tag{1.15}$$

které libovolné C^k funkci f na varietě $\mathcal{M}$ přiřazuje derivaci $f\circ\gamma$ v bodě t.

Tečný prostor $T_p\mathcal{M}$ variety $\mathcal{M}$ v bodě $p\in\mathcal{M}$ pak definujeme jako množinu

$$T_p\mathcal{M} \equiv \Big\{ \boldsymbol{v}_p \;;\; \exists\,\gamma:\mathbb{R}\to\mathcal{M},\, \exists\, t\in\mathbb{R}:\gamma(t)=p \;\&\; \boldsymbol{v}_p = \dot{\gamma}_p \Big\}\,, \tag{1.16}$$

nebo-li jako prostor všech tečných vektorů v bodě p.

Uvažujme ještě, že budeme mít jinou mapu $(U_\beta,\,\psi_\beta)$ na varietě M, opět takovou, aby bylo f je definováno na U_β, $\gamma(I)\cap U_\beta \neq \emptyset$, a navíc $U_\alpha\cap U_\beta\neq\emptyset$. Zřejmě platí $(f\circ\psi_\beta^{-1})\circ(\psi_\beta\circ\gamma) = (f\circ\psi_\alpha^{-1})\circ(\psi_\alpha\circ\gamma)$. Derivace (1.14) tedy nezávisí na volbě konkrétní mapy $(U_\alpha,\,\psi_\alpha)$. Na volbě konkrétní mapy pak nezávisí ani tečný prostor $T_p\mathcal{M}$.

Volme tedy libovolný bod $p\in\mathcal{M}$ na n-rozměrné diferencovatelné C^k varietě $\mathcal{M}$. Mějme dále nějakou C^k funkci $f:\mathcal{M}\longrightarrow\mathbb{R}$ definovanou na okolí bodu p, a nějakou C^k křivku $\gamma: I\subset\mathbb{R}\longrightarrow\mathcal{M}$, procházející bodem p, tj. existuje $t\in I$ takové, že $p=\gamma(t)$. Z definice variet existuje pro zvolený bod p nějaká mapa $(\mathcal{U},\,\psi)$, kde $p\in\mathcal{U}\subset\mathcal{M}$, a $\psi(p)=\boldsymbol{y}\in\psi(\mathcal{U})\subset\mathbb{R}^n$. Potom bude $f\circ\psi^{-1}(\boldsymbol{y})$ souřadnicové vyjádření funkce f v $\mathbb{R}^n$, a $\psi\circ\gamma(t) = \Big(\psi^1\big(\gamma(t)\big)\,,\ldots,\,\psi^n\big(\gamma(t)\big)\Big) \equiv \boldsymbol{y}\big(\gamma(t)\big)$ bude souřadnicové vyjádření křivky γ v $\mathbb{R}^n$. Tečný vektor ke křivce γ v bodě $p=\gamma(t)=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})\in\mathcal{M}$, působící na funkci f, pak můžeme spočítat jako

$$\begin{aligned}\dot{\gamma}_p(f) \;&=\; \sum_{k=1}^{n} \frac{d\,(\psi^k\circ\gamma)}{dt}(t)\cdot\frac{\partial\big(f\circ\psi^{-1}\big)}{\partial y^k}(\boldsymbol{y}) \;=\\ &=\; \sum_{k=1}^{n} \frac{d\,y^k\big(\gamma(t)\big)}{dt}\cdot\frac{\partial f}{\partial y^k}\bigg|_{p=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})}\end{aligned} \tag{1.17}$$

což lze chápat jako působení operátoru $\dot{\gamma}_p$ na funkci f v bodě $p=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})$.

Pro nějaký interval $I\subset\mathbb{R}$ a bod $p\in\mathcal{U}$, $\psi(p)=(y^1,\ldots,\,y^n)\in\mathbb{R}^n$ definujme, pro $\forall i\in\{1,\ldots,\,n\}$, n-tici tzv. *souřadnicových křivek* $\varsigma_p^{\,i}(t)$ jako

$$\varsigma_p^{\,i} \,:\, I\subset\mathbb{R}\longrightarrow\mathcal{U}\subset\mathcal{M}\,, \quad t\longmapsto \psi^{-1}\big(y^1,\ldots,\,y^i+t,\ldots,\,y^n\big)\,. \tag{1.18}$$

Křivky $\varsigma_p^{\,i}(t)$ jsou křivkami na varietě $\mathcal{M}$, které odpovídají obrazu i-té zobecněné souřadnice y^i při ostatních souřadnicích y^j, $j\neq i$ fixovaných jejich hodnotou v bodě p.

Spočítáme-li tečné vektory k souřadnicovým křivkám $\varsigma_p^{\,i}(t)$, pro $\forall i\in\{1,\ldots,\,n\}$, v bodě p, tj. v $t = 0$, působící na nějakou funkci $f \in C^k(\mathcal{U})$, dostaneme

$$
\begin{aligned}
\dot{\varsigma}^{\,i}_{\,p}(f) \;&=\; \sum_{k=1}^{n} \frac{d\,(\psi^k \circ \varsigma^{\,i}_{p})}{dt}\bigg|_{t=0} \cdot \frac{\partial f}{\partial y^k}\bigg|_{p=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})} \;=\\
&=\; \sum_{k=1}^{n} \frac{d\,(y^k + \delta_{ik}\,t)}{dt}\bigg|_{t=0} \cdot \frac{\partial f}{\partial y^k}\bigg|_{p=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})} \;=\; \sum_{k=1}^{n} \delta_{ik} \cdot \frac{\partial f}{\partial y^k}\bigg|_{p=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})} \;=\\
&=\; \frac{\partial f}{\partial y^i}\bigg|_{p=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})}
\end{aligned}
\tag{1.19}
$$

Část $\frac{\partial}{\partial y^k} f\big(\psi^{-1}(\boldsymbol{y})\big)$, ve výrazu (1.17), která nezávisí na křivce γ, ale pouze na bodě $p \in \mathcal{U}$, a na funkci f můžeme tedy, nezávisle na křivce γ, spočítat jako tečný vektor $\dot{\varsigma}^{\,i}_{\,p}$ k souřadnicové křivce působící na funkci f.

Část $\frac{d}{dt} y^k\big((\gamma(t))\big) \in \mathbb{R}$, ve výrazu (1.17), nabývá hodnoty reálného čísla, a závisí pouze na křivce γ a bodě $p = \gamma(t) = \psi^{-1}(\boldsymbol{y}) \in \mathcal{U}$. Tato část tedy do tečného vektoru vnáší veškeré informace o křivce, jejíž derivaci počítáme. Pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$ označíme

$$
\dot{y}^{\,i}\big(\gamma(t)\big) \;=\; \dot{y}^{\,i}(p) \;\equiv\; \frac{d\,(\psi^i \circ \gamma)}{dt}(t) \;=\; \frac{d\,y^i\big(\gamma(t)\big)}{dt} \in \mathbb{R}\,. \tag{1.20}
$$

Tečný vektor $\dot{\gamma}_p$ k libovolné křivce $\gamma : I \subset \mathbb{R} \to \mathcal{U}$ v nějakém obecném bodě $p = \gamma(t) = \psi^{-1}(\boldsymbol{y}) \in \mathcal{U}$, můžeme pak zapsat jako lineární kombinaci

$$
\dot{\gamma}_p \;=\; \sum_{i=1}^{n} \dot{y}^{\,i}\big(\gamma(t)\big) \cdot \dot{\varsigma}^{\,i}_{\,p}\,. \tag{1.21}
$$

kde čísla $\dot{y}^{\,i}\big(\gamma(t)\big) \in \mathbb{R}$ přísluší pouze derivované křivce γ, a vektory $\dot{\varsigma}^{\,i}_{\,p} \in T_p\mathcal{M}$ jsou na křivkách γ nezávislé. Čísla $\dot{y}^{\,i}(p) \in \mathbb{R}$ pak představují souřadnice tečného vektoru vůči množině

$$
\left\{\dot{\varsigma}^{\,1}_{\,p}, \ldots, \dot{\varsigma}^{\,n}_{\,p}\right\} \;=\; \left\{\frac{\partial}{\partial y^1}\bigg|_{p=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})}, \ldots, \frac{\partial}{\partial y^n}\bigg|_{p=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})}\right\} \subset T_p\mathcal{M} \tag{1.22}
$$

složené z n-tice operátorů

$$
\frac{\partial}{\partial y^i}\bigg|_{p=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})} : C^1(\mathcal{M}) \longrightarrow \mathbb{R}\,, \qquad f \longmapsto \frac{\partial\,(f \circ \psi^{-1})}{\partial y^i}\bigg|_{\boldsymbol{y}}\,, \tag{1.23}
$$

která pak tvoří bázi prostoru $T_p\mathcal{M}$. Odtud plyne, že $T_p\mathcal{M}$ je vektorový prostor dimenze $\mathsf{dim}(\mathcal{M}) = n$. Obecný vektor $\boldsymbol{v}_p \in T_p\mathcal{M}$ na varietě $\mathcal{M}$ v obecném bodě $p = \psi^{-1}(\boldsymbol{y})$ pak můžeme zapisovat jako operátor

$$
\boldsymbol{v}_p \;=\; \sum_{k=1}^{n} v^k_p \cdot \frac{\partial}{\partial y^k}\bigg|_{p=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})}\,, \tag{1.24}
$$

působící na funkce $f : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$, $f \in C^1(\mathcal{M})$. Čísla $v_p^k \in \mathbb{R}$, pro $k \in \{1, \dots, n\}$, jsou složky vektoru $\boldsymbol{v}_p$, které můžeme formálně dostat působením vektoru $\boldsymbol{v}_p$ na příslušnou souřadnicovou funkci ψ^i, neboť je

$$\boldsymbol{v}_p(\psi^i) \;=\; \sum_{k=1}^{n} v_p^k \cdot \frac{\partial\, \psi^i\big(\psi^{-1}(\boldsymbol{y})\big)}{\partial y^k} \;=\; \sum_{k=1}^{n} v_p^k \cdot \frac{\partial y^i}{\partial y^k} \;=\; \sum_{k=1}^{n} v_p^k \cdot \delta_{ik} \;=\; v_p^i\,. \tag{1.25}$$

Sjednocení $T\mathcal{M} \equiv \bigcup_{p\in\mathcal{M}} T_p\mathcal{M}$ všech tečných prostorů $T_p\mathcal{M}$ ve všech bodech p variety $\mathcal{M}$ nazveme tečným bandlem (z anglického výrazu "tangent bundle")[7]. Je-li n dimenze variety, pak je dimenze tečného bandlu n^2.

Na varietě $\mathcal{M}$ můžeme tedy již zavést tzv. *vektorové pole*, což je zobrazení

$$\boldsymbol{v} \,:\, \mathcal{M} \longrightarrow T\mathcal{M}\,, \quad p \longmapsto \boldsymbol{v}(p) = \boldsymbol{v}_p\,, \tag{1.26}$$

které bodu variety přiřazuje konkrétní tečný vektor k varietě v tomto bodě. Vektorové pole, působící na bod $p = \psi^{-1}(\boldsymbol{y})$ lze zřejmě zapsat jako

$$\boldsymbol{v}(p) \;=\; \sum_{i=1}^{n} v^i(p) \cdot \frac{\partial}{\partial y^i}\bigg|_{p=\psi^{-1}(\boldsymbol{y})}\,. \tag{1.27}$$

Funkce $v^i : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$, $p \mapsto v^i(p) = v_p^i$ jsou funkcemi na varietě, přiřazující bodu p souřadnice $v_p^i \in \mathbb{R}$ tečného vektoru $\boldsymbol{v}_p$. Jsou-li tyto funkce spojitě diferencovatelné třídy C^k, pak vektorové pole $\boldsymbol{v}$ nazveme spojitě diferencovatelným třídy C^k. Dále budeme uvažovat pouze hladká vektorová pole (tj. taková, kde jsou funkce v^i třídy C^∞).

Pro hladká vektorová pole $\boldsymbol{v}$ definujeme *integrální křivky*, jako takové křivky $\gamma : I \subset \mathbb{R} \to \mathcal{M}$, pro které je $\boldsymbol{v}(p) = \dot{\gamma}_p$ pro $\forall p \in \gamma(I) \subset \mathcal{M}$. Srovnáním výrazů (1.20) a (1.24) vidíme, že integrální křivky, pro nějaký obecný bod $p = \gamma(t)$ musí splňovat n-tici rovnic

$$v^i\big(\gamma(t)\big) \;=\; \frac{d\,y^i\big(\gamma(t)\big)}{dt}\,, \qquad i \in \{1, \dots, n\}\,, \tag{1.28}$$

kde $y^i\big(\gamma(t)\big) = \psi^i \circ \gamma(t)$ jsou složky křivky γ v $\mathbb{R}^n$. Řešením rovnic (1.28) pro zadané vektorové pole $\boldsymbol{v}$ se známými složkami v^i dostaneme funkce $\boldsymbol{y}(t) = \big(y^1(t), \dots, y^n(t)\big) = \big(\psi^1 \circ \gamma(t), \dots, \psi^n \circ \gamma(t)\big) = \psi\big(\gamma(t)\big)$, ze kterých můžeme vyjádřit integrální křivky $\gamma(t) = \psi^{-1}\big(\boldsymbol{y}(t)\big)$.

1.1.1 Přechod mezi různými souřadnicemi na varietách

Uvažujme, že budeme mít na naší n-rozměrné C^k varietě $\mathcal{M}$ nějaké dvě překrývající se mapy $(\mathcal{U}_\alpha, \psi_\alpha)$ a $(\mathcal{U}_\beta, \psi_\beta)$, dále pak nějakou C^k křivku $\gamma : I \to \mathcal{U}_\alpha \cap \mathcal{U}_\beta$, a budeme chtít spočítat tečný vektor ke křivce γ v nějakém bodě $p = \gamma(t)$. Označme $\psi_\alpha(p) = \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ a $\psi_\beta(p) = \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n$. Víme, že na překryvech map na

[7] Tato počeštěná verze původního anglického termínu tangent bundle byla převzata z [4] *Teoretická mechanika v jazyce diferenciální geometrie* od Jiřího Podolského.

varietě platí $\psi_\beta^{-1}(\boldsymbol{z}) = p = \psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y})$, z čehož plyne, že $\boldsymbol{z} = \psi_\beta \circ \psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y})$ a naopak $\boldsymbol{y} = \psi_\alpha \circ \psi_\beta^{-1}(\boldsymbol{z})$. Volme nějakou libovolnou funkci $f : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$, $f \in C^1(\mathcal{M})$. Zřejmě platí $(f \circ \gamma) = (f \circ \psi_\alpha^{-1}) \circ (\psi_\alpha \circ \gamma) = (f \circ \psi_\beta^{-1}) \circ (\psi_\beta \circ \gamma)$. Derivace (1.14), a tedy i tečný vektor $\dot{\gamma}_p$, pak nezávisí na volbě konkrétní mapy, a je tedy

$$\sum_{k=1}^{n} \dot{y}^k(p) \cdot \frac{\partial f}{\partial y^k}\bigg|_{\psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y})} = \dot{\gamma}_p(f) = \sum_{k=1}^{n} \dot{z}^k(p) \cdot \frac{\partial f}{\partial z^k}\bigg|_{\psi_\beta^{-1}(\boldsymbol{z})} . \tag{1.29}$$

Složky a báze vektoru $\dot{\gamma}_p$, rozepsaného do lineárních kombinací na obou stranách (1.29) jsou ale již vyjádřené v nějaké konkrétní mapě, a budou se tedy pro různé mapy obecně lišit.

Podíváme se nejprve na vyjádření bázových vektorů v obou uvažovaných mapách. Zřejmě platí $f \circ \psi_\alpha^{-1} = (f \circ \psi_\beta^{-1}) \circ (\psi_\beta \circ \psi_\alpha^{-1})$. Pro bázové operátory (1.23) tečného prostoru $T_p\mathcal{M}$ pak dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{\partial\,(f \circ \psi_\alpha^{-1})}{\partial y^i}\bigg|_{\boldsymbol{y}} &= \frac{\partial}{\partial y^i}\Big(f \circ \psi_\beta^{-1}\big(\overbrace{\psi_\beta \circ \psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y})}^{\boldsymbol{z}}\big)\Big) = \\ &= \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial\,(f \circ \psi_\beta^{-1})}{\partial z^k}\bigg|_{\boldsymbol{z}} \cdot \frac{\partial\, z^k(\boldsymbol{y})}{\partial y^i} . \end{aligned} \tag{1.30}$$

Podobně lze rozepsat $f \circ \psi_\beta^{-1} = (f \circ \psi_\alpha^{-1}) \circ (\psi_\alpha \circ \psi_\beta^{-1})$, čímž dostáváme analogický vztah

$$\begin{aligned} \frac{\partial\,(f \circ \psi_\beta^{-1})}{\partial z^i}\bigg|_{\boldsymbol{z}} &= \frac{\partial}{\partial z^i}\Big(f \circ \psi_\alpha^{-1}\big(\overbrace{\psi_\alpha \circ \psi_\beta^{-1}(\boldsymbol{z})}^{\boldsymbol{y}}\big)\Big) = \\ &= \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial\,(f \circ \psi_\alpha^{-1})}{\partial y^k}\bigg|_{\boldsymbol{y}} \cdot \frac{\partial\, y^k(\boldsymbol{z})}{\partial z^i} . \end{aligned} \tag{1.31}$$

V obou vztazích výše jsme označily $\boldsymbol{z}(\boldsymbol{y}) = \psi_\beta \circ \psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y})$, a naopak $\boldsymbol{y}(\boldsymbol{z}) = \psi_\alpha \circ \psi_\beta^{-1}(\boldsymbol{z})$. Výrazy

$$\frac{\partial\, z^k(\boldsymbol{y})}{\partial y^i}\,, \quad \frac{\partial\, y^k(\boldsymbol{z})}{\partial z^i}\,; \qquad i, k \in \{1, \ldots, n\} . \tag{1.32}$$

jsou složky tzv. *Jacobiho matic* v bodě $p = \psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y}) = \psi_\beta^{-1}(\boldsymbol{z})$, což jsou transformační matice při přechodu mezi souřadnicemi $\boldsymbol{y}$ a $\boldsymbol{z}$. Jacobiho matice $\frac{\partial}{\partial y^i} z^k(\boldsymbol{y})$ a $\frac{\partial}{\partial z^i} y^k(\boldsymbol{z})$ jsou zjevně navzájem inverzní.

Výraz $\frac{\partial}{\partial y^i} f\big(\psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y})\big)$, ze vztahu (1.30), představuje bázový vektor tečného prostoru $T_p\mathcal{M}$, působící na funkci f, popisujeme-li zkoumanou část variety mapou $(\mathcal{U}_\alpha, \psi_\alpha)$ se souřadnicemi $\boldsymbol{y}$. Stejně tak vektor $\frac{\partial}{\partial y^i} f\big(\psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y})\big)$, ze vztahu (1.31), představuje bázový vektor tečného prostoru $T_p\mathcal{M}$, popisujeme-li zkoumanou část variety mapou $(\mathcal{U}_\beta, \psi_\beta)$ se souřadnicemi $\boldsymbol{z}$. Obě zmíněné báze generují stejný prostor $T_p\mathcal{M}$, ale vztahují se k jiným souřadnicím, a budou tedy obecně různé.

Transformační vztahy mezi bázovými vektory jsou potom

$$
\begin{aligned}
\left.\frac{\partial}{\partial y^i}\right|_{\psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y})} &= \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial\, z^k(\boldsymbol{y})}{\partial y^i} \cdot \left.\frac{\partial}{\partial z^k}\right|_{\psi_\beta^{-1}(\boldsymbol{z})}\,, \\
\left.\frac{\partial}{\partial z^i}\right|_{\psi_\beta^{-1}(\boldsymbol{z})} &= \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial\, y^k(\boldsymbol{z})}{\partial z^i} \cdot \left.\frac{\partial}{\partial y^i}\right|_{\psi_\alpha^{-1}(\boldsymbol{y})}\,.
\end{aligned}
\tag{1.33}
$$

Nyní se podíváme na vyjádření složek vektorů v obou uvažovaných mapách. Opět rozepíšeme $(\psi_\alpha \circ \gamma) = (\psi_\alpha \circ \psi_\beta^{-1}) \circ (\psi_\beta \circ \gamma)$, a naopak $(\psi_\beta \circ \gamma) = (\psi_\beta \circ \psi_\alpha^{-1}) \circ (\psi_\alpha \circ \gamma)$. Dosazením do vztahu (1.20) dostaneme

$$
\begin{aligned}
\dot{y}^{\,i}\big(\gamma(t)\big) &= \left.\frac{d\,(\psi_\alpha^i \circ \gamma)}{dt}\right|_t = \frac{d}{dt}\big(\psi_\alpha^i \circ \psi_\beta^{-1}\big(\overbrace{\psi_\beta \circ \gamma(t)}^{\boldsymbol{z}}\big)\big) = \\
&= \sum_{k=1}^{n} \left.\frac{\partial\,(\psi_\alpha^i \circ \psi_\beta^{-1})}{\partial z^k}\right|_{\boldsymbol{z}} \cdot \left.\frac{d\,(\psi_\beta^k \circ \gamma)}{dt}\right|_t = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial\, y^i(\boldsymbol{z})}{\partial z^k} \cdot \dot{z}^{\,k}\big(\gamma(t)\big)\,,
\end{aligned}
\tag{1.34}
$$

a obdobně

$$
\begin{aligned}
\dot{z}^{\,i}\big(\gamma(t)\big) &= \left.\frac{d\,(\psi_\beta^i \circ \gamma)}{dt}\right|_t = \frac{d}{dt}\big(\psi_\beta \circ \psi_\alpha^{-1}\big(\overbrace{\psi_\alpha^i \circ \gamma(t)}^{\boldsymbol{y}}\big)\big) = \\
&= \sum_{k=1}^{n} \left.\frac{\partial\,(\psi_\beta^i \circ \psi_\alpha^{-1})}{\partial y^k}\right|_{\boldsymbol{y}} \cdot \left.\frac{d\,(\psi_\alpha^k \circ \gamma)}{dt}\right|_t = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial\, z^i(\boldsymbol{y})}{\partial y^k} \cdot \dot{y}^{\,k}\big(\gamma(t)\big)\,.
\end{aligned}
\tag{1.35}
$$

Transformační vztahy mezi složkami vektoru $\dot{\gamma}_p$, při přechodu mezi souřadnicemi $\boldsymbol{y}$ a $\boldsymbol{z}$ jsou potom

$$
\dot{y}^{\,i}(p) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial\, y^i(\boldsymbol{z})}{\partial z^k} \cdot \dot{z}^{\,k}(p)\,, \qquad \dot{z}^{\,i}(p) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial\, z^i(\boldsymbol{y})}{\partial y^k} \cdot \dot{y}^{\,k}(p)\,. \tag{1.36}
$$

Protože jsou Jacobiho matice inverzní, transformací báze i souřadnic tečného vektoru pak přejdeme z jedné strany výrazu (1.29) na druhou.

1.2 Zobecněné souřadnice v $\mathbb{R}^n$

V sekci 1.1 jsme se zabývali obecnými varietami. Ty jsme chápaly jako nějaké obecné množiny s topologií, splňující určité podmínky. Nyní se budeme zabývat varietami, se kterými už budeme schopni prakticky popisovat polohy a pohyby reálných fyzikálních systémů.

Není-li náš studovaný systém (hmotný bod, částice) ničím omezen, předpokládáme (v klasické fyzice), že je prostor $\mathbb{R}^n$ nejobecnější konfiguračním prostorem, tj. prostorem všech možných poloh našeho systému. V nejobecnější situaci (tj. bez omezení) se náš systém může nacházet v libovolném bodě prostoru $\mathbb{R}^n$ (typicky je $n = 3$).

Prostor $\mathbb{R}^n$ je definován jako množina všech uspořádaných reálných n-tic, tj. jako množina všech bodů $\boldsymbol{x} \equiv (x^1, \ldots, x^n)$, kde $x^i \in \mathbb{R}$, pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$. Jednotlivé složky x^i bodu $\boldsymbol{x}$ jsou navzájem nezávislé. Prostor $\mathbb{R}^n$ můžeme chápat jako varietu se souřadnicovými zobrazeními $\psi : \boldsymbol{x} \mapsto (x^1, \ldots, x^n)$, $\psi^{-1} : (x^1, \ldots, x^n) \mapsto \boldsymbol{x}$. Souřadnicové křivky pak budou mít tvar $\varsigma_p^i(t) = (x^1, \ldots, x^i + t, \ldots, x^n)$ pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$. Podle (1.19) pak bude mít i-tý bázový vektor $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ kartézské báze tvar

$$\boldsymbol{\varepsilon}_i \;=\; \dot{\varsigma}_p^{\,i}(0) \;=\; \frac{d}{dt}(x^1, \ldots, x^i + t, \ldots, x^n)\Big|_{t=0} \;=\; (0, \ldots, \underbrace{1}_{i.}, \ldots, 0)\,. \tag{1.37}$$

Libovolný bod $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ lze pak zapsat známým způsobem jako

$$\boldsymbol{x} \;=\; \sum_{k=1}^{n} x^k \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_k \;=\; (x^1, \ldots, x^n)\,. \tag{1.38}$$

Kartézské souřadnice $x^1, \ldots, x^n$ mohou být (a často také bývají) z nějakého důvodu nevhodné pro popis nějakého fyzikálního systému. Tímto důvodem může např. to, že je pohyb či výskyt systému nějak omezen, tj. systém je podroben tzv. vazbám, nebo že má systém nějaké symetrie. Potom je vhodnější přejít k jiným, vhodnějším zobecněným souřadnicím, které by vystihovaly vazby či symetrie systému. Dovolenou oblast výskytu částic lze, v některých případech, nahradit vhodnou varietou. Je-li pro naše potřeby prostor $\mathbb{R}^n$ příliš "veliký", přejdeme pak k nějakému novému konfiguračnímu prostoru K systému. K je pak množina všech poloh (bodů), ve kterých se může systém nacházet. Topologii $\mathscr{K}$ volíme jako systém všech otevřených podmnožin K. Systém pak budeme popisovat pomocí bodů na m dimenzionální diferencovatelné varietě $\mathcal{K} = (K, \mathscr{K})$, alespoň třídy C^k pro $k \geq 2$. Varietu $\mathcal{K}$ volíme tak, aby množina K co nejlépe vyhovovala popisu našeho systému. Vzhledem k tomu, že celý konfigurační prostor neomezeného systému odpovídá prostoru $\mathbb{R}^n$, bude pro náš omezený systém zřejmě $\mathcal{K} \subset \mathbb{R}^n$, tedy $\mathsf{dim}(\mathcal{K}) \leq \mathsf{dim}(\mathbb{R}^n)$, $m \leq n$. Označme $(\mathcal{U}, \psi)$ jako mapu na varietě, kde $\mathcal{U} \subset \mathcal{K}$ je nějaká otevřená množina, na které budeme studovat náš systém. Mapu $(\mathcal{U}, \psi)$ na varietě $\mathcal{K}$ volíme opět tak, aby množina $\mathcal{U}$ a souřadnicové zobrazení ψ nejlépe vyhovovaly popisu našeho systému. Pro libovolný bod $P \in \mathcal{K}$ pak označíme $\psi(P) = (q^1, \ldots, q^n) \equiv \boldsymbol{q} \in \Omega \subset \mathbb{R}^m$ m-tici zobecněných souřadnic $q^i \in \Omega_i \subset \mathbb{R}$, $i \in \{1, \ldots, m\}$, a $\Omega = \Omega_1 \times \ldots \times \Omega_m \subset \mathbb{R}^m$. Zobecněné souřadnice q^i představují m-tici nějakých, navzájem nezávislých geometrických veličin, jako např. vzdálenost na přímkách, délky oblouků, úhly, apod., které jsou dostatečné k popisu polohy našeho systému.

Protože uvažujeme $\mathcal{K} \subset \mathbb{R}^n$, $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$ lze bod $P \in \mathcal{U}$ zadat pomocí kartézských souřadnic prostoru $\mathbb{R}^n$ jako

$$P = \boldsymbol{x}(P) \;=\; \sum_{k=1}^{n} x^k(P) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_k\,, \tag{1.39}$$

Polohu libovolného bodu $P \in \mathcal{U}$ z variety $\mathcal{K}$ je možné též vyjádřit pomocí zobecněných souřadnic jako nějakou reálnou m-tici $(q^1, \ldots, q^m) \in \Omega$. Pro body z variety $\mathcal{K}$ tedy musí existovat nějaký jednoznačný vztah mezi kartézskou n-ticí

$(x^1, \ldots, x^n)$ a m-ticí $(q^1, \ldots, q^n)$ zobecněných souřadnic. Libovolný bod $P \in \mathcal{U}$ na konfigurační varietě $\mathcal{K}$ můžeme vyjádřit pomocí $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ nebo $\boldsymbol{q} \in \Omega$ jako $(x^1, \ldots, x^n) = P = \psi^{-1}(q^1, \ldots, q^m)$, nebo-li $\boldsymbol{x} = \psi^{-1}(\boldsymbol{q})$. Pro $\forall i \in \{1, \ldots, m\}$ označme

$$\psi^i\big(\boldsymbol{x}(P)\big) = q^i\,, \qquad \left[\psi^{-1}\right]^i(\boldsymbol{q}) = x^i(P)\,. \tag{1.40}$$

Oba vztahy (1.40) mezi kartézskými souřadnicemi $\boldsymbol{x}$ a zobecněnými souřadnicemi $\boldsymbol{q}$ definují funkce

$$\begin{aligned} q^i \;&=\; \left[\psi^{-1}\right]^i(x^1, \ldots, x^n) \;=\; q^i(x^1, \ldots, x^n)\,, \qquad i \in \{1, \ldots, m\}\,, \\ x^j \;&=\; \psi^j(q^1, \ldots, q^m) \;=\; x^j(q^1, \ldots, q^m)\,, \qquad j \in \{1, \ldots, n\}\,, \quad m \leq n\,. \end{aligned} \tag{1.41}$$

Z vlastností homeomorfismů ψ a ψ^{-1} plyne, že jsou jednotlivé funkce $q^i : \mathbb{R}^n \to \Omega_i$ a $x^j : \Omega \to \mathbb{R}$ diferencovatelné třídy C^k, $k \geq 2$ (protože varieta $\mathcal{K}$ je třídy C^k, $k \geq 2$), pro $\forall i \in \{1, \ldots, m\}$ a $\forall j \in \{1, \ldots, n\}$, a navzájem inverzní ve smyslu

$$\begin{aligned} (q^1, \ldots, q^m) \;&=\; \big(x^1(q^1, \ldots, q^m), \ldots, x^n(q^1, \ldots, q^m)\big)\,, \\ (x^1, \ldots, x^n) \;&=\; \big(q^1(x^1, \ldots, x^n), \ldots, q^m(x^1, \ldots, x^n)\big)\,. \end{aligned} \tag{1.42}$$

Vzájemná jednoznačnost (na příslušných množinách) ale již pro jednotlivé funkce q^i a x^j obecně neplatí. Vzájemně jednoznačné jsou pouze zobrazení ψ a ψ^{-1}, tj. uspořádaná m-tice funkcí $\boldsymbol{q}(x^1, \ldots, x^n)$, a uspořádaná n-tice funkcí $\boldsymbol{x}(q^1, \ldots, q^m)$ jakožto celky.

Pro libovolný bod $P \in \mathcal{U}$, $\psi(P) = (q^1, \ldots, q^m)$, budou mít souřadnicové křivky tvar $\varsigma^{\,i}_{P}(t) = \psi^{-1}\big(q^1, \ldots, q^i{+}t, \ldots, q^m\big)$, kde $i \in \{1, \ldots, m\}$ a $t \in \mathbb{R}$. Bázové vektory prostoru $T_P\mathcal{K}$ pak spočítáme pomocí (1.19), a následným dosazením funkcí (1.40) a vyjádření (1.39) jako

$$\begin{aligned} \dot{\varsigma}^{\,i}_{P}(0) \;&=\; \frac{d}{dt}\,\psi^{-1}\big(q^1, \ldots, q^i + t, \ldots, q^m\big)\bigg|_{t=0} \;=\; \frac{\partial\,\psi^{-1}(\boldsymbol{q})}{\partial q^i} \;= \\ &=\; \frac{\partial\,\boldsymbol{x}(P)}{\partial q^i} \;=\; \frac{\partial}{\partial q^i}\sum_{k=1}^{n} x^k(\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_k \;=\; \sum_{k=1}^{n}\frac{\partial\,x^k(\boldsymbol{q})}{\partial q^i}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_k \;\equiv \\ &\equiv\; \boldsymbol{e}_i(q^1, \ldots, q^m) \;\equiv\; \boldsymbol{e}_i(P)\,, \end{aligned} \tag{1.43}$$

kde jsme jako $\boldsymbol{e}_i(P)$, pro $i \in \{1, \ldots, m\}$ označily i-tý bázový vektor m-rozměrného tečného prostoru $T_P\mathcal{K}$. Bázové vektory $\boldsymbol{e}_i(P) = \boldsymbol{e}_i(\boldsymbol{q})$ závisí na zobecněných souřadnicích $\boldsymbol{q}$, tedy i konkrétním bodě $P \in \mathcal{U}$, a budou se obecně bod od bodu měnit.

Uvažme nyní situaci, kdy sledujeme pohyb nějakého tělesa (systému) po varietě $\mathcal{K}$, a snažíme se ho popsat. Představa je taková, že s nějakým parametrem $t \in I$ času, kde $I \subset \mathbb{R}$ je interval, sledujeme na varietě pokaždé jiný bod $P \in \mathcal{K}$, v němž se sledovaný systém právě nachází. Bod, který právě sledujeme v čase t označíme jako $P(t)$. Předpokládáme, že se tento systém pohybuje spojitě, neboť skutečný fyzikální pohyb je spojitý. Pohyb systému po varietě pak popisuje nějaká křivka γ na varietě:

$$\gamma(t) : I \subset \mathbb{R} \longrightarrow \mathcal{K}\,, \quad t \longmapsto \gamma(t) = P(t)\,, \tag{1.44}$$

V $\mathbb{R}^m$ pak můžeme pohyb systému po varietě popsat pomocí souřadnic $\boldsymbol{q}$ křivkou

$$\psi\big(\gamma(t)\big) \;=\; \big(q^1(t),\ldots,\, q^m(t)\big) \;\in\; \Omega \;\subset\; \mathbb{R}^m\,, \tag{1.45}$$

kde budou jednotlivé souřadnice q^i funkcí času t. Známe-li naopak souřadnice $\boldsymbol{q}(t) = \big(q^1(t),\ldots,\, q^m(t)\big)$ pohybu systému v $\mathbb{R}^m$, pak je

$$\begin{aligned} \gamma(t) \;&= \psi^{-1}\big(\boldsymbol{q}(t)\big) \;=\; \Big(x^1\big(\boldsymbol{q}(t)\big),\ldots,\, x^n\big(\boldsymbol{q}(t)\big)\Big) \;= \\ &= \big(x^1(t),\ldots,\, x^n(t)\big) \;\in\; \mathbb{R}^n \end{aligned} \tag{1.46}$$

křivkou popisující skutečný pohyb systému po varietě $\mathcal{K} \subset \mathbb{R}^n$.

Vektor rychlosti pohybujícího se systému v nějakém bodě $P(t)$ pak můžeme spočítat jako derivaci křivky $\gamma(t)$ v bodě t podle vztahů (1.21) a (1.43), tedy

$$\begin{aligned} \dot\gamma(t) \;&=\; \frac{d\,\psi^{-1}\big(\boldsymbol{q}(t)\big)}{dt} \;=\; \sum_{k=1}^{m} \frac{\partial\,\psi^{-1}(\boldsymbol{q})}{\partial q^k}\bigg|_{\boldsymbol{q}=\boldsymbol{q}(t)} \cdot \frac{d\,q^k(t)}{dt} \;= \\ &= \sum_{k=1}^{m} \dot\varsigma^{\,i}_{\,P(t)}(0)\cdot \dot q^{\,k}(t) \;=\; \sum_{k=1}^{m} \dot q^{\,k}(t)\cdot \boldsymbol{e}_k\big(\boldsymbol{q}(t)\big)\,. \end{aligned} \tag{1.47}$$

Vidíme tedy, že vektor rychlosti pohybujícího se systému na varietě, v nějakém bodě $P = \psi\big(\boldsymbol{q}(t)\big)$, můžeme vyjádřit jako vektor z prostoru $\mathbb{R}^m$, s bází tečného prostoru $T_P\mathcal{K}$, a se složkami $\dot q^{\,k}(t) \in \Omega$.

Zobecněné souřadnice $q^i \in \Omega_i$, $i \in \{1,\ldots,\, n\}$ typicky představují n-tici nějakých geometrických veličin, jako např. vzdálenost na přímkách, délky oblouků, úhly, apod., které jsou dostatečné k úplnému popisu všech bodů prostoru ve kterém se nacházíme ($\mathbb{R}^n$). Známe-li pak geometrický význam obecných souřadnic q^i, stačí nám pak už jen sama n-tice funkcí $q^i(t)$, abychom mohly dobře popsat sledovaný pohyb. Namísto křivky (1.44) tak budeme pohyb systému popisovat křivkou (1.45). Z funkcí $q^i(t)$ můžeme již snadno spočítat $\dot q^{\,i}(t)$ a $\ddot q^{\,i}(t)$. Funkce $\dot q^{\,i}(t)$ nám pak říkají, jak rychle se mění velikost geometrické veličiny q^i, funkce $\ddot q^{\,i}(t)$ nám zase říká, jak se mění rychlost q^i, atd. Stačí znát pouze geometrickou interpretaci souřadnic $q^i \in \Omega_i$, a případně jejich vztah $x^i = x^i(q^1,\ldots,\, q^n)$ (který je zpravidla známý) ke kartézským souřadnicím $x^i \in \mathbb{R}$, abychom s nimi mohly úplně popsat studované pohyby v $\mathbb{R}^n$. Spíš něž celá suma (1.47) nás tedy budou zajímat pouze její složky q^i. K popisu prostoru $\mathbb{R}^n$, se kterým budeme dále pracovat, si tedy vystačíme pouze s n-ticí $\boldsymbol{q} = (q^1,\ldots,\, q^n)$ nějakých zobecněných souřadnic, a příslušnými funkcemi $\boldsymbol{q}(t) = \big(q^1(t),\ldots,\, q^n(t)\big)$.[8]

[8]Tučné výrazy $\boldsymbol{q}$ budou nadále pouze označovat n-tice $q^1,\ \ldots,\ q^n$.

1.3 Pojem variace

Matematický úvod do variačního počtu, spolu s úvodními definicemi lze nalézt v [5] od Vladimíra Součka.

Nechť je $(X, ||\cdot||)$ nějaký normovaný vektorový prostor X s normou $||\cdot||$. Funkcionálem, definovaným na množině X, rozumíme zobrazení $\mathcal{F}$ tvaru

$$\mathcal{F} : X \longrightarrow \mathbb{R}\,, \quad y \longmapsto \mathcal{F}(y)\,, \tag{1.48}$$

které prvku $y \in X$ přiřazuje reálné číslo $\mathcal{F}(y)$. Množinu (prostor) všech funkcionálů definovaným na množině X označíme jako X^*. Prostorem X může být např. prostor vhodně definovaných funkcí, prostor $\mathbb{R}^n$, prostor $\mathbb{R}$, apod. Prvky $y \in X$ mohou tedy být funkce, vektory, či skaláry. V případě že $X = \mathbb{R}^n$, budeme funkcionály nazývat (vektorovými, či skalárními) funkcemi.

Směrovou derivaci funkcionálu $\mathcal{F}(y)$ v bodě $y \in X$, ve směru $h \in X$ definujeme jako tzv. *Gâteauxův diferenciál* předpisem

$$\frac{d\mathcal{F}}{dh}(y) \;\equiv\; \lim_{\alpha\to 0}\left(\frac{\mathcal{F}(y+\alpha h) - \mathcal{F}(y)}{\alpha}\right)\,, \tag{1.49}$$

kde $\alpha \in \mathbb{R}$ je reálné číslo. Limitu (1.49) počítáme vzhledem k metrice indukované normou $||\cdot||_X$ prostoru X. Z linearity limit plyne, že je lineární i směrová derivace funkcionálu. Definujeme-li pomocnou funkci $F_{y,h}(\alpha) \equiv \mathcal{F}(y + \alpha h)$ jedné reálné proměnné, platí pak

$$\begin{aligned}\left.\frac{d\mathcal{F}(y+\alpha h)}{d\alpha}\right|_{\alpha=0} \;\equiv\; \left.\frac{dF_{y,h}(\alpha)}{d\alpha}\right|_{\alpha=0} \;=\; \lim_{\alpha\to 0}\left(\frac{F_{y,h}(\alpha) - F_{y,h}(0)}{\alpha}\right) \;=\; \\ =\; \lim_{\alpha\to 0}\left(\frac{\mathcal{F}(y+\alpha h) - \mathcal{F}(y)}{\alpha}\right) \;=\; \frac{d\mathcal{F}}{dh}(y)\end{aligned} \tag{1.50}$$

Směrovou derivaci (1.49) funkcionálu $\mathcal{F}$ ve směru $h \in X$ lze pak, poněkud jednodušeji, chápat jako derivaci funkce $F_{y,h}(\alpha)$ v bodě $\alpha = 0$. Obecněji řečeno: směrové derivace funkcionálů lze počítat jako obyčejné derivace vhodně definovaných funkcí jedné reálné proměnné.

Variaci funkcionálu $\mathcal{F}$ v bodě $y \in X$ pak definujeme jako lineární zobrazení

$$\delta\mathcal{F}(y) : X \longrightarrow \mathbb{R}\,, \quad h \;\longmapsto\; \frac{d\mathcal{F}}{dh}(y)\,, \tag{1.51}$$

které bodu $h \in X$ přiřazuje směrovou derivaci funkcionálu $\mathcal{F}$ v bodě $y \in X$ ve směru $h \in X$. Linearita variace $\delta\mathcal{F}(y)$ plyne také z její definice pomocí směrové derivace, která je lineární. Ze vztahů (1.50) a (1.51) lze nahlédnou, že platí následující důležitý vztah

$$\big[\delta\mathcal{F}(y)\big]\,(h) \;=\; \frac{d\mathcal{F}}{dh}(y) \;=\; \left.\frac{dF_{y,h}(\alpha)}{d\alpha}\right|_{\alpha=0} \;=\; \left.\frac{d\mathcal{F}(y+\alpha h)}{d\alpha}\right|_{\alpha=0}. \tag{1.52}$$

Mějme funkcionál $\mathcal{F} : X_1 \times \ldots \times X_k \longrightarrow \mathbb{R}$ více proměnných, který k-tici $y_i \in X_i$, kde $(X_i, ||\cdot||_i)$ jsou pro $\forall i \in \{1, \ldots, k\}$ normované vektorové prostory, přiřazuje číslo $\mathcal{F}(y_1, \ldots, y_k) \in \mathbb{R}$. Postupujme podobně jako v případech výše, a definujme variaci funkcionálu $\mathcal{F}(y_1, \ldots, y_j, \ldots, y_k)$ podle y_j ve směru $h_j \in X_j$ jako

$$
\begin{aligned}
\Big[\delta_{y_j}\mathcal{F}(y_1, \ldots, y_j, \ldots y_k)\Big](h_j) \;&\equiv\; \frac{d}{d\alpha}\,\mathcal{F}(y_1, \ldots, y_j + \alpha h_j, \ldots y_k)\bigg|_{\alpha=0} \;= \\
&= \; \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y_j}\,\frac{d(y_j + \alpha h_j)}{d\alpha}\bigg|_{\alpha=0} \;=\; \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y_j}\,h_j\,,
\end{aligned}
\tag{1.53}
$$

kde jsme označily

$$
\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y_j} \;=\; \lim_{\alpha\to 0}\left(\frac{\mathcal{F}(y_1, \ldots, y_j + \alpha h_j, \ldots y_k) - \mathcal{F}(y_1, \ldots, y_j, \ldots y_k)}{\alpha}\right). \tag{1.54}
$$

Pokud pak budeme variovat funkcionál $\mathcal{F}(y_1, \ldots, y_k)$ podle všech $y_j \in X_j$ ve směrech $h_j \in X_j$, pro $\forall j \in \{1, \ldots, k\}$, dostaneme

$$
\begin{aligned}
&\Big[\delta_{y_1 \ldots y_k}\mathcal{F}(y_1, \ldots, y_k)\Big](h_1, \ldots, h_k) \;= \\
&\qquad = \; \frac{d}{d\alpha}\,\mathcal{F}(y_1 + \alpha h_1, \ldots, y_k + \alpha h_k)\bigg|_{\alpha=0} \;=\; \sum_{j=1}^{k} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y_j}\,h_j\,.
\end{aligned}
\tag{1.55}
$$

V případě že je $X \subseteq \mathbb{R}^n$, nazývá se funkcionál $\mathcal{F} = \mathcal{F}(\boldsymbol{y}) = \mathcal{F}(y^1, \ldots, y^n)$ funkcí n reálných proměnných $y^i \in \mathbb{R}$, $i \in \{1, \ldots, n\}$. Lineární zobrazení (1.51) má pak význam totálního diferenciálu funkce $\mathcal{F}$. Variace funkce $\mathcal{F}$ více reálných proměnných je pak totálním diferenciálem $\mathcal{F}$ v bodě $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$, ve směru $\boldsymbol{h} \in \mathbb{R}^n$, a tedy

$$
\big[\delta\mathcal{F}(\boldsymbol{y})\big]\,(\boldsymbol{h}) \;=\; \big[d\,\mathcal{F}(\boldsymbol{y})\big]\,(\boldsymbol{h}) \;=\; \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y^i}(\boldsymbol{y}) \cdot h^i\,, \tag{1.56}
$$

kde $\boldsymbol{e}_i$ je i-tý bázový vektor kanonické báze $\mathbb{R}^n$. Speciálně pro $\boldsymbol{h} = \boldsymbol{e}_i$ platí

$$
\big[\delta\mathcal{F}(\boldsymbol{y})\big]\,(\boldsymbol{e}_i) \;=\; \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y^i}(\boldsymbol{y})\,. \tag{1.57}
$$

Pro prostory $X = \mathbb{R}^n$ již máme definované derivace a diferenciál, a není pro ně tedy nutné zavádět takové pojmy jako je variace. Jakožto nový pojem má variace funkcionálů význam na prostorech X odlišných od $\mathbb{R}^n$, např. na prostorech $C^k(I)$ k-krát spojitě diferencovatelných funkcí na uzavřeném intervalu $I = [a, b] \subset \mathbb{R}$. Na takovémto prostoru $X = C^k(I)$ pak pro funkce $f \in C^k(I)$ uvažujeme normu

$$
||f||_{C^k(I)} = \sum_{n=0}^{k} \sup_{x\in I} \left|f^{(n)}(x)\right|. \tag{1.58}
$$

Mějme vektorový funkcionál $\boldsymbol{\mathcal{F}} = (\mathcal{F}^1, \ldots, \mathcal{F}^N) : X \longrightarrow \mathbb{R}^N$, kde $\mathcal{F}^i : X \longrightarrow \mathbb{R}$, $i \in \{1, \ldots, N\}$ jsou výše studované "skalární" funkcionály. Variaci takového vektorového funkcionálu $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ v bodě $y \in X$ ve směru $h \in X$ pak definujeme předpisem

$$\left[\delta \boldsymbol{\mathcal{F}}(y)\right](h) \;\equiv\; \Big(\left[\delta \mathcal{F}^1(y)\right](h)\,, \dots\,,\; \left[\delta \mathcal{F}^N(y)\right](h) \Big)\,. \tag{1.59}$$

Dále vyšetříme případ, kdy je variovaný funkcionál konstantní. Uvažujme funkcionál $\mathcal{F}$, pro který platí $\mathcal{F}(y) = \mathcal{F}(z) = C \in \mathbb{R}$ pro $\forall y,\, z \in X$. Volme libovolný směr $h \in X$. Variace $\mathcal{F}$ ve směru h je potom

$$\left[\delta\, \mathcal{F}(y)\right](h) \;=\; \left.\frac{d\,\mathcal{F}(y+\alpha h)}{d\alpha}\right|_{\alpha=0} \;=\; \left.\frac{dC}{d\alpha}\right|_{\alpha=0} \;=\; 0\,. \tag{1.60}$$

Variace konstantního funkcionálu (nebo funkce) je tedy, pro libovolný směr nulová.

Pozorujme speciální případ, kdy je funkce $\mathcal{F} : X \longrightarrow X$ identita, $\mathcal{F} = \mathsf{id}$, kde $X \subset \mathbb{R}^n$. Variace identity v bodě $y \in X$ ve směru $h \in X$ pak je

$$\left[\delta\, \mathsf{id}(y)\right](h) \;=\; \left.\frac{d}{d\alpha}\,\mathsf{id}(y+\alpha h)\right|_{\alpha=0} \;=\; \left.\frac{d\,(y+\alpha h)}{d\alpha}\right|_{\alpha=0} \;=\; h\,, \tag{1.61}$$

nebo-li $[\delta y]\,(h) \;=\; h$. Označíme-li $\delta y = h$, můžeme pak variaci (1.62) zapisovat jako

$$\delta \mathcal{F}(y_1, \dots, y_k) \;\equiv\; \delta_{y_1 \dots y_k} \mathcal{F}(y_1, \dots, y_k) \;=\; \sum_{j=1}^{k} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y_j}\, \delta y_j\,, \tag{1.62}$$

přičemž budeme mít vždy na mysli, že variaci funkcionálu $\mathcal{F}$ provádíme ve směrech zadaných jako $(h_1, \dots, h_k) = (\delta y_1, \dots, \delta y_k)$. Jednotlivé směry δy_j (resp. h_j) jsou, pro $\forall j \in \{1, \dots, n\}$ navzájem nezávislé.

Poznamenejme, že vzhledem k (1.61) bude pro variaci funkce $y : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $t \mapsto y(t)$, ve směru $h : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $t \mapsto h(t)$ platit

$$\frac{d}{dt}\,\left[\delta y\right](h) \;=\; \frac{d}{dt}\left(\left.\frac{d\,(y+\alpha h)}{d\alpha}\right|_{\alpha=0}\right) \;=\; \frac{d}{dt}\,h \;=\; \dot{h}\,, \tag{1.63}$$

a na druhou stranu

$$\delta\left[\frac{d}{dt}\,(y)\right](h) \;=\; \left.\frac{d}{d\alpha}\left(\frac{d}{dt}(y+\alpha h)\right)\right|_{\alpha=0} \;=\; \left.\frac{d}{d\alpha}\left(\dot{y}+\alpha\dot{h}\right)\right|_{\alpha=0} \;=\; \dot{h}\,, \tag{1.64}$$

kde $\frac{d}{dt}$ chápeme jako funkcionál $y \mapsto \left.\frac{d}{dt}y\right|_t$. Platí tedy

$$\frac{d}{dt}\,\left[\delta y\right](h) \;=\; \delta\left[\frac{d}{dt}\,(y)\right](h)\,, \tag{1.65}$$

pro libovolný směr h, ve kterém variaci provádíme. Platí tedy i samotná rovnost

$$\frac{d}{dt}\left[\delta y\right] \;=\; \delta\left[\dot{y}\right]\,. \tag{1.66}$$

2. Fyzikální úvod

Formalismus klasické mechaniky, od Newtona, přes Lagrange, až po Hamiltona je v celé své šíři velmi podrobně zpracován v základních učebnicích klasické mechaniky jako jsou především [6] *Classical mechanics* od autorů Herberta Goldsteina, Charlese Poola a Johna Safka, a také velmi podrobná [7] *Classical Dynamics: A Contemporary Approach* od Jorge Joseho a Eugena Saletana. Stručně a přehledně pojednává o klasické mechanice např. [8] *Klasická mechanika* od Josefa Tillicha a Lukáše Richterka.

2.1 Hamiltonův variační princip

Něž se pustíme do vyšetřování Hamiltovovy funkce, zaměříme se na chvíli na akční funkcionál a Hamiltonův variační princip, který s Hamiltonovou funkcí velmi úzce souvisí. Velmi formální aplikace variačního počtu na problémy klasické mechaniky je předvedena v textu [9] *Variační Počet* od Olgy Krupkové a Martina Swaczyny. Postup, který předvedeme zde v této práci bude stále přesný, avšak již méně formální.

Definujme funkci L jako zobrazení

$$\begin{aligned} L\,: I \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \;&\longrightarrow\; \mathbb{R} \\ \big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big) \;&\longmapsto\; L\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big) \in \mathbb{R}\,, \end{aligned} \tag{2.1}$$

kde zobrazení $\boldsymbol{\kappa}:\, I \longrightarrow \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{\kappa}(t) = \big(\kappa^1(t), \ldots,\, \kappa^n(t)\big)$ a $\boldsymbol{\kappa} \in C^2(I)$ pro $\forall t \in I$, je C^2 křivka v $\mathbb{R}^n$, a kde tečkou nad jménem nějaké funkce budeme označovat derivaci podle času:

$$\dot{\boldsymbol{\kappa}}(t) \equiv \frac{d}{dt}\boldsymbol{\kappa}(t)\,. \tag{2.2}$$

Připomeňme, že formální zápis argumentu funkce L, a i jiných níže uvedených funkcí znamená

$$\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big) \;\equiv\; \big(t,\, \kappa^1(t), \ldots,\, \kappa^n(t),\, \dot{\kappa}^1(t), \ldots,\, \dot{\kappa}^n(t)\big)\,. \tag{2.3}$$

Takto definovanou funkci L budeme označovat jako *lagrangián.*

V klasické mechanice uvažujeme lagrangián L vždy ve tvaru

$$L\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big) \;=\; T\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big) - V\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)\,, \tag{2.4}$$

kde $\boldsymbol{q} = \big(q^1, \ldots,\, q^n\big)$ jsou zobecněné souřadnice systému, T je celková kinetická energie systému a V je celková potenciální energie systému.

Pro lagrangián L dále definujeme *zobecněnou hybnost* $\boldsymbol{p} = \big(p_1, \ldots,\, p_n\big) \in \mathbb{R}^n$ vztahem

$$p_i\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big) \;\equiv\; \frac{\partial\, L\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)}{\partial \dot{\boldsymbol{q}}^i}\,, \qquad \forall i \in \{1, 2, \ldots,\, n\}\,, \tag{2.5}$$

a *zobecněnou energii* $E \in \mathbb{R}$ vztahem

$$E\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big) \;\equiv\; \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)}{\partial \dot{q}^i} \cdot \dot{q}^i(t) \;-\; L\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big) \;=$$

$$= \sum_{i=1}^{n} p_i\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big) \cdot \dot{q}^i(t) \;-\; L\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)\,. \tag{2.6}$$

Mějme prostor X všech C^2 křivek $\boldsymbol{\kappa} \,:\, [t_1,\, t_2] \longrightarrow \mathbb{R}^n$, definovaných na nějakém uzavřeném intervalu $[t_1,\, t_2] \subset \mathbb{R}$. Funkcionál $\mathcal{S} \,:\, X \longrightarrow \mathbb{R}$, definovaný jako

$$\mathcal{S}(\boldsymbol{\kappa}) \;=\; \int_{t_1}^{t_2} L\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big)\, dt \tag{2.7}$$

budeme nazývat *Hamiltonův akční funkcionál*, či zkráceně akční funkcionál, nebo jen akce.

Spočtěme nyní variaci funkcionálu $\mathcal{S}$, podle vztahu (1.52). Volme nějaké libovolné $\boldsymbol{h} \in C^2(\mathbb{R}),\;\; \boldsymbol{h} \,:\, I \longrightarrow \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{h}(t) = (h^1(t), \ldots,\, h^n(t))$. Potom je

$$\big[\delta\mathcal{S}(\boldsymbol{\kappa})\big]\,(\boldsymbol{h}) \;=\; \frac{d}{d\alpha} \int_{t_1}^{t_2} L\Big(t\,,\; \boldsymbol{\kappa}(t) + \alpha \boldsymbol{h}(t)\,,\; \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t) + \alpha \dot{\boldsymbol{h}}(t)\Big)\, dt\,\bigg|_{\alpha=0} \tag{2.8}$$

Potřebujeme prohodit integraci a derivaci podle parametru. Interval $[t_1,\, t_2] \subset \mathbb{R}$ je pro konečné časy $-\infty < t_1 < t_2 < \infty$ omezený a uzavřený, tedy kompaktní. Funkce κ a L jsou třídy $C^2[t_1,\, t_2]$, mají tedy na intervalu $[t_1,\, t_2]$ spojité druhé derivace, a jsou pak na tomto intervalu omezené, i se svými prvními a druhými derivacemi. Ve vztahu (2.8) lze potom prohodit integrál a derivaci.

Definujme dále funkce (křivky) $\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}(t)$ jako:

$$\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}(t) \;\equiv\; \boldsymbol{\kappa}(t) + \alpha {\cdot} \boldsymbol{h}(t) \;=\; \big(\kappa^1(t) + \alpha{\cdot} h^1(t), \ldots,\, \kappa^n(t) + \alpha{\cdot} h^n(t)\big)\,. \tag{2.9}$$

Pro takto definované funkce $\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}(t)$ zřejmě platí:

$$\dot{\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}}(t) = \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t) + \alpha \dot{\boldsymbol{h}}(t)\,, \qquad \frac{\partial \widetilde{\boldsymbol{\kappa}}}{\partial \alpha}(t) \;= \boldsymbol{h}(t)\,, \qquad \frac{\partial \dot{\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}}}{\partial \alpha}(t) = \dot{\boldsymbol{h}}(t)\,. \tag{2.10}$$

Pokračujme ve výpočtu (2.8) variace akce:

$$
\begin{aligned}
(2.8) &= \int\limits_{t_1}^{t_2} \frac{d}{d\alpha} L\big(t,\, \widetilde{\boldsymbol{\kappa}}(t),\, \dot{\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}}(t)\big)\Big|_{\alpha=0} dt \;= \\
&= \int\limits_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial\, L\big(t,\, \widetilde{\boldsymbol{\kappa}}(t),\, \dot{\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}}(t)\big)}{\partial \widetilde{\kappa}^i}\Bigg|_{\alpha=0} \cdot \frac{\partial \widetilde{\kappa}^i(t)}{\partial \alpha} \;+ \right. \\
&\qquad\qquad \left. + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial\, L\big(t,\, \widetilde{\boldsymbol{\kappa}}(t),\, \dot{\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}}(t)\big)}{\partial \dot{\widetilde{\kappa}}^j(t)}\Bigg|_{\alpha=0} \cdot \frac{\partial \dot{\widetilde{\kappa}}^j}{\partial \alpha} \right) dt \;= \\
&= \int\limits_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \widetilde{\kappa}^i}\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big) \cdot h^i(t) \;+\; \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{\kappa}}^j}\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big) \cdot \dot{h}^j(t) \right) dt \overset{\text{per partes}}{=} \\
&\overset{\text{per partes}}{=} \int\limits_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial L}{\partial \widetilde{\kappa}^i}\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big) \;-\; \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{\kappa}}^i}\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big) \right) \right) \cdot h^i(t)\, dt \;+ \\
&\qquad + \left[\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{\kappa}}^i}\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big) \cdot h^j(t) \right]_{t=t_1}^{t=t_2} \;= \\
&= \int\limits_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial L}{\partial \widetilde{\kappa}^i}\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big) \;-\; \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{\kappa}}^i}\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big) \right) \right) \cdot h^i(t)\, dt \;+ \\
&\qquad + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{\kappa}}^j}\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t_2),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t_2)\big) \cdot h^j(t_2) \;-\; \sum_{l=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{\kappa}}^l}\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t_1),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t_1)\big) \cdot h^l(t_1)\,.
\end{aligned}
\tag{2.11}
$$

Funkci $\boldsymbol{h}(t)$ jsme volili jako libovolnou funkci splňující: $\boldsymbol{h} : I \longrightarrow \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{h} \in C^2(\mathbb{R})$. Pokud budeme požadovat, aby byla funkce h nulová v krajních časech t_1 a t_2, tj. $\boldsymbol{h}(t_1) = 0$ a $\boldsymbol{h}(t_2) = 0$, budou pak $\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}(t_1) = \boldsymbol{\kappa}(t_1)$ a $\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}(t_2) = \boldsymbol{\kappa}(t_2)$.[1] Takováto variace se pak nazývá *variace* (funkcionálu $\mathcal{S}$) *s pevnými konci.* Variaci s pevnými konci uvažujeme v situacích, kdy požadujeme, aby náš studovaný systém procházel v časech t_1 a t_2 polohami $\boldsymbol{\kappa}(t_1)$ a $\boldsymbol{\kappa}(t_2)$. Variací akce pak hledáme vhodnou trajektorii spojující tyto dva body. V našem případě budeme uvažovat variaci s pevnými konci. Budou pak $h^l(t_1) = 0$ a $h^j(t_2) = 0$ pro $\forall j,\, l \in \{1, \dots, n\}$,

[1] Alternativně můžeme též požadovat, aby měly funkce $\boldsymbol{h}$ kompaktní nosič $\mathsf{supp}(\boldsymbol{h}) \subset I$, kde $\mathsf{supp}(\boldsymbol{h}) \equiv \{t \in I\,;\; \boldsymbol{h}(t) \neq 0\}$. Nosič $\mathsf{supp}(\boldsymbol{h})$ funkcí $\boldsymbol{h}$ je pak uzavřená omezená množina, a $\boldsymbol{h}(t) = 0$ pro $\forall t \in I \setminus \mathsf{supp}(\boldsymbol{h})$. Ze spojitosti $\boldsymbol{h}$ na I plyne, že $\boldsymbol{h}(t_1) = 0$ a $\boldsymbol{h}(t_2) = 0$. Kompaktnost nosiče $\mathsf{supp}(\boldsymbol{h}) \subset I$ pak zajišťuje vynulování hraničních členů, čímž z (2.11) potom dostáváme variaci funkcionálu $\mathcal{S}$ s pevnými konci.

čímž z (2.11) dostáváme:

$$[\delta\mathcal{S}(\kappa)]\,(h) \;=\; \int\limits_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial L}{\partial \widetilde{\kappa}^i}\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big) \;-\; \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{\kappa}}^i}\big(t,\, \boldsymbol{\kappa}(t),\, \dot{\boldsymbol{\kappa}}(t)\big)\right)\right) \cdot h^i(t)\, dt \tag{2.12}$$

Podle *Hamiltonova variačního principu* platí, že

$$\big[\delta\, \mathcal{S}(\boldsymbol{q})\big] \;=\; 0 \tag{2.13}$$

pro takové křivky $\boldsymbol{q}(t) = (q^1(t), \ldots, q^n(t))$, které reprezentují skutečné fyzikální trajektorie pohybujícího se systému. Hamiltonův variační princip (2.13) platí nezávisle na funkci (směru) $\boldsymbol{h}(t)$. Rovnice

$$\int\limits_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial L}{\partial \widetilde{q}^i}\,(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)) \;-\; \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{q}}^i}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)\right)\right) \cdot h^i(t)\, dt \;=\; 0 \tag{2.14}$$

tedy platí pro libovolnou funkci $\boldsymbol{h} \in C^1(\mathbb{R}),\quad \boldsymbol{h} : I \longrightarrow \mathbb{R}^n$.

Tvrdíme, že plat-li rovnice (2.14), pak už musí pro $\forall t \in I$ a $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$ platit

$$\frac{\partial L}{\partial \widetilde{q}^i}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big) \;-\; \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{q}}^i}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)\right) \;=\; 0\,. \tag{2.15}$$

Důkaz tohoto tvrzení lze provést následující úvahou. Předpokládejme sporem, že neplatí rovnost (2.15). Najděme pak funkci $\boldsymbol{h}(t)$ takovou, že bude integrand v integrálu (2.14) různý od nuly pro nějaký index $j \in \{1, \ldots, n\}$. Stačí volit takovou funkci $\boldsymbol{h}(t)$, pro kterou je $h^j(t)$ nenulová na nějaké množině nenulové míry. V integrálu (2.14) potom bude alespoň jeden člen (j-tý) různý od nuly, čímž dostaneme spor s Hamiltonovým variačním principem (2.13). Tvrzení (2.15) je tedy ekvivalentní[2] s Hamiltonovým variačním principem (2.13).

Podmínkou platnosti Hamiltonova variačního principu (2.13) je to, že funkce $\boldsymbol{q}(t)$ musí reprezentovat skutečnou fyzikální trajektorii. Jak jsme výše ukázali, je ekvivalentní požadovat, aby funkce $q^i(t)$ řešily soustavu (2.15) n rovnic

$$\frac{\partial L}{\partial q^i} \;-\; \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right) \;=\; 0\,, \qquad \forall i \in \{1, 2, \ldots, n\}, \tag{2.16}$$

pro jednotlivé složky funkce $\boldsymbol{q}(t) = (q^1(t), \ldots, q^n(t))$. Rovnice (2.16), resp. (2.15), se nazývají *Eulerovy-Lagrangeovy rovnice.* Řešením Eulerových-Lagrangeových rovnic jsou pak funkce $\boldsymbol{q}(t)$.

Při výpočtu variace funkcionálu $\mathcal{S}$ jsme předpokládaly, že jsou všechny křivky $\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}(t)$ parametrizované jedním stejným parametrem t. Variace za předpokladu parametrizace křivek $\widetilde{\boldsymbol{\kappa}}(t)$ jedním stejným parametrem budeme nazývat *izochronní* variace.

[2]Jednu implikaci jsme výše dokázaly, a druhá je zřejmá. Pokud totiž platí rovnost (2.15), pak zjevně platí i rovnost (2.13).

2.2 Hamiltonova mechanika

V této sekci se stručně se zmíníme o alternativních formulacích pohybových rovnic mechaniky, které nás, v následující kapitole, přivedou k Hamiltonovým kanonickým rovnicím, generujícím funkcím a Hamiltonově-Jacobiho rovnici, jejímž řešením, jak později ukážeme, bude možné alternativně získat Hamiltonovu funkci.

Vztahem (2.5) jsme definovali tzv. zobecněné hybnosti $p_i = p_i\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)$, $i \in \{1, \ldots, n\}$, obecně jako funkce času t, zobecněných souřadnic $\boldsymbol{q}$ a zobecněných rychlostí $\dot{\boldsymbol{q}}$. Názorně nyní označíme

$$\frac{\partial L\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)}{\partial \dot{q}^{\,i}} \;\equiv\; F_i\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big) \;=\; p_i(t)\,, \tag{2.17}$$

pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$, kde jsme hodnotu funkcí F_i označily jako p_i. Hodnoty $\boldsymbol{p} \equiv (p_1, \ldots, p_n)$, kde $p_i \in \mathbb{R}$, nyní budeme chápat jako nezávislé proměnné. Inverzí funkcí $F_i\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \dot{\boldsymbol{q}}\big)$ vzhledem k rychlostem pak vyjádříme zobecněné rychlosti jako funkce $\dot{q}^{\,i}(t) = \dot{q}^{\,i}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{p}(t)\big)$ pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$.

Zobecněné rychlosti $\dot{\boldsymbol{q}}$ a hybnosti $\boldsymbol{p}$ jsou pak navzájem inverzní ve smyslu

$$\begin{aligned} \dot{q}^{\,i}(t) &= \dot{q}^{\,i}\Big(t\,,\; \boldsymbol{q}(t)\,,\; \boldsymbol{p}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)\Big)\,, \quad \forall i \in \{1, \ldots, n\}\,, \\ p_j(t) &= p_j\Big(t\,,\; \boldsymbol{q}(t)\,,\; \dot{\boldsymbol{q}}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{p}(t)\big)\Big)\,, \quad \forall j \in \{1, \ldots, n\}\,. \end{aligned} \tag{2.18}$$

Definujeme nyní novou funkci $H : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ předpisem

$$H\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{p}(t)\big) \;\equiv\; \sum_{i=1}^{n} p_i(t) \cdot \dot{q}^{\,i}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{p}(t)\big) \;-\; L\Big(t\,, \boldsymbol{q}(t)\,, \dot{\boldsymbol{q}}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{p}(t)\big)\Big)\,, \tag{2.19}$$

a budeme ji nazvývat *hamiltoniánem* studovaného systému.

Podíváme-li se na definiční vztah (2.6) zobecněné energie, vidíme, že dosadíme-li funkce zobecněných rychlostí $\dot{\boldsymbol{q}}(t) = \dot{\boldsymbol{q}}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{p}(t)\big)$ do výrazu (2.6) pro zobecněnou energii, a využijeme vztahů (2.18), dostaneme:

$$E\Big(t\,,\; \boldsymbol{q}(t)\,,\; \dot{\boldsymbol{q}}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{p}(t)\big)\Big) \;=\; H\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{p}(t)\big)\,. \tag{2.20}$$

Pokud naopak dosadíme funkce $\boldsymbol{p}(t) = \boldsymbol{p}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)$ zobecněné hybnosti do výrazu (2.19) pro hamiltonián, využijeme vztahů (2.18), dostaneme pak analogicky:

$$H\Big(t\,,\; \boldsymbol{q}(t)\,,\; \boldsymbol{p}\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)\Big) \;=\; E\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}(t)\big)\,. \tag{2.21}$$

Hamiltonián a zobecněná energie tedy popisují stejnou fyzikální veličinu - celkovou energii systému v čase t, ale každá z obou funkcí prostřednictvím jiných proměnných.

Učiňme ještě užitečné pozorování. Do Eulerových-Lagrangeových rovnic (2.16) dosadíme vyjádření zobecněných hybností (2.17), čímž pro $\forall i \in \{1, 2, \ldots, n\}$ dostaneme vztahy

$$\frac{\partial L}{\partial q^i} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right) = \frac{dp_i}{dt} \equiv \dot{p}^{\,i} . \tag{2.22}$$

Z hamiltoniánu (2.19), popisujícího nějaký zkoumaný systém, lze pak odvodit pohybové rovnice, popisující dynamiku systému. Zderivujeme-li hamiltonián (2.19) podle zobecněné souřadnice q^j, dostaneme

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)}{\partial q^j} &= \frac{\partial}{\partial q^j}\left(\sum_{i=1}^{n} p_i \cdot \dot{q}^{\,i}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big) - L\Big(t\,, \boldsymbol{q}\,, \dot{\boldsymbol{q}}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)\Big)\right) = \\
&= \sum_{i=1}^{n} p_i \frac{\partial \dot{q}^{\,i}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)}{\partial q^j} - \frac{\partial L\big(t\,, \boldsymbol{q}\,, \dot{\boldsymbol{q}}\big)}{\partial q^j} - \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L\big(t\,, \boldsymbol{q}\,, \dot{\boldsymbol{q}}\big)}{\partial \dot{q}^i} \frac{\partial \dot{q}^{\,i}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)}{\partial q^j} = \\
&= \sum_{i=1}^{n} p_i \frac{\partial \dot{q}^{\,i}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)}{\partial q^j} - \dot{p}^{\,j} - \sum_{i=1}^{n} p_i \frac{\partial \dot{q}^{\,i}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)}{\partial q^j} = -\dot{p}^{\,j} .
\end{aligned} \tag{2.23}$$

Dále zderivujeme hamiltonián (2.19) podle zobecněné hybnosti p_j, a dostaneme

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)}{\partial p_j} &= \frac{\partial}{\partial p_j}\left(\sum_{i=1}^{n} p_i \cdot \dot{q}^{\,i}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big) - L\Big(t\,, \boldsymbol{q}\,, \dot{\boldsymbol{q}}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)\Big)\right) = \\
&= \dot{q}^{\,j} + \sum_{i=1}^{n} p_i \frac{\partial \dot{q}^{\,i}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)}{\partial p_j} - \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L\big(t\,, \boldsymbol{q}\,, \dot{\boldsymbol{q}}\big)}{\partial \dot{q}^i} \frac{\partial \dot{q}^{\,i}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)}{\partial p_j} = \\
&= \dot{q}^{\,j} + \sum_{i=1}^{n} p_i \frac{\partial \dot{q}^{\,i}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)}{\partial p_j} - \sum_{i=1}^{n} p_i \frac{\partial \dot{q}^{\,i}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)}{\partial p_j} = \dot{q}^{\,j} .
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Nakonec můžeme ještě zderivovat hamiltonián (2.19) podle času t, čímž dostaneme

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{i=1}^{n} p_i \cdot \dot{q}^{\,i}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big) - L\Big(t\,, \boldsymbol{q}\,, \dot{\boldsymbol{q}}\big(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}\big)\Big)\right) = \\
&= \sum_{i=1}^{n} \frac{dp_i}{dt}\,\dot{q}^{\,i} + \sum_{i=1}^{n} p_i \frac{\partial \dot{q}^{\,i}}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial t} - \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial q^i}\frac{dq^i}{dt} - \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\frac{\partial \dot{q}^{\,i}}{\partial t} = \\
&= \sum_{i=1}^{n} \dot{p}_i\,\dot{q}^{\,i} + \sum_{i=1}^{n} p_i \frac{\partial \dot{q}^{\,i}}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial t} - \sum_{i=1}^{n} \dot{p}_i\,\dot{q}^{\,i} - \sum_{i=1}^{n} p_i \frac{\partial \dot{q}^{\,i}}{\partial t} = \\
&= -\frac{\partial L\big(t, \boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}\big)}{\partial t} .
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Celkem tak dostáváme soustavu $2n + 1$ rovnic

$$\frac{\partial H\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p}\big)}{\partial q^i} \;=\; -\dot{p}_i\,, \qquad \frac{\partial H\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p}\big)}{\partial p_i} \;=\; \dot{q}^{\,i}\,, \qquad \forall i \in \{1, \dots, n\}\,, \tag{2.26}$$

$$\frac{\partial H\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p}\big)}{\partial t} \;=\; -\,\frac{\partial L\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \dot{\boldsymbol{q}}\big)}{\partial t}\,, \tag{2.27}$$

kde $2n$ rovnic (2.26) se nazývá *Hamiltonovy kanonické rovnice.*

Pro hledání fyzikálních trajektorií systému popsaného lagrangiánem L nebo hamiltoniánem H mají Hamiltonovy kanonické rovnice stejný principiální význam jako Eulerovy-Lagrangeovy rovnice. Jedná se totiž o pohybové rovnice, popisující dynamiku systému, jejichž řešením jsou funkce $\boldsymbol{q}(t)$ a $\boldsymbol{p}(t)$.

Mějme dále nějakou C^1 funkci $f = f(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})$, kde $\boldsymbol{q}$ a $\boldsymbol{p}$ jsou zobecněné souřadnice, a jim příslušné zobecněné hybnosti. Nechť funkce f popisuje nějakou veličinu fyzikálního systému, jehož dynamika je popsána hamiltoniánem $H(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})$. Pro totální derivaci f podle času pak platí

$$\begin{aligned}
\frac{df(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{dt} \;&=\; \frac{\partial f(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{\partial t} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{\partial q^k}\,\frac{dq^k}{dt} - \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{\partial p^k}\,\frac{dp_k}{dt} \;= \\
&= \frac{\partial f(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{\partial t} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{\partial q^k}\,\frac{\partial H(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{\partial p_k} \;- \\
&\qquad\qquad - \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial H(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{\partial q^k}\,\frac{\partial f(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{\partial p_k} \;= \\
&= \frac{\partial f(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{\partial t} + \{f,\, H\}\,,
\end{aligned} \tag{2.28}$$

kde jsme označily

$$\{f,\, H\} \;\equiv\; \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial q^k}\,\frac{\partial H}{\partial p_k} \;-\; \frac{\partial H}{\partial q^k}\,\frac{\partial f}{\partial p_k} \right)\,, \tag{2.29}$$

jako tzv. *Poissonovy závorky* systému.

Rychlost změny veličiny f, popsané funkcí $f(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})$, lze pak pomocí Poissonových závorek vyjádřit jako

$$\dot{f} \;=\; \frac{df(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{dt} \;=\; \frac{\partial f(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})}{\partial t} + \{f,\, H\}\,. \tag{2.30}$$

Obecněji, pro nějaké dvě funkce $f = f(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})$ a $g = g(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p})$ definujeme Poissonovy závorky $\{\cdot, \cdot\}$ jako

$$\{f,\, g\} \;\equiv\; \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial q^k}\,\frac{\partial g}{\partial p_k} \;-\; \frac{\partial g}{\partial q^k}\,\frac{\partial f}{\partial p_k} \right)\,. \tag{2.31}$$

Poissonovy závorky jsou velmi užitečné při přechodu do kvantové mechaniky. Jedním z výchozích postulátů kvantové mechaniky je totiž tvz. kvantovací postulát:

$$\{A,\, B\} \quad \longrightarrow \quad \left[\widehat{A},\, \widehat{B}\right] \;\equiv\; \widehat{A}\widehat{B} \,-\, \widehat{B}\widehat{A}\,, \tag{2.32}$$

$$C = \{A,\, B\} \quad \longrightarrow \quad i\hbar\widehat{C} = \left[\widehat{A},\, \widehat{B}\right]\,. \tag{2.33}$$

kde $\widehat{A}$, $\widehat{B}$, $\widehat{C}$ jsou kvantově mechanické hermitovské (samosdružené) operátory, odpovídající pozorovatelným veličinám, které jsou v klasické fyzice reprezentované funkcemi A, B a C.

Dosadíme-li do Poissonových závorek (2.31) zobecněné souřadnice q^k a hybnosti p_j, $k,j \in \{1,\ldots,\, n\}$, dostaneme

$$\left\{q^k,\, q^j\right\} \;=\; 0\,, \qquad \{p_k,\, p_j\} \;=\; 0\,, \qquad \left\{q^k,\, p_j\right\} \;=\; \delta^k_j\,. \tag{2.34}$$

kde δ^k_j je Kroneckerovo delta. Pro zobecněné souřadnice $\boldsymbol{q}$ a jim příslušné zobecněné hybnosti $\boldsymbol{p}$ tedy komutační relace

$$\left[\widehat{q}^k,\, \widehat{q}^j\right] \;=\; 0\,, \qquad \left[\widehat{p}_k,\, \widehat{p}_j\right] \;=\; 0\,, \qquad \left[\widehat{q}^k,\, \widehat{p}_j\right] \;=\; i\hbar\,\delta^k_j\,, \tag{2.35}$$

kde $\widehat{\boldsymbol{q}} = (\widehat{q}^1,\ldots,\, \widehat{q}^n)$ a $\widehat{\boldsymbol{p}} = (\widehat{p}_1,\ldots,\, \widehat{p}_n)$ jsou operátory polohy a hybnosti, odpovídající klasickým zobecněným souřadnicím $\boldsymbol{q}$ a zobecněným hybnostem $\boldsymbol{p}$.

Kvantovací postulát (2.35) platí po libovolné zobecněné souřadnice a odpovídající zobecněné hybnosti. U nekartézských operátorů hybnosti ale vzniká problém s jejich hermiticitou (tedy i tvarem) v odpovídající (nekartézské) souřadnicové reprezentaci. Kvantování v obecně nekartézských souřadnicích zde však potřebovat nebudeme, a nebudeme se jím tedy ani dále zabývat. Toto téma je pak podrobně rozebráno v textech [10] *The Principles of Quantum Mechanics* od Paula Diraca a [11] *Quantum Mechanics I* od Petera Riseborougha.

2.3 Hamiltonova-Jacobiho rovnice

Hamiltonián (2.19) jsme až doposud vyjadřovaly v nějakých obecných souřadnicích $\boldsymbol{q}$ a hybnostech $\boldsymbol{p}$, a dostali jsme potom Hamiltonovy kanonické rovnice ve tvaru (2.26). Pokusme se najít nějaké nové souřadnice $\boldsymbol{Q} \equiv (Q^1,\ldots,\, Q^n)$ a hybnosti $\boldsymbol{P} \equiv (P_1,\ldots,\, P_n)$. Tyto nové souřadnice budou funkcemi starých souřadnic, tedy

$$\begin{aligned} Q^i &= Q^i(t,\, q^1,\ldots,\, q^n,\, p_1,\ldots,\, p_n)\,, \\ P_i &= P_i(t,\, q^1,\ldots,\, q^n,\, p_1,\ldots,\, p_n)\,, \qquad \forall i \in \{1,\ldots,n\}\,. \end{aligned} \tag{2.36}$$

Předpokládejme, že existují inverze těchto nových souřadnic[3]

$$\begin{aligned} q^j &= q^j(t,\, Q^1,\ldots,\, Q^n,\, P_1,\ldots,\, P_n)\,, \\ p_j &= p_j(t,\, Q^1,\ldots,\, Q^n,\, P_1,\ldots,\, P_n)\,, \qquad \forall j \in \{1,\ldots,n\}\,. \end{aligned} \tag{2.37}$$

[3] Tedy že je Jacobián, determinant Jacobiho matic transformace (2.36), nenulový.

Označme $K(t,\,\boldsymbol{Q},\,\boldsymbol{P})$ jako hamiltonián systému transformovaný do nových souřadnic a hybností. Od těchto nových souřadnic $\boldsymbol{Q}$ a hybností $\boldsymbol{P}$ pak budeme požadovat, aby spolu s novým hamiltoniánem K splňovaly stejné kanonické rovnice jako staré souřadnice, nebo-li aby pro $\forall i \in \{1,\ldots,n\}$ platilo

$$\frac{\partial K\big(t,\,\boldsymbol{Q},\,\boldsymbol{P}\big)}{\partial Q^i} \;=\; -\dot{P}_i\,, \qquad \frac{\partial K\big(t,\,\boldsymbol{Q},\,\boldsymbol{P}\big)}{\partial P_i} \;=\; \dot{Q}^{\,i}\,. \tag{2.38}$$

Nové rychlosti $\dot{\boldsymbol{Q}}$ můžeme vyjádřit pomocí nových souřadnic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{P}$ tak, že je nejprve vyjádříme ve starých souřadnicích pomocí vztahu (2.30):

$$\dot{Q}^{\,i}(t,\,\boldsymbol{q},\,\boldsymbol{p}) \;=\; \frac{\partial\, Q^{\,i}(t,\,\boldsymbol{q},\,\boldsymbol{p})}{\partial t} + \big\{Q^{\,i},\,H\big\}\;, \qquad \forall i \in \{1,\ldots,n\}\,, \tag{2.39}$$

a dosadíme do nich inverzní transformace souřadnic (2.37), čímž konečně dostaneme $\dot{\boldsymbol{Q}}(t,\,\boldsymbol{Q},\,\boldsymbol{P}) = \dot{\boldsymbol{Q}}\big(t\,,\;\boldsymbol{q}(t,\,\boldsymbol{Q},\,\boldsymbol{P})\,,\;\boldsymbol{p}(t,\,\boldsymbol{Q},\,\boldsymbol{P})\big)$.

Ze vztahu (2.19) pro hamiltonián vyjádříme lagrangián jako funkci (starých) souřadnic a hybností

$$L\big(t,\,\boldsymbol{q}(t),\,\boldsymbol{p}(t)\big) \;=\; \sum_{i=1}^{n} p_i(t)\cdot\dot{q}^{\,i}\big(t,\,\boldsymbol{q}(t),\,\boldsymbol{p}(t)\big) \;-\; H\big(t,\,\boldsymbol{q}(t),\,\boldsymbol{p}(t)\big)\,. \tag{2.40}$$

Analogicky můžeme vyjádřit i lagrangián Λ, transformovaný do nových souřadnic a hybností jako

$$\Lambda\big(t,\,\boldsymbol{Q}(t),\,\boldsymbol{P}(t)\big) \;=\; \sum_{i=1}^{n} P_i(t)\cdot\dot{Q}^{\,i}\big(t,\,\boldsymbol{Q}(t),\,\boldsymbol{P}(t)\big) \;-\; K\big(t,\,\boldsymbol{Q}(t),\,\boldsymbol{P}(t)\big)\,. \tag{2.41}$$

Hamiltonovy kanonické rovnice jsou ekvivalentní s Hamiltonovým variačním principem (2.13). Rovnosti (2.26) a (2.38) ve starých i nových proměnných budou tedy splněny právě když budou platit podmínky

$$\begin{aligned}
\delta\int_{t_1}^{t_2}\left(\sum_{i=1}^{n} p_i(t)\cdot\dot{q}^{\,i}\big(t,\,\boldsymbol{q}(t),\,\boldsymbol{p}(t)\big) \;-\; H\big(t,\,\boldsymbol{q}(t),\,\boldsymbol{p}(t)\big)\right)dt \;&=0\,,\\
\delta\int_{t_1}^{t_2}\left(\sum_{i=1}^{n} P_i(t)\cdot\dot{Q}^{\,i}\big(t,\,\boldsymbol{Q}(t),\,\boldsymbol{P}(t)\big) \;-\; K\big(t,\,\boldsymbol{Q}(t),\,\boldsymbol{P}(t)\big)\right)dt \;&=0\,,
\end{aligned} \tag{2.42}$$

které musí splňovat staré i nové funkce $\boldsymbol{q}(t)$, $\boldsymbol{p}(t)$, $\boldsymbol{Q}(t)$ a $\boldsymbol{P}(t)$, aby to byly fyzikální trajektorie (a odpovídající hybnosti) studovaného systému.

Vztah mezi hamiltoniány, resp. lagrangiány vyjádřenými ve starých a nových proměnných najdeme srovnáním podmínek (2.42). Všimněme si, že tyto podmínky budou obecně splněny i v případech, kdy se oba integrandy v podmínkách (2.42) liší o úplnou časovou derivaci nějaké funkce $G(t)$, tj. pokud platí

$$L\big(t,\,\boldsymbol{q}(t),\,\boldsymbol{p}(t)\big) \;-\; \Lambda\big(t,\,\boldsymbol{Q}(t),\,\boldsymbol{P}(t)\big) \;=\; \frac{d}{dt}\,G\big(t,\,\boldsymbol{q}(t),\,\boldsymbol{p}(t),\,\boldsymbol{Q}(t),\,\boldsymbol{P}(t)\big)\,, \tag{2.43}$$

kde $G(t) = G\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{p}(t),\, \boldsymbol{Q}(t),\, \boldsymbol{P}(t)\big)$ je nějaká reálná funkce, která může, ve vší obecnosti záviset explicitně na čase i na všech starých i nových proměnných. Integrací rovnice (2.43) podle času od t_1 do t_2, totiž dostaneme

$$\int_{t_1}^{t_2} L\, dt \;-\; \int_{t_1}^{t_2} \Lambda\, dt \;=\; \int_{t_1}^{t_2} \frac{dG}{dt}\, dt \;=\; G(t_2) \;-\; G(t_1)\,, \tag{2.44}$$

kde poslední člen $G(t_2) - G(t_1) \in \mathbb{R}$ je konstantní. Variací rovnosti (2.44), a aplikací Hamiltonova variačního principu (2.13) pak dostaneme právě podmínky (2.42), neboť variace $G(t_2) - G(t_1)$ je nulová, viz. (1.60).

Vzhledem k transformačním vztahům (2.36) svazujícím staré a nové proměnné, můžeme funkci G uvažovat v následujících čtyřech podobách

$$\begin{aligned} G_1 &= G_1\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{Q}(t)\big)\,, \quad & G_2 &= G_2\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{P}(t)\big)\,, \\ G_3 &= G_3\big(t,\, \boldsymbol{p}(t),\, \boldsymbol{Q}(t)\big)\,, \quad & G_4 &= G_4\big(t,\, \boldsymbol{p}(t),\, \boldsymbol{P}(t)\big)\,. \end{aligned} \tag{2.45}$$

Tyto čtyři funkce se nazývají *generující funkce* kanonických transformací (typ 1, 2, 3 nebo 4).

Do vztahu (2.43) mezi starým a novým lagrangiánem nejprve vložíme vyjádření (2.40) a (2.41) obou lagrangiánů, a za funkci G dosadíme generující funkci G_1. Tímto postupem dostaneme

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{n} p_i\, \dot{q}^{\,i} \;-\; H(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p}) \;-\; \sum_{i=1}^{n} P_i\, \dot{Q}^{\,i} \;+\; K(t,\, \boldsymbol{Q},\, \boldsymbol{P}) \;= \\ &\qquad = \;\frac{d\, G_1(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{Q})}{dt} \;=\; \frac{\partial\, G_1}{\partial t} \;+\; \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial\, G_1}{\partial q^i}\, \dot{q}^{\,i} \;+\; \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial\, G_1}{\partial Q^i}\, \dot{Q}^{\,i}\,. \end{aligned} \tag{2.46}$$

Protože jsou souřadnice q^i a Q^i navzájem nezávislé, bude rovnice (2.46) platit pro různé q^i a Q^i pouze tehdy, budou-li se v ní, na obou stranách schodovat koeficienty u $\dot{Q}^{\,i}$ a $\dot{q}^{\,i}$. Porovnáním zmíněných koeficientů z obou stran rovnice dostaneme, pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$, vztahy

$$p_i \;=\; \frac{\partial\, G_1\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{Q}\big)}{\partial q^i}\,, \qquad -P_i \;=\; \frac{\partial\, G_1\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{Q}\big)}{\partial Q^i}\,, \tag{2.47}$$

pro derivace generující funkce podle souřadnic, a vztah

$$K\big(t,\, \boldsymbol{Q},\, \boldsymbol{P}\big) \;=\; H\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{p}\big) + \frac{\partial\, G_1\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{Q}\big)}{\partial t}\,, \tag{2.48}$$

mezi starým a novým hamiltoniánem.

Oba hamiltoniány, a také staré a nové hybnosti musí být funkcemi stejných nezávislých proměnných jako příslušná generující funkce. Pokud jsme tedy v (2.48) volili generující funkci $G_1(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{Q})$, bude pak pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$ platit

$p_i = p_i(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{Q})$ a $P_i = P_i(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{Q})$, a odtud pak $H = H\big(t\,,\ \boldsymbol{q}\,,\ \boldsymbol{p}(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{Q})\big)$ a $K = K\big(t\,,\ \boldsymbol{Q}\,,\ \boldsymbol{P}(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{Q})\big)$.

Jednotlivé generující funkce jsou navzájem svázané Legendrovými transformacemi. Dosadíme-li tedy do vztahu (2.43) za funkci G jakoukoli ze zbylých generujících funkcí G_2, G_3 a G_4, lze podobným postupem odvodit analogické vztahy ke vztahům (2.47). Pro všechny čtyři generující funkce pak platí následující: derivace příslušné generující funkce podle staré souřadnice (resp. hybnosti) je rovna kladně nebo záporně vzaté staré hybnosti (resp. souřadnici), a naopak derivace podle nové souřadnice (resp. hybnosti) je rovna kladně nebo záporně vzaté nové hybnosti (resp. souřadnici).

Uvažujme nyní takové nové souřadnice $\boldsymbol{Q}$ a nové hybnosti $\boldsymbol{P}$, pro které bude transformovaný hamiltonián K nulový, tj. $K(t,\, \boldsymbol{Q},\, \boldsymbol{P}) = 0$. Z Hamiltonových kanonických rovnic (2.38) pak pro takové souřadnice plyne, že pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$ jsou $\dot{Q}^i = 0$ a $\dot{P}_i = 0$. Nové souřadnice tedy budou konstantní v čase (budou to integrály pohybu), tj. $Q^i(t) =$ konst. a $P_i(t) =$ konst. pro $\forall t \in \mathbb{R}$. Označme konstantní nové souřadnice jako $\boldsymbol{Q} \equiv \boldsymbol{\alpha} =$ konst. a konstantní nové hybnosti jako $\boldsymbol{P} \equiv -\boldsymbol{\beta} =$ konst. Vztah (2.48) mezi starým a novým hamiltoniánem se pak zjednoduší na tvar

$$H\left(t,\, q^1, \ldots,\, q^n,\, \frac{\partial\, G_1(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{\alpha})}{\partial q^1}, \ldots,\, \frac{\partial\, G_1(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{\alpha})}{\partial q^n}\right) + \frac{\partial\, G_1(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{\alpha})}{\partial t} \;=\; 0\,, \tag{2.49}$$

kde jsme za staré hybnosti $\boldsymbol{p}$ dosadily ze vztahu (2.47), a kde $\boldsymbol{\alpha}$ jsou konstanty. Rovnice (2.48) se nazývá *Hamiltonovou-Jacobiho ronicí* systému. Jejím řešením jsou funkce $G_1\big(t,\, \boldsymbol{q}(t),\, \boldsymbol{\alpha}\big)$ závislé na čase t, na souřadnicích $\boldsymbol{q}$, a na nějakých konstantách $\boldsymbol{\alpha}$. Zderivujeme-li funkci G_1 podle konstant $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^1, \ldots,\, \alpha^n)$, dostaneme pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$ vztahy

$$\frac{\partial\, G_1\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{\alpha}\big)}{\partial \alpha^i} \;\equiv\; \frac{\partial\, G_1\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \boldsymbol{Q}\big)}{\partial Q^i} \;=\; -P_i \;\equiv\; \beta_i \;=\; \text{konst.} \tag{2.50}$$

Inverzí n-tice rovnic (2.50) lze pak získat funkce $\boldsymbol{q}(t,\, \boldsymbol{\alpha},\, \boldsymbol{\beta})$, představující trajektorii pohybujícího se systému.

2.4 Unitární evoluce v kvantové mechanice

Mějme nějaký Hilbertův prostor $\mathcal{H}$, příslušející studovanému kvantovému systému, a nějaký stavový (ket)vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, resp. kovektor (bra vektor) $\langle\psi| \in \mathcal{H}$, kde $\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger \equiv \big(\,|\psi\rangle^T\,\big)^*$. Budeme uvažovat Schrödingerovu reprezentaci, v niž se kvantové stavy $|\psi\rangle$ mění s časem, a hermitovské operátory $\widehat{A}$ odpovídající pozorovatelným veličinám jsou časově nezávislé. Označme proto $|\psi(t)\rangle$ jako vyjádření stavu $|\psi\rangle$ v nějakém obecném čase $t \in \mathbb{R}$. V nerelativistické kvantové mechanice předpokládáme , že evoluce libovolných stavů $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$, resp. $\langle\psi(t)| \in \mathcal{H}$, je popsána Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle \;=\; \widehat{H}\,|\psi(t)\rangle\;, \quad \text{resp.} \quad -\,i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\langle\psi(t)| \;=\; \langle\psi(t)|\,\widehat{H}\,, \tag{2.51}$$

kde $\widehat{H}$ je operátor hamiltoniánu nějakého studovanému kvantovému systému. Schrödingerova rovnice (2.51) nám umožňuje najít stav $|\psi(t)\rangle$ systému v čase t, známe-li operátor hamiltoniánu studovaného systému.

Evoluce samotných stavů $|\psi\rangle$ je ale v kvantové mechanice popsána také tzv. *evolučním operátorem* $\widehat{U}$. Předpokládejme, že budou evoluční operátory $\widehat{U}$ záviset pouze na délce trvání kvantové evoluce. Evoluční operátor pak definujeme jako operátor $\widehat{U}(t)$, $t \in \mathbb{R}$, který vyvíjí stavy v nějakém počátečním čase $t_1 \in \mathbb{R}$ do stavů v koncovém čase $t_2 \equiv t_1 + t$. Přesněji: jsou-li $|\psi(t_1)\rangle$, nebo $\langle\psi(t_1)|$ stavy $|\psi\rangle$, resp. $\langle\psi|$, v čase t_1, pak

$$\widehat{U}(t)\ |\psi(t_1)\rangle \;=\; |\psi(t_1+t)\rangle \;\equiv\; |\psi(t_2)\rangle\ , \qquad \langle\psi(t_2)| \;=\; \langle\psi(t_1)|\ \widehat{U}^\dagger(t) \tag{2.52}$$

je stav $|\psi\rangle$, resp. $\langle\psi|$, v čase t_2.

Ze vztahu (2.52) je vidět, že musí být

$$|\psi(t_1)\rangle \;=\; \widehat{U}(0)\ |\psi(t_1)\rangle \quad\Longrightarrow\quad \widehat{U}(0) \;=\; \widehat{I}\,, \tag{2.53}$$

kde $\widehat{I}$ je operátor identity.

Uvažujme tři časy $t_1 < t_2 < t_3$ a stavy $|\psi(t_1)\rangle$, $|\psi(t_2)\rangle$ a $|\psi(t_3)\rangle$ v těchto časech. Z výrazu (2.52) je pak dále vidět, že

$$\begin{aligned} |\psi(t_3)\rangle \;&=\; \widehat{U}(t_3-t_2)\ |\psi(t_2)\rangle \;=\; \widehat{U}(t_3-t_2)\cdot\widehat{U}(t_2-t_1)\ |\psi(t_1)\rangle \;= \\ &=\; \widehat{U}(t_3-t_1)\ |\psi(t_1)\rangle\ , \end{aligned} \tag{2.54}$$

odkud dostáváme, že

$$\widehat{U}(t_3-t_2)\cdot\widehat{U}(t_2-t_1) \;=\; \widehat{U}(t_3-t_1)\,. \tag{2.55}$$

V kvantové mechanice požadujeme, aby se normování stavů s časem neměnilo, tedy aby pro $\forall t_1,\, t_2 \in \mathbb{R}$, platilo

$$\langle\psi(t_1)|\psi(t_1)\rangle \;=\; \langle\psi(t_2)|\psi(t_2)\rangle \;=\; \langle\psi|\psi\rangle \;=\; \|\psi\|^2\,. \tag{2.56}$$

Kombinací vztahů (2.52) a (2.56) dostáváme:

$$\langle\psi(t_1)|\psi(t_1)\rangle \;=\; \langle\psi(t_2)|\ \widehat{U}^\dagger(t_2-t_1)\cdot\widehat{U}(t_2-t_1)\ |\psi(t_2)\rangle \;=\; \langle\psi(t_2)|\psi(t_2)\rangle\ . \tag{2.57}$$

odkud plyne, že evoluční operátor $\widehat{U} = \widehat{U}(t_2 - t_1)$ musí být pro $\forall t_1 < t_2 \in \mathbb{R}$ unitárním operátorem, nebo-li že pro něj platí

$$\widehat{U}^\dagger\,\widehat{U} \;=\; \widehat{U}\,\widehat{U}^\dagger \;=\; \widehat{I} \quad\Longrightarrow\quad \widehat{U}^\dagger \;=\; \widehat{U}^{-1}\,. \tag{2.58}$$

Ze vztahů (2.52) a (2.53) a dále plyne

$$|\psi(t_2)\rangle \;=\; \widehat{U}(t_2-t_1)\ |\psi(t_1)\rangle \;\Longrightarrow\; |\psi(t_1)\rangle \;=\; \widehat{U}^\dagger(t_2-t_1)\ |\psi(t_2)\rangle\ . \tag{2.59}$$

Pro časy $t_1 < t_2$ pak dostáváme evoluční operátor vyvíjející zpátky v čase

$$\widehat{U}(t_1-t_2) \;\equiv\; \widehat{U}^\dagger(t_2-t_1) \;=\; \widehat{U}^{-1}(t_2-t_1)\,. \tag{2.60}$$

Z obecných vlastností operátorů na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ a vztahů (2.53), (2.55) a (2.60) vidíme, že množina $\{\widehat{U}(t)\,;\, t \in \mathbb{R}\}$ evolučních operátorů tvoří jednoparametrickou grupu s operací $\cdot$ násobení (skládání) operátorů.

Pomocí Schrödingerovy rovnice se nyní pokusíme odvodit explicitní tvar evolučních operátorů $\widehat{U}(t)$. Stav $|\psi(t)\rangle$ ve Schrödingerově rovnici (2.51) vyjádříme pomocí evolučního operátoru $\widehat{U}(t)$ jako $|\psi(t)\rangle = \widehat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle$. Stav $|\psi(0)\rangle$ je stacionárním stavem systému, který nezávisí a čase. Úpravou Schrödingerovy rovnice dostaneme

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\widehat{U}(t) \;-\; \widehat{H}\,\widehat{U}(t) \right) |\psi(0)\rangle \;=\; 0\,. \tag{2.61}$$

Pro netriviální stacionární stav $|\psi(0)\rangle \neq 0$ pak musí být operátor v závorkách na levé straně rovnice (2.61) nulový, čímž dostáváme rovnici přímo pro evoluční operátor

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\widehat{U}(t) \;=\; \widehat{H}\,\widehat{U}(t)\,. \tag{2.62}$$

Předpokládáme-li, že operátor hamiltoniánu $\widehat{H}$ v rovnici (2.62) je nezávislý na čase t, můžeme snadno najít řešení této rovnice jako

$$\widehat{U}(t) \;=\; \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot t \right)\,. \tag{2.63}$$

Obecněji pro dva časy t_1 a t_2 pak je

$$\widehat{U}(t_2 - t_1) \;=\; \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_2 - t_1) \right)\,. \tag{2.64}$$

Zdůrazněme, že vyjádření (2.63) a (2.64) platí pouze pro systémy s časově nezávislým operátorem hamiltoniánu.

3. Hamiltonova funkce

Nyní se budeme zabývat tzv. Hamiltonovou funkcí a jejími nejdůležitějšími vlastnostmi v oblasti klasické mechaniky.

Definujme funkci $S : \mathbb{R} \times \Omega \times \mathbb{R} \times \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ předpisem

$$S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;=\; \int\limits_{t_A}^{t_B} L\big(t,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big)\, dt\,, \tag{3.1}$$

kde $t_A \in \mathbb{R}$ a $t_B \in \mathbb{R}$ jsou počáteční a koncové časy, $\boldsymbol{q_A} = (q_A^1, \dots, q_A^n) \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ a $\boldsymbol{q_B} = (q_{\boldsymbol{B}}^1, \dots, q_{\boldsymbol{B}}^n) \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ jsou počáteční a koncové polohy skutečné fyzikální trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t) = \{q_{AB}^1(t), \dots, q_{AB}^n(t)\}$ studovaného systému, takové že trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$ prochází bodem $\boldsymbol{q_A}$ v čase t_A a bodem $\boldsymbol{q_B}$ v čase t_B, tj. požadujeme, aby trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$ splňovala okrajové podmínky

$$\boldsymbol{q_{AB}}(t_A) = \boldsymbol{q_A}\,, \quad \boldsymbol{q_{AB}}(t_B) = \boldsymbol{q_B}\,, \tag{3.2}$$

nebo-li $q_{AB}^i(t_A) = q_A^i$ a $q_{AB}^i(t_B) = q_B^i$ pro $\forall i \in \{1, \dots, n\}$.

Hodnoty $\boldsymbol{q_A}$, t_A, $\boldsymbol{q_B}$ a t_B jsou přitom voleny libovolně, a nezávisle na sobě. Funkci S definovanou v (3.1) budeme nazývat *Hamiltonova funce.*

Na rozdíl od Hamiltonova akčního funkcionálu, který funguje na všech hypotetických trajektoriích, Hamiltonova funkce funguje na konkrétní skutečné fyzikální trajektorii zadané počátečním a koncovým bodem v odpovídajícím počátečním a koncovém čase. Pomocí akčního funkcionálu přiřazujeme všech možným, i nefyzikálních, trajektoriím hodnotu akce. Fyzikální trajektorie, systémů popsaných lagrangiánem v integrandu (2.7), jsou pak takové, pro které nabývá akční funkcionál extremálních hodnot akce. Hamiltonova funkce udává hodnotu akce na jedné konkrétní fyzikální trajektorii.

Mějme zadaný lagrangián $L\big(t,\, \boldsymbol{q},\, \dot{\boldsymbol{q}}\big)$ nějakého studovaného systému. Ze všech možných trajektorií $\boldsymbol{\kappa}(t)$ určíme všechny fyzikální trajektorie $\boldsymbol{q}(t)$ řešením obecných Eulerových-Lagrangeových rovnic (2.16). Tímto způsobem najdeme, pro systém popsaný lagrangiánem L množinu, označme ji jako $\{\boldsymbol{q}(t)\}_L$, všech přípustných fyzikálních trajektorií $\boldsymbol{q}(t)$. Zvolme si libovolné dva časy $t_A < t_B$ a dvě polohy $\boldsymbol{q_A}$, $\boldsymbol{q_B} \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$. Z množiny $\{\boldsymbol{q}(t)\}_L$ pak vybereme takovou trajektorii $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$, která splňuje námi zadané okrajové podmínky $\boldsymbol{q_A} = \boldsymbol{q_{AB}}(t_A)$ a $\boldsymbol{q_{AB}}(t_B) = \boldsymbol{q_B}$. Takovýmto postupem v principu získáme pro zvolené body t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$ fyzikální trajektorii $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$, pro kterou lze spočítat Hamiltonovu funkci $S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$.

Výše popsaný výběr konkrétní fyzikální trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$ z množiny $\{\boldsymbol{q}(t)\}_L$, procházející libovolně zadanými koncovými a počátečními body ale nemusí být takto jednoduše proveditelný. Eulerovy-Lagrangeovy rovnice (2.16) jsou soustavou n obyčejných diferenciálních rovnic druhého řádu, jejichž řešením jsou funkce

$\boldsymbol{q}(t) = \big(q^1(t), \ldots, q^n(t)\big)$. Při řešení této soustavy rovnic dostaneme funkce $\boldsymbol{q}(t)$ obsahující $2n$ konstant (např. při formálním integrování těchto diferenciálních dostaneme pro každou složku funkce $\boldsymbol{q}(t)$ dvě integrační konstanty, atd.). Hodnoty těchto $2n$ konstant lze určit známe-li například bod, kterým trajektorie $\boldsymbol{q}(t)$ prochází a rychlost v tomto bodě, nebo jako v případě Hamiltonovy funkce, známe-li dva body, kterými má trajektorie $\boldsymbol{q}(t)$ procházet. Obecně se však může stát, že pro zcela libovolně zvolené body t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$ nemusí v množině $\{\boldsymbol{q}(t)\}_L$ existovat trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$, která by procházela body $\boldsymbol{q_A}$ a $\boldsymbol{q_B}$ v časech t_A a t_B. Naopak se zase může obecně stát, že body t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$ nebude trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t) \in \{\boldsymbol{q}(t)\}_L$ zadána jednoznačně, tj. mohlo by existovat více trajektorií procházejících body $\boldsymbol{q_A}$ a $\boldsymbol{q_B}$ v časech t_A a t_B. V tom případě by pak Hamiltonova funkce nebyla předpisem (3.1) dobře definovaná[1] Celkově tedy pro zvolené body t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$ obecně buď nemusí existovat žádná trajektorie procházející těmito body, nebo takových trajektorií může existovat více. Důsledkem toho je, že Hamiltonova funkce je obecně definovaná jen na nějaké podmnožině $\mathsf{Dom}(S) \subset \mathbb{R}\times\Omega\times\mathbb{R}\times\Omega$. Pro čtveřici $(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$ z definičního oboru $\mathsf{Dom}(S)$ Hamiltonovy funkce S pak existuje právě jedna trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t) \in \{\boldsymbol{q}(t)\}_L$, splňující $\boldsymbol{q_{AB}}(t_A) = \boldsymbol{q_A}$ a $\boldsymbol{q_{AB}}(t_B) = \boldsymbol{q_B}$.

Okrajové podmínky $\boldsymbol{q_{AB}}(t_A) = \boldsymbol{q_A}$ a $\boldsymbol{q_{AB}}(t_B) = \boldsymbol{q_B}$ vnášejí do funkce $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$ dodatečnou závislost na parametrech t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$, nebo-li

$$\boldsymbol{q_{AB}} = \boldsymbol{q_{AB}}(t) = \boldsymbol{q_{AB}}(t\,;\; t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})\,. \tag{3.3}$$

Trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$ je tedy nejen funkcí času t, jakožto nezávislé proměnné, ale i parametrů t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B, $\boldsymbol{q_B}$, které jsou charakteristické pro konkrétní trajektorii, a po výběru konkrétní fyzikální trajektorie zůstávají nadále obecně fixní. Ze stejného důvodu je i $\dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}} = \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t) = \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t\,;\; t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$, apod.

Ze srovnání definičních vztahů (2.7) pro akční funkcionál a (3.1) pro Hamiltonovu funkci je vidět, že

$$S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B}) = \mathcal{S}(\boldsymbol{q_{AB}})\,, \tag{3.4}$$

tedy Hamiltonovu funkci lze chápat jako hodnoty akce (akčního funkcionálu) na konkrétní trajektorii $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$, která splňuje předepsané okrajové podmínky. Ze vztahů (3.4) a (3.3) je vidět, že $\mathcal{S}(\boldsymbol{q_{AB}}) = \mathcal{S}\big(\boldsymbol{q_{AB}}(t\,;\; t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})\big)$ je pro pevně zvolenou trajektorii skutečně funkcí čtyř proměnných t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$ (uvedeného času t ne, neboť se přes něj integruje).

Chápání Hamiltonovy funkce jako hodnoty $\mathcal{S}(\boldsymbol{q_{AB}})$ akce na konkrétní trajektorii $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$ má oproti konceptu $S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$ tu výhodu, že body t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$ obecně nemusí konkrétní fyzikální trajektorii určovat jednoznačně, tj. pro pevně zadané body mohou např. existovat dvě různé fyzikální trajektorie $\boldsymbol{q_{AB1}}(t)$ a $\boldsymbol{q_{AB2}}(t)$, které obě splňují příslušné okrajové podmínky. V tom případě by pak funkce zadaná jako $S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$ nabývala pro jednu sadu bodů $(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$ dvou různých hodnot. Tento problém již nenastává u funkce,

[1] V takovém případě by totiž jedné sadě bodů t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$ Hamiltonova funkce přiřazovala více hodnot akce, a nejednalo by se tedy vůbec o funkci.

zadané skrze akční funkcionál, jako $\mathcal{S}(\boldsymbol{q_{AB}})$, protože i pro zadanou sadu bodů $(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ musíme navíc určit, po jaké fyzikální trajektorii budeme akci počítat, čímž pak pro zadanou trajektorii (buď $\boldsymbol{q_{AB1}}(t)$, nebo $\boldsymbol{q_{AB2}}(t)$) dostaneme jedinou hodnotu akce (buď $\mathcal{S}(\boldsymbol{q_{AB1}})$, nebo $\mathcal{S}(\boldsymbol{q_{AB2}})$).

3.1 Vlastnosti Hamiltonovy funkce

Pojďme nyní prostudovat vlastnosti Hamiltonovy funkce.

Spočítejme derivaci Hamiltonovy funkce $S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ podle počáteční polohy, tj. podle parametru $\boldsymbol{q_A} \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$:

$$\frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial \boldsymbol{q_A}} \equiv \left(\frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q_A^1}, \dots, \frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q_A^n} \right) . \tag{3.5}$$

Volme nějaké $i \in \{1, \dots, n\}$, a spočítejme i-tý člen n-tice ve výrazu (3.5):

$$\frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q_A^i} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial q_A^i} \int\limits_{t_A}^{t_B} L\Big(t\,,\ \boldsymbol{q_{AB}}(t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\,,\ \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\Big)\, dt\,. \tag{3.6}$$

Opět potřebujeme prohodit integraci a derivaci podle parametru. Časy t_A a t_B volíme konečné. Interval $[t_A,\, t_B]$ je tedy omezený a uzavřený. Funkce $\boldsymbol{q}(t)$ a L jsou na intervalu $[t_A,\, t_B]$ třídy C^2, jsou tedy spojité, mají spojité první a druhé derivace, a proto jsou na tomto intervalu, i se svými prvními a druhými derivacemi omezené. Lze potom prohodit integrál a derivaci, a tedy

$$(3.6) = \int\limits_{t_A}^{t_B} \frac{\partial}{\partial q_A^i} L\Big(t\,,\ \boldsymbol{q_{AB}}(t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\,,\ \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\Big)\, dt =$$

$$= \int\limits_{t_A}^{t_B} \left(\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L(t,\, \boldsymbol{q_{AB}},\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial q_{AB}^k} \frac{\partial q_{AB}^k(t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q_A^i} + \right.$$

$$\left. + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L(t,\, \boldsymbol{q_{AB}},\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial \dot{q}_{AB}^k} \frac{\partial \dot{q}_{AB}^k(t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q_A^i} \right) dt \tag{3.7}$$

O funkcích q_{AB}^k, $k \in \{1, \dots, n\}$, předpokládáme, že jsou C^2, tedy že mají spojité druhé derivace. Parciální derivace funkcí q_{AB}^k podle času t (značeno tečkou) a podle parametru q_A^i jsou potom záměnné. Protože parametry t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$ nezávisí na čase t, jsou pak parciální derivace funkcí q_{AB}^k podle času t schodné s totální derivací q^k_{AB} podle času t. Platí tedy

$$\frac{\partial \dot q^k_{AB}}{\partial q^i_A} \equiv \frac{\partial}{\partial q^i_A}\frac{dq^k_{AB}}{dt} = \frac{\partial}{\partial q^i_A}\frac{\partial}{\partial t}\, q^k_{AB} = \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial}{\partial q^i_A}\, q^k_{AB} = \frac{d}{dt}\frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A} \tag{3.8}$$

Ve výrazu (3.7), v druhé sumě, tedy můžeme integrovat per partes, čímž dostaneme

$$(3.7) \overset{\text{per partes}}{=} \int\limits_{t_A}^{t_B} \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial L(t,\, \boldsymbol{q_{AB}},\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial q^k_{AB}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L(t,\, \boldsymbol{q_{AB}},\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial \dot q^k_{AB}} \right) \right) \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A}\, dt \; +$$
$$+ \left[\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L(t,\, \boldsymbol{q_{AB}},\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial \dot q^k_{AB}}\, \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A} \right]_{t=t_A}^{t=t_B} =$$

$$= \int\limits_{t_A}^{t_B} \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial L(t,\, \boldsymbol{q_{AB}},\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial q^k_{AB}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L(t,\, \boldsymbol{q_{AB}},\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial \dot q^k_{AB}} \right) \right) \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A}\, dt \; +$$
$$+ \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot q^k_{AB}}\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big) \cdot \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A}(t_B) \; -$$
$$- \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot q^k_{AB}}\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \cdot \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A}(t_A)\,. \tag{3.9}$$

Trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}} = \boldsymbol{q_{AB}}(t)$ musí, jakožto skutečné fyzikální trajektorie, splňovat Eulerovy-Lagrangeovy rovnice, tj. pro $\forall k \in \{1, \ldots, n\}$ platí

$$\frac{\partial L(t,\, \boldsymbol{q_{AB}},\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial q^k_{AB}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L(t,\, \boldsymbol{q_{AB}},\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial \dot q^k_{AB}} \right) = 0\,. \tag{3.10}$$

Ze vztahů (3.9) a (3.10) pak pro derivaci Hamiltonovy funkce podle i-té složky počáteční polohy dostáváme

$$\frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q^i_A} = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot q^k_{AB}}\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big) \cdot \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A}(t_B) \; -$$
$$- \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot q^k_{AB}}\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \cdot \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A}(t_A)\,. \tag{3.11}$$

Derivace funkce q^k_{AB} podle q^i_A v časech t_A a t_B pro ilustraci spočítáme dvěma způsoby. Kratší a jednoduší, avšak né úplně korektní způsob je následující: Parametry $\boldsymbol{q_A}$ a $\boldsymbol{q_B}$ jsou na sobě nezávislé. Jednotlivé složky q^j_A bodu $\boldsymbol{q_A} = \{q^1_A, \ldots, q^n_A\} \in \mathbb{R}^n$ jsou pro $\forall j \in \{1, \ldots, n\}$ také nezávislé. Pak tedy celkově dostáváme

$$\frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A}(t_B) = \frac{\partial q^k_{AB}(t_B\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q^i_A} = \frac{\partial q^k_B}{\partial q^i_A} = 0\,, \tag{3.12}$$

$$\frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A}(t_A) = \frac{\partial q^k_{AB}(t_A\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q^i_A} = \frac{\partial q^k_A}{\partial q^i_A} = \begin{cases} 0 & \text{pro } i \neq k. \\ 1 & \text{pro } i = k. \end{cases} \tag{3.13}$$

Postup (3.12) a (3.13) je jednoduchý, není ale úplně korektní. Výpočet těchto derivací tedy provedeme ještě druhým, podrobnějším a matematicky korektnějším způsobem, který současně hlouběji ilustruje formální vlastnosti trajektorií, zadaných jako $\boldsymbol{q_{AB}}(t\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$. Argument naší fyzikální trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}$ zapíšeme formálně jako $\boldsymbol{q_{AB}}(T;\, X_1,\, \boldsymbol{X_2},\, X_3,\, \boldsymbol{X_4})$, kde T je formální parametr křivky zastupující čas plynoucí podél křivky, X_1 zastupuje počáteční čas, $\boldsymbol{X_2}$ počáteční polohu, X_3 koncový čas a $\boldsymbol{X_4}$ koncovou polohu. Derivaci funkce q^k_{AB} podle q^i_A v čase t_A pak formálně počítáme z definice pomocí limit jako

$$\frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A}(t_B) \;\equiv\; \left.\frac{\partial q^k_{AB}(T;\, X_1,\, \boldsymbol{X_2},\, X_3,\, \boldsymbol{X_4})}{\partial X^i_2}\right|_{\substack{T=t_B\\ X_1=t_A\\ \boldsymbol{X_2}=\boldsymbol{q_A}\\ X_3=t_B\\ \boldsymbol{X_4}=\boldsymbol{q_B}}} =$$

$$= \lim_{h\to 0} \frac{q^k_{AB}(t_B\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A}+h\boldsymbol{e}_i,\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;-\; q^k_{AB}(t_B\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{h} =$$

$$= \lim_{h\to 0} \frac{q^k_{AB}(t_B\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A}+h\boldsymbol{e}_i,\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;-\; q^k_B}{h}\,, \tag{3.14}$$

a derivaci funkce q^k_{AB} podle q^i_A v čase t_A pak analogicky spočítáme jako

$$\frac{\partial q^k_{AB}}{\partial q^i_A}(t_A) \;\equiv\; \left.\frac{\partial q^k_{AB}(T;\, X_1,\, \boldsymbol{X_2},\, X_3,\, \boldsymbol{X_4})}{\partial X^i_2}\right|_{\substack{T=t_A\\ X_1=t_A\\ \boldsymbol{X_2}=\boldsymbol{q_A}\\ X_3=t_B\\ \boldsymbol{X_4}=\boldsymbol{q_B}}} =$$

$$= \lim_{h\to 0} \frac{q^k_{AB}(t_A\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A}+h\boldsymbol{e}_i,\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;-\; q^k_{AB}(t_A\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{h} =$$

$$= \lim_{h\to 0} \frac{q^k_{AB}(t_A\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A}+h\boldsymbol{e}_i,\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;-\; q^k_A}{h}\,. \tag{3.15}$$

Výraz $q^k_{AB}(t\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A}+h\boldsymbol{e}_i,\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ představuje k-tou složku fyzikální trajektorie, která, na rozdíl od naší původní trajektorie, v počátečním čase $t = t_A$ prochází polohou $\boldsymbol{q_A}+h\boldsymbol{e}_i$, ale v koncovém čase $t = t_B$ již prochází polohou $\boldsymbol{q_B}$, stejně jako naše původní trajektorie. Pozorujeme tedy, že platí následující důležitý vztah:

$$q^k_{AB}(\,t\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A}+h\boldsymbol{e}_i,\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;=\; \begin{cases} q^k_A + h & \text{pro } t = t_A \text{ a současně } i = k. \\ q^k_A & \text{pro } t = t_A \text{ a současně } i \neq k. \\ q^k_B & \text{pro } t = t_B. \end{cases} \tag{3.16}$$

Dosazením pozorování (3.16) do výrazů (3.14) a (3.15) dostáváme

$$(3.14) \;=\; \lim_{h\to 0} \frac{q^k_B \;-\; q^k_B}{h} \;=\; \lim_{h\to 0} \frac{0}{h} \;=\; \lim_{h\to 0} 0 \;=\; 0\,, \tag{3.17}$$

$$(3.15) \;=\; \begin{cases} \lim\limits_{h\to 0} \frac{q^k_A - q^k_A}{h} \;=\; \lim\limits_{h\to 0} 0 \;=\; 0\,, & \text{pro } i \neq k \\[2ex] \lim\limits_{h\to 0} \frac{q^k_A + h - q^k_A}{h} \;=\; \lim\limits_{h\to 0} \frac{h}{h} \;=\; \lim\limits_{h\to 0} 1 \;=\; 1\,, & \text{pro } i = k \end{cases} \tag{3.18}$$

Oba způsoby tedy očekávaně dávají stejné výsledky. Dosazením vztahů (3.17) a (3.18) do výrazu (3.11) pak konečně dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q_A^i} &= -\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{AB}^i}\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) = \\ &= -p_i\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \end{aligned} \tag{3.19}$$

což je, podle definice (2.5) i-tá složka zobecněné hybnosti příslušné trajektorii $\boldsymbol{q_{AB}}$ v bodě t_A.

Výsledný vztah (3.19) platí pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$, a dosadíme-li ho tedy do výrazu (3.5), dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\partial\, S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial \boldsymbol{q_A}} &\equiv \left(\frac{\partial\, S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q_A^1}, \ldots, \frac{\partial\, S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q_A^n}\right) = \\ &= \Big(-p_1\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big), \ldots, -p_n\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big)\Big) = \\ &= -\boldsymbol{p}\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big)\,. \end{aligned} \tag{3.20}$$

Výpočet derivace Hamiltonovy funkce $S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ podle koncové polohy, tj. podle parametru $\boldsymbol{q_B} \in \mathbb{R}^n$ probíhá již naprosto analogicky, a pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$ je výsledkem opět:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q_B^i} &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{AB}^i}\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big) = \\ &= p_i\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big)\,. \end{aligned} \tag{3.21}$$

Ze vztahů (3.21), pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$, pak analogicky dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{\partial\, S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial \boldsymbol{q_B}} &\equiv \left(\frac{\partial\, S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q_B^1}, \ldots, \frac{\partial\, S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial q_B^n}\right) = \\ &= \Big(p_1\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big), \ldots, p_n\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big)\Big) = \\ &= \boldsymbol{p}\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big)\,. \end{aligned} \tag{3.22}$$

Derivace Hamiltonovy funkce podle počáteční polohy je tedy rovna záporně vzaté počáteční hybnosti a derivace Hamiltonovy funkce podle koncové polohy je pak obdobně rovna koncové hybnosti. Rozdílnost znamének má svůj původ v rozdílu okrajových členů z metody per partes. Dostáváme tak dva důležité vztahy

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial \boldsymbol{q_A}} &= -\boldsymbol{p}\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \equiv -\boldsymbol{p_A}\,, \\ \frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial \boldsymbol{q_B}} &= \boldsymbol{p}\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big) \equiv \boldsymbol{p_B}\,, \end{aligned} \tag{3.23}$$

kde jsme označily $\boldsymbol{p_A}$ zobecněnou hybnost v čase t_A, tj. počáteční hybnost, a analogicky $\boldsymbol{p_B}$ zobecněnou hybnost v čase t_B, tedy koncovou hybnost.

Dále spočítejme derivaci Hamiltonovy funkce $S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ podle počátečního času, tj. podle parametru $t_A \in \mathbb{R}$:

$$\frac{\partial\, S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial t_A} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial t_A} \int\limits_{t_A}^{t_B} L\Big(\, t\,,\ \boldsymbol{q_{AB}}(t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\,,\ \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(\,t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\Big)\, dt\,. \tag{3.24}$$

Potřebujeme nyní zderivovat integrál podle parametru, který je obsažen nejen v integrandu, ale i v mezích integrálu. Použijeme proto matematickou větu o derivování integrálu, včetně jeho mezí podle parametru, která se též nazývá Leibnitzovým integrálním pravidlem, a zní:

$$\frac{d}{dx} \int\limits_{a(x)}^{b(x)} f(x,\, y)\, dy = \int\limits_{a(x)}^{b(x)} \frac{\partial f(x,\, y)}{\partial x}\, dy + f(x,\, b(x))\frac{db(x)}{dx} - f(x,\, a(x))\frac{da(x)}{dx}\,. \tag{3.25}$$

Aplikací Leibnitzova integrálního pravidla (3.25) na vztah (3.24) dostáváme

$$\begin{aligned}(3.24) \;=\; & \int\limits_{t_A}^{t_B} \frac{\partial}{\partial t_A} L\Big(\, t\,,\ \boldsymbol{q_{AB}}(t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\,,\ \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(\,t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\Big)\, dt \;+ \\ & + L\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big) \cdot \frac{\partial t_B}{\partial t_A} - L\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \cdot \frac{\partial t_A}{\partial t_A}\,.\end{aligned} \tag{3.26}$$

Parametry t_A a t_B jsou na sobě nezávislé, tj.

$$\frac{\partial t_B}{\partial t_A} = 0\,, \qquad \frac{\partial t_A}{\partial t_A} = 1\,, \tag{3.27}$$

čímž dostáváme

$$\begin{aligned}(3.26) \;=\; & \int\limits_{t_A}^{t_B} \frac{\partial}{\partial t_A} L\Big(\, t\,,\ \boldsymbol{q_{AB}}(t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\,,\ \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(\,t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\Big)\, dt \;- \\ & - L\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \;= \\ =\; & \int\limits_{t_A}^{t_B} \left(\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L(t,\, \boldsymbol{q_{AB}},\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial q^k_{AB}} \frac{\partial q^k_{AB}(t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial t_A} \;+ \right. \\ & \left. + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L(t,\, \boldsymbol{q_{AB}},\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial \dot{q}^k_{AB}} \frac{\partial \dot{q}^k_{AB}(t\,;\ t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial t_A} \right) dt \;- \\ & - L\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big)\,.\end{aligned} \tag{3.28}$$

Parciální derivace funkcí q^k_{AB}, $k \in \{1, \ldots, n\}$, podle času t (značeno tečkou) a podle parametru t_A jsou záměnné. Parametry t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$ navíc nezávisí na čase t, a parciální derivace funkcí q^k_{AB} podle času t jsou schodné s totální derivací q^k_{AB} podle času t. Platí tedy

$$\frac{\partial \dot{q}^k_{AB}}{\partial t_A} \equiv \frac{\partial}{\partial t_A}\frac{dq^k_{AB}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t_A}\frac{\partial}{\partial t} q^k_{AB} = \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial}{\partial t_A} q^k_{AB} = \frac{d}{dt}\frac{\partial q^k_{AB}}{\partial t_A} \tag{3.29}$$

Ve výrazu (3.27), v druhé sumě, tedy můžeme integrovat per partes, čímž dostaneme

$$(3.28) \overset{\text{per partes}}{=} \int_{t_A}^{t_B} \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial L(t, \boldsymbol{q_{AB}}, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial q^k_{AB}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L(t, \boldsymbol{q_{AB}}, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial \dot{q}^k_{AB}} \right) \right) \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial t_A}\, dt \, +$$

$$+ \left[\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L(t, \boldsymbol{q_{AB}}, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial \dot{q}^k_{AB}} \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial t_A} \right]_{t=t_A}^{t=t_B} - L\big(t_A, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A), \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) . \tag{3.30}$$

Trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}} = \boldsymbol{q_{AB}}(t)$ musí, jakožto skutečné fyzikální trajektorie, splňovat Eulerovy-Lagrangeovy rovnice (3.10). První člen ve výrazu (3.30) je tedy nulový, a vztah (3.30) se nám pak redukuje na

$$\begin{aligned}
(3.30) &= \left[\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L(t, \boldsymbol{q_{AB}}, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}})}{\partial \dot{q}^k_{AB}} \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial t_A} \right]_{t=t_A}^{t=t_B} - L\big(t_A, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A), \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) = \\
&= \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L\big(t_B, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B), \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big)}{\partial \dot{q}^k_{AB}} \cdot \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial t_A}(t_B) \; - \\
&\quad - \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L\big(t_A, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A), \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big)}{\partial \dot{q}^k_{AB}} \cdot \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial t_A}(t_A) \; - \\
&\quad - L\big(t_A, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A), \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) .
\end{aligned} \tag{3.31}$$

Derivaci funkce q^k_{AB} podle t_A v čase t_B spočítáme formálně z definice pomocí limit:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial q^k_{AB}}{\partial t_A}(t_B) &\equiv \left.\frac{\partial q^k_{AB}(T;\, X_1,\, \boldsymbol{X_2},\, X_3,\, \boldsymbol{X_4})}{\partial X_1}\right|_{\substack{T=t_B\\ X_1=t_A\\ \boldsymbol{X_2}=\boldsymbol{q_A}\\ X_3=t_B\\ \boldsymbol{X_4}=\boldsymbol{q_B}}} = \\
&= \lim_{h\to 0} \frac{q^k_{AB}(t_B\,;\; t_A+h,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) - q^k_{AB}(t_B\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{h} = \\
&= \lim_{h\to 0} \frac{q^k_{AB}(t_B\,;\; t_A+h,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) - q^k_B}{h} .
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Výraz $q^k_{AB}(t\,;\; t_A+h,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ představuje k-tou složku fyzikální trajektorie, která, na rozdíl od naší původní trajektorie, prochází počáteční polohou $\boldsymbol{q_A}$ v čase $t = t_A + h$, ale koncovou polohou $\boldsymbol{q_B}$ již prochází v čase $t = t_B$, stejně jako naše původní trajektorie. Pozorujeme tedy, že pro $t = t_B$ je:

$$q^k_{AB}(t_B\,;\; t_A+h,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) = q^k_B , \tag{3.33}$$

a tedy

$$(3.32) \;=\; \lim_{h\to 0} \frac{q^k_{AB}(t_B\,;\; t_A+h,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;-\; q^k_B}{h} \;=\; \lim_{h\to 0} \frac{q^k_B \;-\; q^k_B}{h} \;=\; 0\,. \tag{3.34}$$

Derivaci funkce q^k_{AB} podle t_A v bodě t_A již musíme počítat z definice pomocí limit:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial q^k_{AB}}{\partial t_A}(t_A) \;&\equiv\; \left.\frac{\partial q^k_{AB}(T;\, X_1,\, \boldsymbol{X_2},\, X_3,\, \boldsymbol{X_4})}{\partial X_1}\right|_{\substack{T=t_A\\ X_1=t_A\\ \boldsymbol{X_2}=\boldsymbol{q_A}\\ X_3=t_B\\ \boldsymbol{X_4}=\boldsymbol{q_B}}} \;=\\
&=\; \lim_{h\to 0} \frac{q^k_{AB}(t_A\,;\; t_A+h,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;-\; q^k_{AB}(t_A\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{h} \;=\\
&=\; \lim_{h\to 0} \frac{q^k_{AB}(t_A\,;\; t_A+h,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;-\; q^k_A}{h}\,.
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Prostudujme nyní podrobněji výraz $q^k_{AB}(t\,;\; t_A+h,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ pro $t=t_A$. Studované fyzikální trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$ uvažujeme vždy pro časy t mezi voleným počátečním časem a koncovým časem. V tomto případě je pak $t_A \in [t_A+h,\, t_B]$, tzn. $h<0$. Limita ve výrazu (3.35) je tedy správně jednostrannou limitou jdoucí k 0 zleva. Fyzikální trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$ jsou alespoň C^2 křivky, a jsou tedy, minimálně i se svou 1. a 2. derivací zleva spojité v počátečním bodě. V případě limity ve výrazu (3.35) se pro $h\to 0$ zleva blížíme s počátečním časem t_A+h k parametrickému času $t=t_A$. Uvažujme nyní případ kdy se naopak pro $h\to 0$ zprava blížíme s parametrickým časem $t=t_A+h$ k počátečnímu času t_A. V obou těchto případech se jedná o definiční limitu nějaké jednostranné derivace v bodě t_A. Po křivkách $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$ však požadujeme, aby byly C^2 na intervalu mezi počátečním a koncovým časem i v případě, že posuneme počáteční čas o nějaké malé $\pm h$. $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$ je tedy C^2 křivka na intervalu $t\in(t_A-h,\, t_A+h)$ pro nějaké malé h. Speciálně má pak $\boldsymbol{q_{AB}}$ spojité derivace v bodě t_A, což znamená, že obě výše zmíněné jednostranné limity se v bodě t_A musí rovnat (až na znaménko v případě opačné orientace u tečného vektoru). Na základě těchto úvah jsme tedy zjistili, že platí:

$$\begin{aligned}
&\lim_{h\to 0-} \frac{q^k_{AB}(t_A\,;\; t_A+h,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;-\; q^k_A}{h} \;=\\
&\qquad\qquad =\; -\lim_{h\to 0+} \frac{q^k_{AB}(t_A+h\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;-\; q^k_A}{h}\,,
\end{aligned} \tag{3.36}$$

kde rozdílnost znamének je zapříčiněna opačnou orientací tečných vektorů.

Pokračujme dále ve výpočtu výrazu (3.35):

$$(3.35) \;=\; -\lim_{h\to 0+} \frac{q^k_{AB}(t_A+h\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \;-\; q^k_A}{h} \;=\; -\frac{\partial q^k_{AB}}{\partial t}(t_A)\,. \tag{3.37}$$

Celkem je pak

$$\frac{\partial q^k_{AB}}{\partial t_A}(t_B) \;=\; 0\,, \qquad \frac{\partial q^k_{AB}}{\partial t_A}(t_A) \;=\; -\frac{dq^k_{AB}}{dt}(t_A) \;\equiv\; -\dot{q}^k_{AB}(t_A)\,. \tag{3.38}$$

Dosazením vypočtených derivací (3.38) do vztahu (3.31) dostáváme

$$\frac{\partial\, S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial t_A} =$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big)}{\partial \dot{q}^k_{AB}}\, \dot{q}^k_{AB}(t_A) \;-\; L\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \;=$$

$$= E\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big)\,. \tag{3.39}$$

Výpočet derivace Hamiltonovy funkce $S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ podle koncového času $t_B \in \mathbb{R}$ je již naprosto analogický, a vyjde pro ni obdobný vztah:

$$\frac{\partial\, S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial t_B} =$$

$$= -\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big)}{\partial \dot{q}^k_{AB}}\, \dot{q}^k_{AB}(t_B) \;+\; L\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big) \;=$$

$$= -\,E\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big)\,. \tag{3.40}$$

Z výše uvedeného vidíme, že derivace Hamiltonovy funkce podle počátečního času je rovna počáteční zobecněné energii, tedy celkové energii systému na počátku, a derivace Hamiltonovy funkce podle koncového času je rovna záporně vzaté koncové zobecněné energii, tj. celkové energii systému na konci (v koncovém bodě). Rozdílnost znamének má opět svůj původ v rozdílu okrajových členů z metody per partes. Dostáváme tím dva důležité vztahy

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial t_A} &= E\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \;\equiv\; E_A\,, \\ \frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial t_B} &= -\,E\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big) \;\equiv\; -E_B\,, \end{aligned} \tag{3.41}$$

kde jsme označily E_A zobecněnou energii v čase t_A, tj. počáteční energii, a obdobně E_B zobecněnou energii v čase t_B, tj. koncovou energii.

Definujme operátor $\boldsymbol{\nabla}_{(t,\boldsymbol{q})}$ jako $n+1$-tici operátorů[2]

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla}_{(t,\boldsymbol{q})} \;&\equiv\; \left(\frac{\partial}{\partial t}\,,\, \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}}\right) \;=\; \left(\frac{\partial}{\partial t}\,,\, \frac{\partial}{\partial q^1}\,,\, \dots\,,\, \frac{\partial}{\partial q^n}\right), \\ \boldsymbol{\nabla}_{(t,\boldsymbol{q})} \,:\, C^1(\Omega) &\longrightarrow \mathbb{R}^{n+1}\,, \quad f \longmapsto \left(\frac{\partial f}{\partial t}\,,\, \frac{\partial f}{\partial q^1}\,,\, \dots\,,\, \frac{\partial f}{\partial q^n}\right). \end{aligned} \tag{3.42}$$

[2] Operátor $\boldsymbol{\nabla}_{(t,\boldsymbol{q})}$ může připomínat gradient (pomineme-li první složku časové derivace), skutečnému kovariantnímu operátoru gradientu tento operátor však neodpovídá. $n+1$-tice operátorů $\boldsymbol{\nabla}_{(t,\boldsymbol{q})}$ zde totiž není vyjádřena v bázi zobecněných souřadnic.

Aplikací operátoru $\boldsymbol{\nabla}_{(t,\boldsymbol{q})}$ na Hamiltonovu funkci $S = S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$ potom můžeme vztahy (3.23) a (3.41) zapsat v jednoduchém elegantním tvaru

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla}_{(t_A,\boldsymbol{q_A})} S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B}) &\equiv \left(\frac{\partial S}{\partial t_A}, \frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{q_A}} \right) = (E_A, -\boldsymbol{p_A}), \\ \boldsymbol{\nabla}_{(t_B,\boldsymbol{q_B})} S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B}) &\equiv \left(\frac{\partial S}{\partial t_B}, \frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{q_B}} \right) = (-E_B, \boldsymbol{p_B}). \end{aligned} \tag{3.43}$$

Předpokládejme nyní, že známe Hamiltonovu funkci $S = S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$ nějakého systému, který zkoumáme, ale již neznáme trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$ tohoto systému. Takováto situace může nastat, vypočítáme-li Hamiltonovu funci nějakým jiným způsobem než z definice (viz. níže), např. řešením Hamiltonovy-Jacobiho rovnice (2.49). V takovém případě pak můžeme znát Hamiltonovu funkci S systému, aniž bychom znaly trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}$ tohoto systému. Máme tedy zadanou Hamiltonovu funkci $S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$ nějakého systému, a chceme z ní vypočítat rovnice popisující koncovou polohu systému ve zvoleném čase, známe-li počáteční podmínky systému, tj. známe-li polohu a hybnost systému v nějakém (počátečním) čase. Ze vztahu (3.23) víme, že derivujeme-li Hamiltonovu funkci $S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$ podle počáteční polohy $\boldsymbol{q_A}$ dostaneme počáteční hybnost $\boldsymbol{p_A}$ jako funkci parametrů t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B, $\boldsymbol{q_B}$, neboli

$$\boldsymbol{p_A} = -\frac{\partial S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})}{\partial \boldsymbol{q_A}} = \boldsymbol{p}(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B}). \tag{3.44}$$

Z funkce $\boldsymbol{p}(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$ počáteční hybnosti pak inverzí vyjádříme koncovou polohu $\boldsymbol{q_B}$ jako funkci koncového času t_B, a počátečních hodnot $\boldsymbol{q_A}$, $\boldsymbol{p_A}$ v čase t_A. Schematicky

$$\boldsymbol{q_B} = \boldsymbol{q_B}(t_B;\, t_A, \boldsymbol{q_A}, \boldsymbol{p_A}) = \boldsymbol{q_B}\left(t_B;\, t_A, \boldsymbol{q_A}, -\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{q_A}}\right). \tag{3.45}$$

Pokud bychom naopak chtěli vypočítat rovnice popisující počáteční polohu systému ve zvoleném čase, známe-li koncové podmínky systému, postupovali bychom obdobně jako výše. Z derivace Hamiltonovy funkce $S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$ podle koncové polohy $\boldsymbol{q_B}$ dostaneme koncovou hybnost $\boldsymbol{p_B}(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$, jejíž inverzí vyjádříme počáteční polohu $\boldsymbol{q_A}$ jako funkci počátečního času t_B, a koncových hodnot $\boldsymbol{q_B}$, $\boldsymbol{p_B}$ v čase t_B. Schematicky

$$\boldsymbol{q_A} = \boldsymbol{q_A}(t_A;\, t_B, \boldsymbol{q_B}, \boldsymbol{p_B}) = \boldsymbol{q_A}\left(t_A;\, t_B, \boldsymbol{q_B}, \frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{q_B}}\right). \tag{3.46}$$

Zkoumáme-li nějaký fyzikální systém, nemusí v obecném případě existovat analytické řešení Eulerových-Lagrangeových rovnic, a výpočet Hamiltonovy funkce z definice jako integrál akce po konkrétní fyzikální trajektorii tak nemusí být prakticky realizovatelný. Hamiltonovu funkci je však možné získat i jiným postupem než hledáním fyzikálních trajektorií a přímým výpočtem z definice (3.1). Vyjdeme ze vztahu (3.23) podle kterého je derivace Hamiltonovy funkce $S(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B})$ podle koncového času t_B rovna zobecněné energii v koncovém čase. Podle vztahu (2.21) můžeme tuto zobecněnou energii spočítat jako hodnotu hamiltoniánu v koncového čase t_B, do kterého dosadíme hybnosti $\boldsymbol{p}\big(t_B, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B), \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big)$ jakožto funkce zobecněných rychlostí. Hybnosti $\boldsymbol{p}\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big)$ v hamiltoniánu vyjádříme podle vztahu (3.23) jako derivace Hamiltonovy funkce S podle koncové polohy $\boldsymbol{q_B}$. Tímto postupem dostaneme

$$\begin{aligned} -\frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial t_B} &= E\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big) = \\ &= H\Big(t_B\,,\; \boldsymbol{q_{AB}}(t_B)\,,\; \boldsymbol{p}\big(t_B,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big)\Big) = \\ &= H\left(t_B\,,\; \boldsymbol{q_B}\,,\; \frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial \boldsymbol{q_B}}\right). \end{aligned} \tag{3.47}$$

Pro počáteční čas t_A a polohu $\boldsymbol{q_A}$ postupujeme analogicky, a dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial t_A} &= E\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) = \\ &= H\Big(t_A\,,\; \boldsymbol{q_{AB}}(t_A)\,,\; \boldsymbol{p}\big(t_A,\, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\, \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big)\Big) = \\ &= H\left(t_A\,,\; \boldsymbol{q_A}\,,\; -\frac{\partial S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})}{\partial \boldsymbol{q_A}}\right). \end{aligned} \tag{3.48}$$

Zjišťujeme tedy, že Hamiltonova funkce $S = S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ řeší Hamiltonovu-Jacobiho rovnici v proměnných počátečního času a polohy, a také koncového času a polohy, nebo-li

$$\begin{aligned} H\left(t_B\,,\, q_B^1, \dots,\, q_B^n\,,\, \frac{\partial S}{\partial q_B^1}, \dots,\, \frac{\partial S}{\partial q_B^n}\right) + \frac{\partial S}{\partial t_B} &= 0\,, \\ H\left(t_A\,,\, q_A^1, \dots,\, q_A^n,\, -\frac{\partial S}{\partial q_B^1}, \dots,\, -\frac{\partial S}{\partial q_B^n}\right) - \frac{\partial S}{\partial t_A} &= 0\,. \end{aligned} \tag{3.49}$$

Pokud budeme naopak chtít najít Hamiltonovu funkci jako řešení Hamiltonovy-Jacobiho rovnice, musíme být opatrní. Řešením Hamiltonovy-Jacobiho rovnic (3.49) totiž není přímo Hamiltonova funkce $S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ v úplné sadě proměnných, ale dvojice generujících funkcí $-S_A(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, \boldsymbol{C_A})$ v počáteční sadě proměnných t_A, $\boldsymbol{q_A}$, a $S_B(t_B,\, \boldsymbol{q_B},\, \boldsymbol{C_B})$ v koncové sadě proměnných t_B, $\boldsymbol{q_B}$. Veličiny $\boldsymbol{C_A}, \boldsymbol{C_B} \in \mathbb{R}^n$ představují $2n$ konstant vůči času t, viz (2.49). Protože se obě generující funkce $-S_A$ a S_B vztahují ke stejné fyzikální trajektorii $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$, a veličiny $\boldsymbol{C_A}$ a $\boldsymbol{C_B}$ jsou konstantami, budou nabývat stejných hodnot v počátečním i koncovém bodě, tj. bude $\boldsymbol{C_A} = \boldsymbol{C_B} \equiv \boldsymbol{C}$. Hamiltonovu funkci v obou sadách proměnných pak vyjádříme jako rozdíl (resp. součet, neboť v počáteční sadě je řešením Hamiltonových-Jacobiho rovnic funkce $-S_A$) obou generujících funkcí v počáteční a koncové sadě:

$$S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B},\, \boldsymbol{C}) \;=\; S_B(t_B,\, \boldsymbol{q_B},\, \boldsymbol{C}) + S_A(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, \boldsymbol{C})\,. \tag{3.50}$$

Konstanty $\boldsymbol{C}$, vystupující v Hamiltonově funkci (3.50) můžeme ještě vyjádřit v proměnných t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$ pomocí vztahů (2.50). Víme totiž, že pro obě generující funkce $-S_A$ a S_B bude, pro $\forall i, j \in \{1, \dots, n\}$ platit

$$-\frac{\partial\, S_A(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, \boldsymbol{C})}{\partial C^{\,i}} \;=\; -D_A^i\,, \qquad \frac{\partial\, S_B(t_B,\, \boldsymbol{q_B},\, \boldsymbol{C})}{\partial C^{\,j}} \;=\; -D_B^j\,, \tag{3.51}$$

kde $\boldsymbol{D_A}$, $\boldsymbol{D_B} \in \mathbb{R}^n$ je dalších $2n$ konstant vůči času t (tj. integrálů pohybu), které jsou sdružené ke konstantám $\boldsymbol{C}$ (představují-li $\boldsymbol{C}$ nové konstantní souřadnice, jsou pak $\boldsymbol{D}$ nové konstantní hybnosti, a naopak). Z konstantnosti veličin $\boldsymbol{D_A}$ a $\boldsymbol{D_B}$ plyne, že budou v počátečním i koncovém bodě stejné, tedy $\boldsymbol{D_A} = \boldsymbol{D_B}$. Dostáváme tak, pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$ celkem n rovnic

$$-\frac{\partial\, S_A(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, \boldsymbol{C})}{\partial C^{\,i}} \;=\; \frac{\partial\, S_B(t_B,\, \boldsymbol{q_B},\, \boldsymbol{C})}{\partial C^{\,i}}\,, \tag{3.52}$$

jejichž řešením můžeme vyjádřit hodnoty konstant $\boldsymbol{C}$ pomocí všech parametrů t_A, $\boldsymbol{q_A}$, t_B a $\boldsymbol{q_B}$ jako funkce $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$. Dosazením n-tice výrazů $\boldsymbol{C}(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ do Hamiltonovy funkce (3.50) již dostaneme hledanou Hamiltonovu funkci, vyjádřenou zcela v proměnných t_A, $\boldsymbol{q}_A$, t_B a $\boldsymbol{q}_B$.

Zbývá vyjasnit ještě poslední věc. Veličiny $\boldsymbol{C}$ jsme nejprve chápaly jako konstanty (vůči t), a poté jsme z nich udělali funkce $\boldsymbol{C}(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$. Ověříme, že pravá strana výrazu (3.50) s dosazenými funkcemi $\boldsymbol{C}(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ splňuje vlastnosti (3.43). Ukažme např. že derivace $S_B + S_A$ podle $\boldsymbol{q_B}$ dává koncovou hybnost $\boldsymbol{p_B}$. Pro $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$ platí

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial q_B^i}\left(S_B\big(t_B\,,\ \boldsymbol{q_B}\,,\ \boldsymbol{C}(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\big) \;+\; S_A\big(t_A\,,\ \boldsymbol{q_A}\,,\ \boldsymbol{C}(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\big)\right) \;= \\
&\qquad = \;\frac{\partial S_B}{\partial q_B^i} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial S_B}{\partial C^{\,k}}\,\frac{\partial C^{\,k}}{\partial q_B^i} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial S_A}{\partial C^{\,k}}\,\frac{\partial C^{\,k}}{\partial q_B^i} \;= \\
&\qquad = \;p_{B\,i} + \sum_{k=1}^{n}\left(-\,D_B^k\,\frac{\partial C^{\,k}}{\partial q_B^i} \;+\; D_A^k\,\frac{\partial C^{\,k}}{\partial q_B^i}\right) \;= \\
&\qquad = \;p_{B\,i} + \sum_{k=1}^{n} D^k\left(\frac{\partial C^{\,k}}{\partial q_B^i} \;-\; \frac{\partial C^{\,k}}{\partial q_B^i}\right) \;=\; p_{B\,i}\,,
\end{aligned} \tag{3.53}$$

kde jsme ve druhém kroku využily prvního ze vztahů (2.47), tj. že derivace S_B podle koncové polohy $\boldsymbol{q_B}$ je rovna koncové hybnosti $\boldsymbol{p_B}$, což je také nutné předpokládat při hledání funkce S_B jakožto řešení Hamiltonovy-Jacobiho rovnice. Pokud bychom derivovaly $S_B + S_A$ podle koncového času t_B, postupovali bychom obdobně, s tím, že derivaci S_B podle t_B bychom přímo vyjádřily z Hamiltonovy-Jacobiho rovnice (3.49) v koncové sadě proměnných jako hamiltonián, který má už ale dle vztahu (2.21) význam zobecněné energie. Ostatní vlastnosti (3.43) lze ukázat obdobně. Funkce (3.50) je tedy po dosazení veličin $\boldsymbol{C}(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ skutečně hledanou Hamiltonovou funkcí $S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$.

3.2 Variační odvození některých vlastností Hamiltonovy funkce

Vlastnost (3.23) Hamiltonovy funkce jsme v sekci 3.1 odvodily přímo, derivací Hamiltonovy funkce. Tato vlastnost lze však odvodit také variační metodou, což nyní předvedeme.

Spočítejme (izochronní) variaci Hamiltonovy funkce $S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$ např. podle počáteční polohy $\boldsymbol{q_A}$ v nějakém libovolném směru $\boldsymbol{h} \equiv (h^1, \ldots, h^n) \in \mathbb{R}^n$. Protože jsou počáteční a koncová poloha voleny libovolně, a jsou na sobě tedy zcela nezávislé (jejich volba pak určuje konkretní fyzikální trajektorii, nikoli opačně), zůstává koncová poloha $\boldsymbol{q_B}$, při variaci počáteční polohy fixní. Označme ještě $\widetilde{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{A}} \equiv \boldsymbol{q_A} + \alpha \boldsymbol{h}$. Pak už bude

$$
\begin{aligned}
\left[\delta_{\boldsymbol{q_A}} S(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\right](\boldsymbol{h}) \;&=\; \frac{d}{d\alpha} S(t_A,\, \boldsymbol{q_A} + \alpha \boldsymbol{h},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\Big|_{\alpha=0} \;= \\
&= \frac{\partial}{\partial \widetilde{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{A}}} S(t_A,\, \widetilde{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{A}},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})\Big|_{\alpha=0} \cdot \frac{\partial \widetilde{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{A}}}{\partial \alpha}\Big|_{\alpha=0} \;=\; \frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{q_A}}(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \cdot \boldsymbol{h} \;\equiv \\
&\equiv \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial S}{\partial q_A^i}(t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B}) \cdot h^i\,.
\end{aligned}
\tag{3.54}
$$

Tato variace musí být na druhé straně rovna variaci definičního integrálu ve výrazu (3.1). Variovaný bod $\boldsymbol{q_A}$ ale v integrálu (3.1) explicitně nevystupuje. Hamiltonovu funkci však v (3.1) počítáme jako integrál z hodnot lagrangiánu podél trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t) = \boldsymbol{q_{AB}}(t\,;\; t_A,\, \boldsymbol{q_A},\, t_B,\, \boldsymbol{q_B})$, která už je závislá na bodu $\boldsymbol{q_A}$. Ze vztahu (3.4) vidíme, že Hamiltonova funkce odpovídá hodnotě akčního funkcionálu na fyzikální trajektorii $\boldsymbol{q_{AB}}$ mezi okrajovými časy t_A a t_B. V integrálu ve výrazu (3.1) tedy variujeme podle trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}$. K tomuto účelu uvažujeme na intervalu $[t_A,\, t_B]$ libovolnou $C^1\big([t_A,\, t_B]\big)$ křivku $\boldsymbol{\eta}(t)$ takovou, aby platilo $\boldsymbol{\eta}(t_A) = \boldsymbol{h}$ a $\boldsymbol{\eta}(t_B) = 0$. Označme $\widetilde{\boldsymbol{q}}(t) \equiv \boldsymbol{q_{AB}}(t) + \alpha\, \boldsymbol{\eta}(t)$ křivku o $\boldsymbol{\eta}(t)$ posunutou vzhledem ke křivce $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$. Platí tedy $\widetilde{\boldsymbol{q}}(t_A) = \boldsymbol{q_{AB}}(t_A) + \alpha\, \boldsymbol{\eta}(t_A) = \boldsymbol{q_A} + \alpha \boldsymbol{h}$ a $\widetilde{\boldsymbol{q}}(t_B) = \boldsymbol{q_{AB}}(t_B) + \alpha\, \boldsymbol{\eta}(t_B) = \boldsymbol{q_B}$. Podmínky $\boldsymbol{\eta}(t_A) = \boldsymbol{h}$ a $\boldsymbol{\eta}(t_B) = 0$, kladené na křivku $\boldsymbol{\eta}(t)$ odpovídají právě tomu, že variujeme počáteční polohu $\boldsymbol{q_A}$ v nějakém libovolném směru $\boldsymbol{h} \in \mathbb{R}^n$ a koncová poloha $\boldsymbol{q_B}$ zůstává fixní. Variace integrálu (3.1) podle $\boldsymbol{q_{AB}}$ ve směru $\boldsymbol{\eta}$ je pak

$$
\begin{aligned}
\left[\delta\, \mathcal{S}(\boldsymbol{q_{AB}})\right](\boldsymbol{\eta}) \;&=\; \frac{d}{d\alpha} \mathcal{S}(\boldsymbol{q_{AB}} + \alpha\, \boldsymbol{\eta})\Big|_{\alpha=0} \;= \\
&= \frac{d}{d\alpha} \int_{t_A}^{t_B} L\Big(t\,,\; \boldsymbol{q_{AB}}(t) + \alpha\, \boldsymbol{\eta}(t)\,,\; \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t) + \alpha\, \dot{\boldsymbol{\eta}}(t)\Big)\, dt\Big|_{\alpha=0} \;= \\
&= \frac{d}{d\alpha} \int_{t_A}^{t_B} L\big(t\,,\; \widetilde{\boldsymbol{q}}(t)\,,\; \dot{\widetilde{\boldsymbol{q}}}(t)\big)\, dt\Big|_{\alpha=0}\,.
\end{aligned}
\tag{3.55}
$$

Integraci a derivaci podle parametru lze prohodit ze stejných důvodů jako výše ve výrazu (3.7). Je tedy

$$(3.55) \;=\; \int_{t_A}^{t_B} \frac{d}{d\alpha}\, L\big(t\,,\,\widetilde{\boldsymbol{q}}(t)\,,\,\dot{\widetilde{\boldsymbol{q}}}(t)\big)\bigg|_{\alpha=0} dt \;=$$

$$= \int_{t_A}^{t_B} \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial\, L\big(t,\,\widetilde{\boldsymbol{q}}(t),\,\dot{\widetilde{\boldsymbol{q}}}(t)\big)}{\partial \widetilde{q}^{\,i}}\Bigg|_{\alpha=0} \cdot \frac{\partial \widetilde{q}^{\,i}}{\partial \alpha} + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial\, L\big(t,\,\widetilde{\boldsymbol{q}}(t),\,\dot{\widetilde{\boldsymbol{q}}}(t)\big)}{\partial \dot{\widetilde{q}}^{\,j}}\Bigg|_{\alpha=0} \cdot \frac{\partial \dot{\widetilde{q}}^{\,j}}{\partial \alpha} \right) dt \;=$$

$$= \int_{t_A}^{t_B} \sum_{i=1}^{n} \Bigg(\frac{\partial L}{\partial \widetilde{q}^{\,i}}\big(t,\,\boldsymbol{q_{AB}}(t),\,\dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big) \cdot \eta^i(t) \;+$$

$$+\; \frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{q}}^{\,i}}\big(t,\,\boldsymbol{q_{AB}}(t),\,\dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big) \cdot \dot{\eta}^{\,i}(t) \Bigg) dt \;\overset{\text{per partes}}{=}$$

$$\overset{\text{per partes}}{=} \int_{t_A}^{t_B} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial L}{\partial \widetilde{q}^{\,i}}\big(t,\,\boldsymbol{q_{AB}}(t),\,\dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big) \;-\; \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{q}}^{\,i}}\big(t,\,\boldsymbol{q_{AB}}(t),\,\dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big) \right] \right) \eta^i(t)\, dt \;+$$

$$+\; \left[\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{q}}^{\,j}}\big(t,\,\boldsymbol{q_{AB}}(t),\,\dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big) \cdot \eta^j(t) \right]_{t=\,t_A}^{t=\,t_B} . \tag{3.56}$$

Trajektorie $\boldsymbol{q_{AB}}(t)$, jakožto skutečné fyzikální trajektorie, musí splňovat Eulerovy-Lagrangeovy rovnice (2.16). Ve výrazu (3.56) je pak integrand integrálu nulový, a tedy

$$\begin{aligned}(3.56) \;=\; & \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{q}}^{\,j}}\big(t,\,\boldsymbol{q_{AB}}(t_B),\,\dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_B)\big) \cdot \eta^j(t_B) \;- \\ & -\; \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{q}}^{\,k}}\big(t,\,\boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\,\dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \cdot \eta^k(t_A)\,. \end{aligned} \tag{3.57}$$

Pro funkce $\boldsymbol{\eta}$ platí, že $\boldsymbol{\eta}(t_A) = \boldsymbol{h}$ a $\boldsymbol{\eta}(t_B) = 0$, tzn. pro $\forall j,k \in \{1,\ldots,n\}$ je $\eta^j(t_A) = h^j$ a $\eta^k(t_B) = 0$. Ve výrazu (3.57) je potom první člen (suma) nulový. Celkově pak pro variace integrálu (3.1) podle $\boldsymbol{q_{AB}}$ ve směru $\boldsymbol{\eta}$ dostáváme

$$\begin{aligned}\big[\delta\,\mathcal{S}(\boldsymbol{q_{AB}})\big]\,(\boldsymbol{\eta}) \;&=\; -\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{\widetilde{q}}^{\,j}}\big(t,\,\boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\,\dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \cdot h^j \;= \\ &=\; -\sum_{j=1}^{n} p_j\big(t,\,\boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\,\dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \cdot h^j\,. \end{aligned} \tag{3.58}$$

Srovnáním výrazů (3.54) a (3.58) dostáváme vztah

$$\sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial S}{\partial q_{\boldsymbol{A}}^k}(t_A,\,\boldsymbol{q_A},\,t_B,\,\boldsymbol{q_B}) \,+\, p_k\big(t,\,\boldsymbol{q_{AB}}(t_A),\,\dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big) \right) \cdot h^k \;=\; 0\,. \tag{3.59}$$

Směr $\boldsymbol{h} = (h^1, \ldots, h^n) \in \mathbb{R}^n$ byl volen zcela libovolně. Výraz v závorkách sumy, v (3.59) pak musí být nulový pro $\forall k \in \{1, \ldots, n\}$ (jinak by totiž šlo volit $\boldsymbol{h}$ tak, aby byla levá strana (3.59) nenulová). Pro $\forall k \in \{1, \ldots, n\}$ potom dostáváme vztah

$$\frac{\partial S}{\partial q^k_{A}}(t_A, \boldsymbol{q_A}, t_B, \boldsymbol{q_B}) \;=\; -p_k\big(t, \boldsymbol{q_{AB}}(t_A), \dot{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{AB}}(t_A)\big)\,, \tag{3.60}$$

což odpovídá vztahům (3.19), odvozeným derivací Hamiltonovy funkce podle počáteční polohy.

Variujeme-li Hamiltonovu funkci v koncové poloze $\boldsymbol{q_B}$ v nějakém libovolném směru $\boldsymbol{g} \in \mathbb{R}^n$, při fixní počáteční poloze $\boldsymbol{q_A}$, uvažujeme pak na intervalu $[t_{\boldsymbol{A}}, t_{\boldsymbol{B}}]$ nějakou libovolnou C^1 křivku $\boldsymbol{\mu}(t)$, splňující $\boldsymbol{\mu}(t_{\boldsymbol{A}}) = 0$ a $\boldsymbol{\mu}(t_{\boldsymbol{B}}) = \boldsymbol{g}$. Postupem analogickým tomu výše pak lze, pro koncový bod, odvodit i druhou sadu vztahů (3.21).

3.3 Příklady

Pro ilustraci uveďme několik příkladů Hamiltonových funkcí pro nejdůležitější klasické systémy jako je volná částice, harmonický oscilátor a pohyb v poli centrální síly.

3.3.1 Volná částice

Volnou částici si představujeme jako hmotný bod o hmotnosti m, na nějž nepůsobí žádné výsledné síly, Pohyb volné čáatice je pak rovnoměrný a přímočarý, a její trajektorií je potom přímka. Pro popis polohy takovéto volné částice pak můžeme volit jedinou funkci $x(t) : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$, která určuje velikost x dráhy, kterou částice urazí po přímce v $\mathbb{R}^3$ za dobu t od nějakého referenčního počátku souřadné soustavy. Lagrangián volné částice pak je

$$L(\dot{x}) \;=\; \frac{m}{2}\,\dot{x}^2\,. \tag{3.61}$$

Dosazením tohoto lagrangiánu do Eulerových-Lagrangeových rovnic a jejich vyřešením dostaneme následující množinu všech řešení:

$$\big\{x(t)\big\}_L \;=\; \big\{C_1 \cdot t + C_2\;;\; C_1, C_2 \in \mathbb{R}\big\}\,. \tag{3.62}$$

Zvolíme si nyní nějaký libovolný počáteční čas t_A a polohu x_A, koncový čas x_B a polohu x_B, a budeme chtít najít fyzikální trajektorii $x_{AB}(t) \in \{x(t)\}_L$ takovou, aby $x_{AB}(t_A) = x_A$ a $x_{AB}(t_B) = x_B$. Aplikací těchto podmínek na funkce z množiny (3.62) určíme konstanty C_1 a C_2 jako

$$C_1 \;=\; \frac{x_B - x_A}{t_B - t_A}\,, \quad C_2 \;=\; \frac{x_A\,t_A - x_B\,t_A}{t_B - t_A}\,. \tag{3.63}$$

Hledaná fyzikální trajektorie $x_{AB}(t)$ pak bude mít tvar

$$x_{AB}(t) \;=\; \left(\frac{x_B - x_A}{t_B - t_A}\right) t \;+\; \frac{x_A\,t_A - x_B\,t_A}{t_B - t_A}\,. \tag{3.64}$$

Dosazením této trajektorie do definičního vztahu (3.1) a provedením integrace, dostaneme Hamiltonovu funkci S pro volnou částici

$$S(t_A, x_A, t_B, x_B) \;=\; \frac{m}{2}\,\frac{(x_B - x_A)^2}{t_B - t_A}\,. \tag{3.65}$$

Spočítáme-li derivace Hamiltonovy funkce (3.65) podle počátečního bodu x_A, nebo podle koncového bodu x_B, dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial x_A} \;&=\; -m\,\frac{x_B - x_A}{t_B - t_A} \;=\; -\,\frac{dL}{d\dot{x}}\big(\dot{x}_{AB}(t_A)\big) \;=\; -p_A\,, \\ \frac{\partial S}{\partial x_B} \;&=\; m\,\frac{x_B - x_A}{t_B - t_A} \;=\; \frac{dL}{d\dot{x}}\big(\dot{x}_{AB}(t_B)\big) \;=\; p_B\,, \end{aligned} \tag{3.66}$$

což jsou zobecněné hybnosti trajektorie $x_{AB}(t)$ v počátečním a koncovém čase t_A a t_B. Z výrazů (3.66) pro volnou částici vidíme, že jsou splněny obecné vztahy (3.23). Volná částice se pohybuje rovnoměrně přímočaře, její rychlost a hybnost jsou tedy konstantní, což se schoduje s naším výsledkem (3.66), kde též vidíme, že $p_A = p_B =$ konst. vůči času t.

Spočítáme-li dále derivace Hamiltonovy funkce (3.65) podle počátečního času t_A, nebo podle koncového bodu t_B dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t_A} \;&=\; \frac{m}{2}\left(\frac{x_A - x_A}{t_B - t_A}\right)^2 \;=\; E_A \\ \frac{\partial S}{\partial t_B} \;&=\; -\frac{m}{2}\left(\frac{x_B - x_A}{t_B - t_A}\right)^2 \;=\; -E_B \end{aligned} \tag{3.67}$$

což odpovídá zobecněným energiím v časech t_A a t_B. V případě volné částice jsou počáteční i koncové zobecněné energie stejné a jsou obě rovné kinetické energie částice, $E_A = E_B = E_{kin}$, jak je vidět ze vztahů (3.67).

Vezmeme-li z Hamiltonovy funkce spočítaný výraz pro počáteční hybnost p_A (viz. (3.66)):

$$p_A \;=m\,\frac{x_B - x_A}{t_B - t_A}\,, \tag{3.68}$$

a invertujeme ho, tak abychom z něj vyjádřily koncovou polohu x_B:

$$x_B \;=\frac{p_A}{m}\,(t_B - t_A) \,+\, x_A\,, \tag{3.69}$$

dostaneme vztah (3.69) pro výpočet koncové polohy x_B závislý na koncovém čase t_B a počátečních parametrech t_A, x_A a p_A. Je vidět, že vztah (3.69) dobře odpovídá rovnoměrnému přímočarému pohybu volné částice.

Na závěr ještě spočítáme Hamiltonovu funkci volné částice řešením Hamiltonových-Jacobiho rovnic (3.49). Hamiltonián volné částice je

$$H(p) \;=\; \frac{1}{2m}\,p^2\,. \tag{3.70}$$

Generující funkce S_A a S_B nazvěme Hamiltonovými funkcemi v počátečním a koncovém bodě. Obě Hamiltonovy-Jacobiho rovnice pak budou mít tvar

$$\frac{1}{2m}\left(-\frac{\partial S_A}{\partial x_A}\right)^2 - \frac{\partial S_A}{\partial t_A} = 0\,, \qquad \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S_B}{\partial x_B}\right)^2 + \frac{\partial S_B}{\partial t_B} = 0\,. \tag{3.71}$$

Hamiltonián (3.70) volné částice nezávisí explicitně na čase t, je tedy integrálem pohybu. Platí $\frac{d}{dt}H = 0$, a tedy $H = \text{konst.} \equiv E$, kde E představuje celkovou energii volné částice, která se nemění s časem, je tedy v počátečním i v koncovém bodě stejná: $E_A = E = E_B$. Z Hamiltonových-Jacobiho rovnic víme, že pro počáteční a koncovou Hamiltonovu funkci platí vztahy

$$\frac{\partial S_A}{\partial t_A} = E_A = E\,, \qquad \frac{\partial S_B}{\partial t_B} = -E_B = -E\,. \tag{3.72}$$

Integrací dostaneme počáteční a koncové Hamiltonovy funkce v separovaném tvaru

$$S_A = X_A(x_A) + E \cdot t_A\,, \qquad S_B = X_B(x_B) - E \cdot t_B\,. \tag{3.73}$$

Dosazením těchto počátečních a koncových Hamitonových funkcí v separovaném tvaru do Hamiltonových-Jacobiho rovnic (3.71) dostaneme dvě jednoduché obyčejné diferenciální rovnice

$$\frac{dX_A}{dx_A} = \pm\sqrt{2mE}\,, \qquad \frac{dX_B}{dx_B} = \pm\sqrt{2mE}\,. \tag{3.74}$$

Z obecně odvozených vztahů (2.50) víme, že platí

$$\frac{\partial S_A}{\partial x_A} = -p_A\,, \qquad \frac{\partial S_B}{\partial x_B} = p_B\,, \tag{3.75}$$

odkud určíme správná[3] znaménka v rovnicích (3.76). Řešením těchto diferenciálních rovnic jsou potom funkce

$$X_A(x_A) = -\sqrt{2mE}\cdot x_A - X_0\,, \qquad X_B(x_B) = \sqrt{2mE}\cdot x_B + X_0\,, \tag{3.76}$$

kde X_0 je integrační konstanta. Dosazením těchto funkcí do (3.73) již dostaneme obě Hamiltonovy funkce S_A a S_B pro počáteční a koncový bod:

$$\begin{aligned} S_A(t_A, x_A, E) &= -\sqrt{2mE}\cdot x_A + E\cdot t_A - X_0\,, \\ S_B(t_B, x_B, E) &= \sqrt{2mE}\cdot x_B - E\cdot t_B + X_0\,. \end{aligned} \tag{3.77}$$

Jednotlivé Hamiltonovy funkcí S_A a S_B v počátečním a koncovém bodě mají, jakožto řešení Hamiltonovy-Jacobiho rovnice, význam generátorů kanonických transformací, čímž pro ně platí

$$\frac{\partial S_A}{\partial E} = -D_A = \text{konst.}\,, \qquad \frac{\partial S_B}{\partial E} = D_B = \text{konst.}\,, \tag{3.78}$$

[3]Pokládáme zde p_B kladné, a tedy p_A záporné. Potom je $\frac{dX_A}{dx_A} = -\sqrt{2mE}$ a $\frac{dX_B}{dx_B} = +\sqrt{2mE}$.

kde D_A a D_B jsou konstantní v čase, jedná se tedy o integrály pohybu, a platí $D_A = D_B$. Odtud dostáváme rovnici pro energii E:

$$- \frac{\partial S_A}{\partial E} = \frac{\partial S_B}{\partial E} \quad \Longrightarrow \quad \sqrt{\frac{m}{2E}} \cdot x_A - t_A = \sqrt{\frac{m}{2E}} \cdot x_B - t_B \,, \tag{3.79}$$

jejímž řešením je energie E, vyjádřená pouze pomocí počátečního bodu t_A, x_A a koncového bodu t_B, x_B:

$$E = \frac{m}{2} \frac{(x_B - x_A)^2}{(t_B - t_A)^2} \,. \tag{3.80}$$

Hledanou (celkovou) Hamiltonovu funkci $S(t_A, x_A, t_B, x_B)$ pak dostaneme jako

$$\begin{aligned} S(t_A, x_A, t_B, x_B) &= S(t_A, x_A, E) + S(t_B, x_B, E) = \\ &= \sqrt{2mE}\,(x_B - x_A) - E\,(t_B - t_A) = \\ &= \sqrt{2m \frac{m}{2} \frac{(x_B - x_A)^2}{(t_B - t_A)^2}}\,(x_B - x_A) - \frac{m}{2} \frac{(x_B - x_A)^2}{(t_B - t_A)^2}\,(t_B - t_A) = \\ &= \frac{m}{2} \frac{(x_B - x_A)^2}{(t_B - t_A)} \,. \end{aligned} \tag{3.81}$$

Vidíme, že se Hamiltonova funkce vypočítaná pomocí Hamiltonovy-Jacobiho rovnice schoduje s Hamiltonovou funkcí (3.65) spočtenou z definice.

3.3.2 Harmonický oscilátor

Budeme uvažovat harmonicky oscilující hmotný bod o hmotě m s frekvencí ω v jedné dimenzi. Polohu (resp. výchylku) bodu budeme popisovat kartézskou souřadnicí x. Lagrangián tohoto systému má tvar

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\,\omega^2}{2} x^2 \,. \tag{3.82}$$

Řešení Euleroých-Lagrangeových rovnic pro tento lagrangián je následující:

$$\big\{x(t)\big\}_L = \big\{C_1 \sin(\omega\, t) + C_2 \cos(\omega\, t) \;;\; C_1, C_2 \in \mathbb{R}\big\} \,. \tag{3.83}$$

Volme nějaký libovolný počáteční čas t_A a počáteční polohu x_A, koncový čas t_B a koncovou polohu x_B, a z podmínek $x(t_A) = x_A$ a $x(t_B) = x_B$ pak vyjádříme konstanty C_1 a C_2 jako

$$C_1 = \frac{x_B \cos(\omega\, t_A) - x_A \cos(\omega\, t_B)}{\sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)} \,, \quad C_2 = \frac{x_A \sin(\omega\, t_B) - x_B \sin(\omega\, t_A)}{\sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)} \,. \tag{3.84}$$

Hledaná fyzikální trajektorie $x_{AB}(t)$, procházející body x_A a x_B v časech t_A a t_B je pak tvaru:

$$\begin{aligned} x_{AB}(t) = {} & \frac{x_B \cos(\omega\, t_A) - x_A \cos(\omega\, t_B)}{\sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)} \sin(\omega\, t) + \\ & + \frac{x_A \sin(\omega\, t_B) - x_B \sin(\omega\, t_A)}{\sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)} \cos(\omega\, t) \,. \end{aligned} \tag{3.85}$$

Dosazením trajektorie $x_{AB}(t)$ do vztahu (3.1) a provedením integrace dostaneme Hamiltonovu funkci pro jednodimenzionální harmonický oscilátor:

$$S(t_A,\, x_A,\, t_B,\, x_B) \;=\; \frac{m\,\omega}{2}\,\frac{(x_B^2 + x_A^2)\cos\big(\omega(t_B - t_A)\big) - 2\,x_A\,x_B}{\sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)}\,. \tag{3.86}$$

Derivace Hamiltonovy funkce (3.86) podle počátečního bodu x_A, a podle koncového bodu x_B jsou

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial x_A} &= m\,\omega\,\frac{x_A\cos\big(\omega(t_B - t_A)\big) - x_B}{\sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)}\,, \\ \frac{\partial S}{\partial x_B} &= m\,\omega\,\frac{x_B\cos\big(\omega(t_B - t_A)\big) - x_A}{\sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)}\,. \end{aligned} \tag{3.87}$$

Z lagrangiánu (3.82) spočítáme zobecněné hybnosti pro trajektorii $x_{AB}(t)$ v obou časech t_A a t_B jako

$$\begin{aligned} p_A &\equiv \frac{dL}{d\dot{x}}\big(x_{AB}(t_A),\, \dot{x}_{AB}(t_A)\big) \;=\; m\,\omega\,\frac{x_B - x_A\cos\big(\omega(t_B - t_A)\big)}{\sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)}\,, \\ p_B &\equiv \frac{dL}{d\dot{x}}\big(x_{AB}(t_B),\, \dot{x}_{AB}(t_B)\big) \;=\; m\,\omega\,\frac{x_A - x_B\cos\big(\omega(t_B - t_A)\big)}{\sin\big(\omega(t_B - t_A)\big)}\,. \end{aligned} \tag{3.88}$$

Srovnáním výrazů (3.87) a (3.88) vidíme, že opět platí obecné vztahy (3.23).

Spočítáme nyní derivace Hamiltonovy funkce (3.86) podle počátečního času t_A, a podle koncového bodu t_B. Vyjde nám

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t_A} &= \frac{m\omega^2}{2}\left(x_B^2 + x_A^2\right) + \frac{m\omega^2}{2}\left(x_B^2 + x_A^2\right)\frac{\cos^2\big(\omega(t_B - t_A)\big)}{\sin^2\big(\omega(t_B - t_A)\big)} + \\ &\quad + \frac{m\omega^2 x_B x_A\cos\big(\omega(t_B - t_A)\big)}{\sin^2\big(\omega(t_B - t_A)\big)} = \\ &= \frac{m\omega^2}{2}\frac{(x_B^2 + x_A^2)}{\sin^2\big(\omega(t_B - t_A)\big)} - \frac{m\omega^2 x_B x_A\cos\big(\omega(t_B - t_A)\big)}{\sin^2\big(\omega(t_B - t_A)\big)} = \\ &= \frac{m\omega^2}{2}\frac{\Big(x_B^2 + x_A^2 - 2x_B x_A\cos\big(\omega(t_B - t_A)\big)\Big)}{\sin^2\big(\omega(t_B - t_A)\big)} \end{aligned} \tag{3.89}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t_B} = \ldots = -\frac{m\omega^2}{2}\frac{\Big(x_B^2 + x_A^2 - 2x_B x_A\cos\big(\omega(t_B - t_A)\big)\Big)}{\sin^2\big(\omega(t_B - t_A)\big)} \tag{3.90}$$

Pro srovnání spočítáme ještě počáteční a koncové zobecněné energie E_A a E_B.

Dle definice (2.6) je

$$\begin{aligned} E_A &= \frac{m}{2}\,\dot{x}^2_{AB}(t_A) \;+\; \frac{m\omega^2}{2}\,x^2_{AB}(t_A) \;= \\ &= \frac{m\omega^2}{2}\frac{\Big(x_B^2 + x_A^2 - 2x_Bx_A\cos\big(\omega(t_B-t_A)\big)\Big)}{\sin^2\big(\omega(t_B-t_A)\big)} \end{aligned} \tag{3.91}$$

$$\begin{aligned} E_B &= \frac{m}{2}\,\dot{x}^2_{AB}(t_B) \;+\; \frac{m\omega^2}{2}\,x^2_{AB}(t_B) \;= \\ &= \frac{m\omega^2}{2}\frac{\Big(x_B^2 + x_A^2 - 2x_Bx_A\cos\big(\omega(t_B-t_A)\big)\Big)}{\sin^2\big(\omega(t_B-t_A)\big)} \end{aligned} \tag{3.92}$$

Srovnáme-li výrazy (3.89) a (3.90) spočtené jako derivace Hamiltonovy funkce podle počátečního a koncového času s výrazy (3.91) a (3.92) spočtenými z definice zobecněné energie, vidíme že jsou opět splněny obecné vztahy (3.41).

Inverzí počáteční hybnosti p_A, spočítané jako derivace Hamiltonovy funkce podle počáteční polohy (viz. (3.87)), vyjádříme koncovou polohu x_B jako funkci koncového času t_B a počátečních parametrů t_A, x_A a p_A. Dostáváme pak vztah

$$x_B \;= \frac{p_A}{m\,\omega}\,\sin\big(\omega(t_B-t_A)\big) \;+\; x_A\cos\big(\omega(t_B-t_A)\big)\,. \tag{3.93}$$

Ověřme ještě, že Hamiltonova funkce (3.86) splňuje Hamiltonovy-Jacobiho rovnice v obou okrajových bodech t_A, x_A a t_B, x_B. Hamiltonián pro harmonický oscilátor je

$$H(x,\,p) \;=\; \frac{p^2}{2m} \;+\; \frac{m\,\omega^2}{2}\,x^2\,. \tag{3.94}$$

Hamiltonovy-Jacobiho rovnice (3.49) v koncovém bodě t_B, x_B pak bude

$$\begin{aligned} H\left(x_B,\,\frac{\partial S}{\partial x_B}\right) + \frac{\partial S}{\partial t_B} \;&=\; \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x_B}\right)^2 + \frac{m\,\omega^2}{2}\,x_B^2 + \frac{\partial S}{\partial t_B} \;= \\ &= \frac{m\,\omega^2}{2}\,\frac{x_B^2\cos^2\big(\omega(t_B-t_A)\big) \;-\; 2x_Ax_B\cos\big(\omega(t_B-t_A)\big) \;+\; x_A^2}{\sin^2\big(\omega(t_B-t_A)\big)} \;+\; \frac{m\,\omega^2}{2}\,x_B^2 \;- \\ &- \frac{m\omega^2}{2}\frac{\Big(x_B^2 + x_A^2 - 2x_Bx_A\cos\big(\omega(t_B-t_A)\big)\Big)}{\sin^2\big(\omega(t_B-t_A)\big)} \;= \\ &= \frac{m\,\omega^2}{2}\,\frac{x_B^2\cos^2\big(\omega(t_B-t_A)\big)}{\sin^2\big(\omega(t_B-t_A)\big)} \;+\; \frac{m\,\omega^2}{2}\,x_B^2 \;-\; \frac{m\,\omega^2}{2}\,\frac{x_B^2}{\sin^2\big(\omega(t_B-t_A)\big)} \;= \\ &= \frac{m\,\omega^2}{2}\,\frac{x_B^2}{\sin^2\big(\omega(t_B-t_A)\big)} \;-\; \frac{m\,\omega^2}{2}\,\frac{x_B^2}{\sin^2\big(\omega(t_B-t_A)\big)} \;=\; 0\,. \end{aligned} \tag{3.95}$$

Z výpočtu (3.95) pak vidíme, že Hamiltonova funkce (3.86) skutečně splňuje Hamiltonovu-Jacobiho rovnici v koncovém bodě t_B, x_B. Analogickým výpočtem lze pak ověřit, že Hamiltonova funkce splňuje i Hamiltonovu-Jacobiho rovnici v počátečním bodě t_A, x_A.

3.3.3 Pohyb v poli centrální síly

Mějme hmotný bod o hmotě m, pohybující se v potenciálu $V(r) \propto r^{-1}$, kde $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ je vzdálenost od (bodového) zdroje potenciálu, a x, y, z jsou kartézské souřadnice. Pro jednoduchost umístíme zdroj potenciálu do počátku souřadné soustavy. Protože je potenciál sféricky symetrický, přejdeme ke sférickým souřadnicím r, θ, ϕ, pro které platí: $x = r\cos(\phi)\sin(\theta)$, $y = r\sin(\phi)\sin(\theta)$ a $z = r\cos(\theta)$. Z klasické mechaniky je známé, že pohyb v poli centrální síly je rovinný, což znamená, že při volbě konkrétní hodnoty počátečního úhlu $\theta_0 =$ konst. se bude tato hodnota zachovávat, nebo-li $\theta(t) = \theta_0 =$ konst. Tuto redukci na rovinný problém si můžeme představit také tak, že si zvolíme nějaký počáteční bod x_A, y_A, z_A a koncový bod x_B, y_B, z_B. Neleží-li počáteční a koncový bod na stejné přímce jako centrum potenciálu, určuje pak tato trojice bodů konkrétní rovinu, ve které se bude pohyb odehrávat. V této rovině pak již můžeme pohyb popisovat dvojicí polárních souřadnic $r(t)$ a $\phi(t)$. Místo 6 parametrů x_A, y_A, z_A, x_B, y_B a z_B pro polohy obou krajních bodů pak stačí volit rovinu pohybu, a 4 parametry r_A, ϕ_A, r_B a ϕ_B. Konkrétní rovinu pohybu ale budeme mít jednoznačně určenou pouze pokud budeme počáteční polohu $(x_A, y_A, z_A) \in \mathbb{R}^3$ a koncovou polohu $(x_B, y_B, z_B) \in \mathbb{R}^3$ volit nekolineárně s centrem potenciálu (to jsme umístily do bodu $(0, 0, 0)$). Budou-li ležet centrum síly, koncový a počáteční bod na jedné přímce, nebude již Hamiltonova funkce funkcí (viz. začátek sekce 3). Tyto body je tedy nutné volit nekolineárně.

Lagrangián a hamiltonián tohoto systému, po jeho redukci na rovinný problém, budou mít ve sférických souřadnicích r, ϕ tvar

$$\begin{aligned} L(r, \dot{r}, \dot{\phi}) &= \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2\right) - \frac{\alpha}{r}\,, \\ H(r, p_r, p_\phi) &= \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + r^2 p_\phi^2\right) + \frac{\alpha}{r}\,, \end{aligned} \tag{3.96}$$

kde $\alpha \in \mathbb{R}$ je nějaká konstanta, a p_r, p_ϕ jsou zobecněné hybnosti příslušné souřadnicím r, ϕ.

Pokud budeme nyní chtít explicitně spočítat funkce $r(t)$ a $\phi(t)$, narazíme na problém. Řešením Eulerových-Lagrangeových rovnic pro tento lagrangián můžeme totiž získat nejlépe funkce $r(\phi)$ (resp. $\phi(r)$) a $t(r)$. Jejich inverze na analytické funkce $r(t)$ a $\phi(t)$ není možná. Hamiltonovu funkci pak nemůžeme (analyticky) spočítat z definice (3.1), ale můžeme se ji pokusit získat řešením Hamiltonových-Jacobiho rovnic (3.49). Ty mají tvar

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S_A}{\partial r_B}\right)^2 + \frac{r^2}{2m}\left(\frac{\partial S_B}{\partial \phi_B}\right)^2 + \frac{\alpha}{r_B} + \frac{\partial S_B}{\partial t_B} &= 0\,, \\ \frac{1}{2m}\left(-\frac{\partial S_A}{\partial r_A}\right)^2 + \frac{r^2}{2m}\left(-\frac{\partial S_A}{\partial \phi_A}\right)^2 + \frac{\alpha}{r_A} - \frac{\partial S_A}{\partial t_A} &= 0\,. \end{aligned} \tag{3.97}$$

Tyto rovnice si můžeme výrazně zjednodušit pomocí známých integrálů pohybu. Hamiltonián systému nezávisí explicitně na čase t, ani na úhlové souřadnici ϕ. Z Hamiltonových kanonických rovnic je $\frac{d}{dt}p_\phi = \frac{\partial}{\partial\phi}H = 0$, a tedy $p_\phi =$ konst. $\equiv J$.

Druhým integrálem pohybu je hamiltonián, který představuje celkovou energii. Potom $\frac{d}{dt}H = 0$ a tedy $H =$ konst. $\equiv E$. Celková energie E, a moment hybnosti J systému se tedy zachovávají, a budou stejné v počátečním i koncovém bodě. Víme, že pro generující funkce (resp. počáteční a koncové Hamiltonovy funkce) S_A a S_B platí vztahy

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_B(t_B,\, r_B,\, \phi_B)}{\partial \phi_B} &= p_{\phi_B} = J\,, \quad \frac{\partial S_B(t_B,\, r_B,\, \phi_B)}{\partial t_B} = -E_B = -E\,, \\ \frac{\partial S_A(t_A,\, r_A,\, \phi_A)}{\partial \phi_A} &= -p_{\phi_A} = -J\,, \quad \frac{\partial S_A(t_A,\, r_A,\, \phi_A)}{\partial t_A} = E_A = E\,, \end{aligned} \tag{3.98}$$

z čehož plyne, že můžeme počáteční a koncové Hamiltonovy funkce S_A a S_B zapsat v separovaném tvaru

$$\begin{aligned} S_B(t_B,\, r_B,\, \phi_B) &= R_B(r_B) + J\cdot\phi_B - E\cdot t_B\,, \\ S_A(t_A,\, r_A,\, \phi_A) &= R_A(r_A) - J\cdot\phi_A + E\cdot t_A\,. \end{aligned} \tag{3.99}$$

Dosazením obou separovaných funkcí (3.99) do příslušných Hamiltonových-Jacobiho rovnic (3.97) systému dostáváme pro počáteční i koncový bod stejnou obyčejnou diferenciální rovnici

$$\left(\frac{dR}{dr}\right)^2 + \frac{J^2}{r^2} + \frac{2m\alpha}{r} - 2mE = 0\,, \tag{3.100}$$

kde R, r, ϕ, t může být jak počáteční sada parametrů r_A, ϕ_A, t_A, tak i koncová sada parametrů r_B, ϕ_B, t_B. Řešením této diferenciální rovnice je funkce

$$\begin{aligned} R(r) &= \int \frac{\sqrt{2mE\,r^2 - 2m\alpha\,r - J^2}}{r}\,dr = \\ &= R_0 + \sqrt{2mE\,r^2 - 2m\alpha\,r - J^2} + \\ &+ 2J \arctan\left(\frac{\sqrt{2mE}\,r - \sqrt{2mE\,r^2 - 2m\alpha\,r - J^2}}{J}\right) + \\ &+ \frac{m\alpha}{\sqrt{2mE}}\left(\ln\left(2m\alpha - 4mE\,r + 2\sqrt{2mE}\,\sqrt{2mE\,r^2 - 2m\alpha\,r - J^2}\right) - \frac{1}{2}\right), \end{aligned} \tag{3.101}$$

kde R_0 je integrační konstanta.

Dosazením funkce $R(r)$ v koncové sadě parametrů do (3.99) dostaneme

$$\begin{aligned} S_B(t_B,\, r_B,\, \phi_B,\, E,\, J) &= R_0 + J\cdot\phi_B - E\cdot t_B + \sqrt{2mE\,r_B^2 - 2m\alpha\,r_B - J^2} + \\ &+ 2J \arctan\left(\frac{\sqrt{2mE}\,r_B - \sqrt{2mE\,r_B^2 - 2m\alpha\,r_B - J^2}}{J}\right) + \\ &+ \frac{m\alpha}{\sqrt{2mE}}\left(\ln\left(2m\alpha - 4mE\,r_B + 2\sqrt{2mE}\,\sqrt{2mE\,r_B^2 - 2m\alpha\,r_B - J^2}\right) - \frac{1}{2}\right), \end{aligned} \tag{3.102}$$

a analogicky pro počáteční sadu parametrů je

$$S_A(t_A,\, r_A,\, \phi_A,\, E,\, J) \;=\; -\,R_0 \;-\; J{\cdot}\phi_A \;+\; E{\cdot}t_A \;-\; \sqrt{2mE\,r_A^2 \;-\; 2m\alpha\,r_A \;-\; J^2} \;-$$

$$-\;\; 2J\,\arctan\left(\frac{\sqrt{2mE}\,r_A \;-\; \sqrt{2mE\,r_A^2 \;-\; 2m\alpha\,r_A \;-\; J^2}}{J}\right) \;-\tag{3.103}$$

$$-\;\frac{m\alpha}{\sqrt{2mE}}\left(\ln\left(2m\alpha - 4mE\,r_A \;+\; 2\sqrt{2mE}\,\sqrt{2mE\,r_A^2 \;-\; 2m\alpha\,r_A \;-\; J^2}\right) \;-\; \frac{1}{2}\right).$$

Celkovou Hamiltonovu funkci S pak určíme jako

$$\begin{aligned} &S(t_A,\, r_A,\, \phi_A,\, t_B,\, r_B,\, \phi_B,\, E,\, J) \;= \\ &\qquad\qquad = \; S_B(t_B,\, r_B,\, \phi_B,\, E,\, J) \;+\; S_A(t_A,\, r_A,\, \phi_A,\, E,\, J). \end{aligned}\tag{3.104}$$

Pro určení konstant E a J pomocí parametrů r_A, ϕ_A, t_A, r_B, ϕ_B a t_B musíme řešit dvojici rovnic

$$\begin{aligned} \frac{\partial\, S_B(t_B,\, r_B,\, \phi_B,\, E,\, J)}{\partial E} \;&=\; -\;\frac{\partial\, S_A(t_A,\, r_A,\, \phi_A,\, E,\, J)}{\partial E}\,, \\ \frac{\partial\, S_B(t_B,\, r_B,\, \phi_B,\, E,\, J)}{\partial J} \;&=\; -\;\frac{\partial\, S_A(t_A,\, r_A,\, \phi_A,\, E,\, J)}{\partial J}\,, \end{aligned}\tag{3.105}$$

pro dvě neznámé E a J.

Podíváme-li se na explicitní tvary (3.102) a (3.103) funkcí S_B a S_A, vidíme, že se v nich E a J objevují v argumentu arkustangenty a logaritmu, a to ještě pod odmocninou. Rovnice (3.105) pak budou transcendentní. Jejich obecné analytické řešení neexistuje. Pro konkrétní číselné hodnoty přítomných parametrů, se je pak můžeme pokusit řešit numericky. Složitost rovnic (3.105) v sobě odráží fakt, že Hamiltonova funkce není v případě pohybu systému v poli centrální síly určena počátečním a koncovým bodem jednoznačně. Počáteční bod t_A, r_A, ϕ_A a koncový bod t_B, r_B, ϕ_B jsme volili zcela libovolně (kromě "zakázaných" případů, kdy je $\phi_B = \phi_A + \pi$, což odpovídá situaci, kdy je počáteční a koncová poloha kolineární s centrem síly). Tělesa se ve sféricky symetrickém potenciálu tvaru $\propto r^{-1}$ pohybují po kuželosečkách. Pro takto obecně volené body mohou existovat dvě odlišné fyzikální trajektorie, odpovídající dvěma možným orientacím pohybu. Systém se totiž může z počátečního bodu pohybovat doleva nebo doprava, v každém z případů po odlišných trajektoriích směrem ke koncovému bodu. Mohou také nastat situace, kdy se systém bude moci dostat z počáteční polohy v počátečním čase do koncové polohy v koncovém čase po různých kuželosečkách, které byť budou zcela odlišné, budou ve správných časech spojovat obě polohy. Z těchto důvodů není překvapivé, že rovnice (3.105) nejsou jednoznačně analyticky řešitelné (což se také projevuje na jejich složitosti).

4. Amplituda přechodu

Pravděpodobnost $P(\psi_2,\, \psi_1)$ toho, že v nějakém stavu $|\psi_1\rangle$ naměříme obecně jiný stav $|\psi_2\rangle$ (nebo též obráceně) je $P(\psi_2,\, \psi_1) \equiv |\langle\psi_2|\psi_1\rangle|^2 = |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 \in \mathbb{R}$. Tuto pravděpodobnost můžeme vyjádřit pomocí tzv. amplitudy pravděpodobnosti $W(\psi_2,\, \psi_1) \equiv \langle\psi_2|\psi_1\rangle \in \mathbb{C}$ jednoduše jako $P(\psi_2,\, \psi_1) = |W(\psi_2,\, \psi_1)|^2$.

Sledujeme-li nějaký systém, popsaný časově proměnným stavem $|\psi(t)\rangle$, který se v čase t_1 nachází ve stavu $|\psi_1\rangle \equiv |\psi_1(t_1)\rangle$, zavedeme tzv. amplitudu přechodu jako

$$W(\psi_2,\, \psi_1) \;\equiv\; \langle\psi_2|\psi(t_2)\rangle \;=\; \langle\psi_2|\, \widehat{U}(t_2 - t_1)\, |\psi_1\rangle \;, \tag{4.1}$$

kde $\widehat{U}$ je evoluční operátor (viz. sekce 2.4), $t_2 > t_1$ je nějaký čas, a $|\psi_2\rangle$ je nějaký stav. Hodnota $|W(\psi_2,\, \psi_1)|^2$ pak udává pravděpodobnost, s jakou se sledovaný systém, který se v čase t_1 nacházel ve stavu $|\psi_1\rangle$, bude v čase t_2 nacházet ve stavu $|\psi_2\rangle$, tj. s jakou pravděpodobností bude $|\psi_2\rangle = |\psi(t_2)\rangle$.

Operátor $\widehat{\boldsymbol{x}} = (\widehat{x}^1, \ldots,\, \widehat{x}^n)$ je operátorem pozorovatelné veličiny polohy, odpovídající sadě kartézských souřadnic $\boldsymbol{x} = (x^1, \ldots,\, x^n)$, popisujících reálný (skutečný) prostor, ve kterém se náš systém nachází. Vlastní stavy operátoru polohy označíme jako $|\boldsymbol{x}\rangle$. U operátoru polohy předpokládáme, že pro $\forall k \in \{1, \ldots,\, n\}$ platí $\widehat{x}^k\, |\boldsymbol{x}\rangle = x^k\, |\boldsymbol{x}\rangle$, kde vlastní číslo $x^k \in \mathbb{R}$ operátoru $\widehat{x}^k$ je k-tá kartézská souřadnice. Kompaktně pak tyto vztahy zapisujeme jako $\widehat{\boldsymbol{x}}\, |\boldsymbol{x}\rangle = \boldsymbol{x}\, |\boldsymbol{x}\rangle$, a protože je $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, tak i $\widehat{\boldsymbol{x}}\, \langle\boldsymbol{x}| = \boldsymbol{x}\, \langle\boldsymbol{x}|$.

Komě operátoru polohy potřebujeme ještě operátor hybnosti $\widehat{\boldsymbol{p}} = (\widehat{p}_1, \ldots,\, \widehat{p}_n)$, který odpovídá klasickým hybnostem $\boldsymbol{p} = (p_1, \ldots,\, p_n)$, příslušným kartézským souřadnicím $(x^1, \ldots,\, x^n)$. Vlastní stavy operátoru hybnosti jsou stavy $|\boldsymbol{p}\rangle$. Celkově pak předpokládáme, že pro $\forall k \in \{1, \ldots,\, n\}$ platí $\widehat{p}_k\, |\boldsymbol{p}\rangle = p_k\, |\boldsymbol{p}\rangle$, kde $p_k \in \mathbb{R}$ je vlastní číslo operátoru hybnosti $\widehat{p}_k$, které má význam k-té složky klasické hybnosti systému. Kompaktně zapsáno: $\widehat{\boldsymbol{p}}\, |\boldsymbol{p}\rangle = \boldsymbol{p}\, |\boldsymbol{p}\rangle$. Opět je $\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^n$, tedy platí také $\widehat{\boldsymbol{p}}\, \langle\boldsymbol{p}| = \boldsymbol{p}\, \langle\boldsymbol{p}|$.

Mějme nějaký stav $|\psi\rangle$. Tomuto stavu bude v souřadnicové reprezentaci odpovídat funkce $\psi(\boldsymbol{x}) \equiv \langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle$, a v hybnostní reprezentaci funkce $\psi(\boldsymbol{p}) \equiv \langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle$. Z formalismu kvantové teorie víme, že obě působí-li oba operátory na funkce v odpovídající reprezentaci, platí

$$\begin{aligned} \widehat{\boldsymbol{x}}\, \psi(\boldsymbol{x}) \;&=\; \widehat{\boldsymbol{x}}\, \langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle \;=\; \boldsymbol{x}\, \langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle \;=\; \boldsymbol{x}\, \psi(\boldsymbol{x})\,, \\ \widehat{\boldsymbol{p}}\, \psi(\boldsymbol{p}) \;&=\; \widehat{\boldsymbol{p}}\, \langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle \;=\; \boldsymbol{p}\, \langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle \;=\; \boldsymbol{p}\, \psi(\boldsymbol{p})\,. \end{aligned} \tag{4.2}$$

Pokud oba operátory působí na funkce v opačné reprezentaci, je

$$\begin{aligned} \widehat{\boldsymbol{p}}\, \psi(\boldsymbol{x}) \;&=\; -i\hbar\, \nabla_{\boldsymbol{x}}\, \psi(\boldsymbol{x}) \;\equiv\; -i\hbar \left(\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x})}{\partial x^1}, \ldots,\, \frac{\partial\psi(\boldsymbol{x})}{\partial x^n} \right) \,, \\ \widehat{\boldsymbol{x}}\, \psi(\boldsymbol{p}) \;&=\; +i\hbar\, \nabla_{\boldsymbol{p}}\, \psi(\boldsymbol{p}) \;\equiv\; +i\hbar \left(\frac{\partial\psi(\boldsymbol{p})}{\partial p_1}, \ldots,\, \frac{\partial\psi(\boldsymbol{p})}{\partial p_n} \right) \,. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Mezi vlastními stavy $|\boldsymbol{x}\rangle$ a $|\boldsymbol{p}\rangle$ operátorů $\widehat{\boldsymbol{x}}$ a $\widehat{\boldsymbol{p}}$ polohy a hybnosti, platí vztahy

$$\langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{x}\rangle \;=\; \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}\,, \qquad \langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}\rangle \;=\; \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{n}{2}} e^{+\frac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}\,, \tag{4.4}$$

kde $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x} \equiv \sum_{k=1}^{n} p_k\, x^k$ je standardní skalární součin.

Předpokládáme, že dynamika našeho systému je popsána nějakým, časově nezávislým hamiltoniánem $\widehat{H}(\widehat{\boldsymbol{p}},\,\widehat{\boldsymbol{x}})$. Evoluční operátor pak lze vyjádřit dle vztahu (2.64) jako exponenciálu tohoto hamiltoniánu. Označme $|\boldsymbol{x}_A\rangle \equiv |\boldsymbol{x}(t_{\boldsymbol{A}})\rangle$ stav systému v čase $t_{\boldsymbol{A}}$. Dále se budeme zabývat konkrétní amplitudou přechodu

$$W(\boldsymbol{x_B},\,t_B;\,\boldsymbol{x_A},\,t_A) \;\equiv\; \langle \boldsymbol{x_B}|\,\widehat{U}(t_B - t_A)\,|\boldsymbol{x_A}\rangle \;=\; \langle \boldsymbol{x_B}|\; e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)}\,|\boldsymbol{x_A}\rangle\,, \tag{4.5}$$

která udává pravděpodobnost přechodu systému ze stavu popsaného polohou $\boldsymbol{x_A}$ v čase t_A do stavu popsaného polohou $\boldsymbol{x_B}$ v čase t_B. Jak je ze vztahu (4.5) vidět, odpovídá takto definovaná amplituda přechodu maticovému elementu evolučního operátoru (2.64) vzhledem k nějaké bázi $\{|\boldsymbol{x}\rangle\}_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}$.

4.1 Amplituda přechodu pro volnou částici

Spočítejme nejprve amplitudu přechodu (4.5) pro volnou částici mezi počátečním stavem $|\boldsymbol{x_A}\rangle$ v čase t_A, a koncovým stavem $|\boldsymbol{x_B}\rangle$ v čase t_B. K popisu volíme kartézské souřadnice $\boldsymbol{x}$ a hybnosti $\boldsymbol{p}$. Operátor hamiltoniánu volné částice je pak tvaru

$$\widehat{H} \;=\; \sum_{k}^{n} \frac{1}{2m}\,\widehat{p}_k^{\,2} \;\equiv\; \frac{1}{2m}\,\widehat{\boldsymbol{p}}^{\,2} \tag{4.6}$$

Amplituda volné částice pak je

$$W(\boldsymbol{x_B},\,t_B\,;\,\boldsymbol{x_A},\,t_A) \;=\; \langle \boldsymbol{x_B}|\; e^{-\frac{i}{\hbar}\,\frac{1}{2m}\,\widehat{\boldsymbol{p}}^2\,(t_B - t_A)}\,|\boldsymbol{x_A}\rangle \tag{4.7}$$

Pro výpočet využijeme relací úplnosti pro stavy $|\boldsymbol{p}\rangle$ reprezentující kartézské hybnosti $\boldsymbol{p}$

$$\int\limits_{\mathbb{R}^n} |\boldsymbol{p}\rangle\,\langle \boldsymbol{p}|\,d\boldsymbol{p} \;=\; \widehat{I}\,, \tag{4.8}$$

kde $\widehat{I}$ je operátor identity. Vložením těchto relací úplnosti do vztahu (4.7), a dosazením ze vztahů (4.4) dostaneme

$$(4.7) \;=\; \int\limits_{\mathbb{R}^n}\int\limits_{\mathbb{R}^n} \langle \boldsymbol{x_B}|\boldsymbol{p'}\rangle\;\langle \boldsymbol{p'}|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\,\frac{1}{2m}\,\widehat{\boldsymbol{p}}^2\,(t_B - t_A)}\,|\boldsymbol{p}\rangle\;\langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{x_A}\rangle\;d\boldsymbol{p'}\,d\boldsymbol{p} \;=$$

$$= \int\limits_{\mathbb{R}^n}\int\limits_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{n}{2}} e^{+\frac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{p'}\cdot\boldsymbol{x_B}}\;\langle \boldsymbol{p'}|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\,\frac{1}{2m}\,\widehat{\boldsymbol{p}}^2\,(t_B - t_A)}\,|\boldsymbol{p}\rangle \;\times$$

$$\times\;\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x_A}}\,d\boldsymbol{p'}\,d\boldsymbol{p} \;=$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int\limits_{\mathbb{R}^n}\int\limits_{\mathbb{R}^n} e^{+\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p'}\cdot\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x_A})} \langle\boldsymbol{p'}|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\widehat{\boldsymbol{p}}^2(t_B-t_A)}\,|\boldsymbol{p}\rangle\, d\boldsymbol{p'}\, d\boldsymbol{p} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int\limits_{\mathbb{R}^n}\int\limits_{\mathbb{R}^n} e^{+\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p'}\cdot\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x_A})}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2(t_B-t_A)}\, \langle\boldsymbol{p'}|\boldsymbol{p}\rangle\, d\boldsymbol{p'}\, d\boldsymbol{p}\,, \tag{4.9}$$

kde jsme k posledním kroku využily toho, že stavy $|\boldsymbol{p}\rangle$ a $|\boldsymbol{p'}\rangle$ jsou vlastními stavy operátoru $\widehat{\boldsymbol{p}}$ hybnosti, tedy $\widehat{p}_k\,|\boldsymbol{p}\rangle = p_k\,|\boldsymbol{p}\rangle$ pro $\forall k \in \{1, \ldots, n\}$.

Výraz (4.9) upravíme dále užitím relací ortogonality pro stavy $|\boldsymbol{p}\rangle$ a $|\boldsymbol{p'}\rangle$

$$\langle\boldsymbol{p'}|\boldsymbol{p}\rangle = \delta(\boldsymbol{p'}-\boldsymbol{p}) = \delta(p'_1 - p_1)\cdot\ldots\cdot\delta(p'_n - p_n)\,, \tag{4.10}$$

kde δ je Diracková delta funkce.

Dosazením těchto relací ortogonality do (4.9) dostaneme

$$(4.9) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int\limits_{\mathbb{R}^n}\int\limits_{\mathbb{R}^n} e^{+\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p'}\cdot\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x_A})}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2(t_B-t_A)}\, \delta(\boldsymbol{p'}-\boldsymbol{p})\, d\boldsymbol{p'}\, d\boldsymbol{p} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int\limits_{\mathbb{R}^n} e^{+\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{x_A})}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2(t_B-t_A)}\, d\boldsymbol{p} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int\limits_{\mathbb{R}^n} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{x_A}) - \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2(t_B-t_A)\right) d\boldsymbol{p} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int\limits_{\mathbb{R}^n} e^{-\left(\sqrt{\frac{i(t_B-t_A)}{2m\hbar}}\,\boldsymbol{p} + \sqrt{\frac{i\,m}{2\hbar(t_B-t_A)}}\,(\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{x_A})\right)^2} \times$$
$$\times\, e^{+\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2(t_B-t_A)}(\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{x_A})^2}\, d\boldsymbol{p}\,. \tag{4.11}$$

Výraz (4.11) lze pomocí substituce

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi} &\equiv \sqrt{\frac{i(t_B-t_A)}{2m\hbar}}\,\boldsymbol{p} + \sqrt{\frac{i\,m}{2\hbar(t_B-t_A)}}\,(\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{x_A})\,, \\ d\boldsymbol{\xi} &= \left(\frac{i(t_B-t_A)}{2m\hbar}\right)^{\frac{n}{2}} d\boldsymbol{p} \end{aligned} \tag{4.12}$$

převést na gaussovský integrál, jehož hodnota je dobře známá. Užitím zmíněné substituce dostaneme

$$(4.11) \;=\; \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\, e^{\frac{i}{\hbar}\,\frac{m\,(\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{x_A})^2}{2(t_B-t_A)}} \left(\frac{2\,m\,\hbar}{i\,(t_B-t_A)}\right)^{\frac{n}{2}} \int\limits_{\mathbb{R}^n} e^{-\boldsymbol{\xi}^2}\, d\boldsymbol{\xi} \;=$$

$$=\; \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\, e^{\frac{i}{\hbar}\,\frac{m\,(\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{x_A})^2}{2(t_B-t_A)}} \left(\frac{2\,m\,\hbar}{i\,(t_B-t_A)}\right)^{\frac{n}{2}} \left(\sqrt{\pi}\right)^n \;=$$

$$=\; \left(\frac{m}{i\,2\pi\hbar\,(t_B-t_A)}\right)^{\frac{n}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\,\frac{m\,(\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{x_A})^2}{2(t_B-t_A)}} \,. \tag{4.13}$$

Srovnáme-li tento výsledek s Hamiltonovou funkcí (3.65) pro volnou částici, spočítanou výše, vidíme, že vypočtený výraz (4.13) je úměrný exponenciále Hamiltonovy funkce volné částice. Amplituda přechodu pro volnou částici má pak tvar

$$W(\boldsymbol{x_B},\, t_B\,;\, \boldsymbol{x_A},\, t_A) \;=\; \left(\frac{m}{i\,2\pi\hbar\,(t_B-t_A)}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\frac{m\,(\boldsymbol{x_B}-\boldsymbol{x_A})^2}{2(t_B-t_A)}\right) \;=$$

$$=\; \left(\frac{m}{i\,2\pi\hbar\,(t_B-t_A)}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\, S(t_A,\, \boldsymbol{x_A},\, t_B,\, \boldsymbol{x_B})\right) . \tag{4.14}$$

Zjišťujeme tedy zajímavou souvislost mezi amplitudou přechodu a Hamiltonovou funkcí:

$$W(\boldsymbol{x_B},\, t_B\,;\, \boldsymbol{x_A},\, t_A) \;\propto\; e^{\frac{i}{\hbar}\, S(t_A,\boldsymbol{x_A},t_B,\boldsymbol{x_B})} \,. \tag{4.15}$$

Úměrnost amplitudy přechodu Hamiltonově funkci jsme však zatím zjistily pouze pro volnou částici, a není vůbec jasné, zda bude něco podobného platit i obecněji.

4.2 Amplituda přechodu pro obecnější hamiltoniány

Uvažujme nyní obecnější situaci, kdy máme nějaký systém popsaný operátorem hamiltoniánu tvaru

$$\widehat{H}(\widehat{\boldsymbol{x}},\, \widehat{\boldsymbol{p}}) \;=\; \sum_{k=1}^{n} \frac{\widehat{p}_k^{\,2}}{2m} + V(\widehat{\boldsymbol{x}})\,, \tag{4.16}$$

kde $V(\widehat{\boldsymbol{x}})$ je nějaké potenciál, závislý pouze na poloze $\boldsymbol{x}$.

Časový vývoj systému budeme sledovat na intervalu $[t_A,\, t_B]$. Dobu trvání evoluce $t_B - t_A$ si rozdělíme na N stejných dílů, kde $N \in \mathbb{N}$ je libovolné, a definujeme funkce

$$T_N \;\equiv\; \frac{t_B - t_A}{N}\,. \tag{4.17}$$

Pro takto definované funkce T_N zřejmě platí $\lim\limits_{N\to\infty} T_N{\cdot}N = (t_B - t_A)$.

Evoluční operátor $\widehat{U}(t)$, $t \in \mathbb{R}$, tvoří jednoparametrickou grupu (viz. sekce 2.4). Pro libovolně veliké $N \in \mathbb{N}$ pak platí

$$\widehat{U}(t_B - t_A) \;=\; \prod_{k=1}^{N} \widehat{U}(T_N) \;=\; \underbrace{\widehat{U}(T_N) \cdot \ldots \cdot \widehat{U}(T_N)}_{N-\text{krát}} \,. \tag{4.18}$$

Pokud budeme mít evoluční operátor vyjádřený jako exponenciálu operátoru hamiltoniánu, pak protože exponenciála je spojitá funkce, bude vztah (4.18) platit i v limitním případě $N \to \infty$, nebo-li

$$\lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N} \widehat{U}(T_N) \;=\; \lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N} e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}\cdot T_N} \;=\; \lim_{N\to\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\sum\limits_{k=1}^{N}\widehat{H}\cdot T_N} \;=$$

$$=\; \lim_{N\to\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}\cdot T_N\cdot N} \;=\; e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)} \;=\; \widehat{U}(t_B - t_A)\,. \tag{4.19}$$

Amplitudu přechodu systému lze pak počítat jako

$$W(\boldsymbol{x_B},\, t_B\,;\, \boldsymbol{x_A},\, t_A) \;=\; \langle \boldsymbol{x_B}|\, \widehat{U}(t_B - t_A)\, |\boldsymbol{x_A}\rangle \;=$$

$$=\; \langle \boldsymbol{x_B}| \prod_{k=1}^{N} \widehat{U}(T_N)\; |\boldsymbol{x_A}\rangle \;=\; \langle \boldsymbol{x_B}|\, \widehat{U}(T_N) \cdot \ldots \cdot \widehat{U}(T_N)\, |\boldsymbol{x_A}\rangle\,. \tag{4.20}$$

Do tohoto výrazu vložíme nejprve $N-1$ relací úplnosti pro stavy $|\boldsymbol{x}\rangle$, odpovídající kartézským souřadnicím $\boldsymbol{x}$:

$$\int\limits_{\mathbb{R}^n} |\boldsymbol{x}_k\rangle\, \langle \boldsymbol{x}_k|\, d\boldsymbol{x}_k \;=\; \widehat{I}\,, \tag{4.21}$$

pro $k \in \{1, \ldots, N-1\}$.

Označme ještě počáteční stav jako $|\boldsymbol{x_A}\rangle \equiv |\boldsymbol{x}_0\rangle$. Vložením těchto relací úplnosti do vztahu (4.20) pak dostáváme

$$(4.20) \;=\; \int\limits_{\mathbb{R}^n} \ldots \int\limits_{\mathbb{R}^n} \langle \boldsymbol{x_B}|\, \widehat{U}(T_N)\, |\boldsymbol{x}_{N-1}\rangle \cdot \ldots \cdot \langle \boldsymbol{x}_1|\, \widehat{U}(T_N)\, |\boldsymbol{x_A}\rangle\; d\boldsymbol{x}_{N-1} \ldots d\boldsymbol{x}_1 \;=$$

$$=\; \int\limits_{\mathbb{R}^n} \ldots \int\limits_{\mathbb{R}^n} \langle \boldsymbol{x_B}|\, \widehat{U}(T_N)\, |\boldsymbol{x}_{N-1}\rangle \cdot \prod_{k=1}^{N-1} \langle \boldsymbol{x}_k|\, \widehat{U}(T_N)\, |\boldsymbol{x}_{k-1}\rangle\; d\boldsymbol{x}_k\,. \tag{4.22}$$

Evoluční operátor si vyjádříme jako exponenciálu operátoru (4.16) hamiltoniánu. Potom bude

$$(4.22) \;=\; \int\limits_{\mathbb{R}^n} \ldots \int\limits_{\mathbb{R}^n} \langle \boldsymbol{x_B}|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\widehat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\widehat{\boldsymbol{x}})\right)\cdot T_N}\, |\boldsymbol{x}_{N-1}\rangle \;\times$$

$$\times \prod_{k=1}^{N-1} \langle \boldsymbol{x}_k|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\widehat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\widehat{\boldsymbol{x}})\right)\cdot T_N}\, |\boldsymbol{x}_{k-1}\rangle\; d\boldsymbol{x}_k\,. \tag{4.23}$$

Výraz dále upravíme pomocí tzv. Baker-Campbell-Hausdorffovy formule. Pokud dva operátory $\widehat{A}$ a $\widehat{B}$ komutují, tj. $[\widehat{A},\,\widehat{B}]=0$, pak pro ně platí $e^{\widehat{A}+\widehat{B}}=e^{\widehat{A}}\cdot e^{\widehat{B}}=e^{\widehat{B}}\cdot e^{\widehat{A}}$. Pro dva nekomutující operátory $\widehat{A}$ a $\widehat{B}$, kde $[\widehat{A},\,\widehat{B}]\neq 0$, které ale komutují se svým komutátorem, tzn.

$$\Big[\widehat{A},\,[\widehat{A},\,\widehat{B}]\Big] \;=\; 0\,, \qquad \Big[\widehat{B},\,[\widehat{A},\,\widehat{B}]\Big] \;=\; 0\,, \tag{4.24}$$

platí pro operátory $\widehat{A}$ a $\widehat{B}$ zjednodušená Baker-Campbell-Hausdorffova formule:

$$e^{\widehat{A}+\widehat{B}} \;=\; e^{\widehat{A}}\cdot e^{\widehat{B}}\cdot e^{-\frac{1}{2}[\widehat{A},\widehat{B}]} \;=\; e^{\widehat{B}}\cdot e^{\widehat{A}}\cdot e^{+\frac{1}{2}[\widehat{A},\widehat{B}]}\,. \tag{4.25}$$

Operátory polohy $\widehat{\boldsymbol{x}}$ i hybnosti $\widehat{\boldsymbol{p}}$ spolu nekomutují, ale komutují se svým komutátorem $[\widehat{\boldsymbol{x}},\,\widehat{\boldsymbol{p}}]=i\hbar\widehat{I}$. Jednotlivé dílčí amplitudy přechodu ve výrazu (4.23) lze pak upravit jako

$$\begin{aligned}
&\langle\boldsymbol{x}_k|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\widehat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\widehat{\boldsymbol{x}})\right)\cdot T_N}\,|\boldsymbol{x}_{k-1}\rangle \;= \\
&\quad=\;\langle\boldsymbol{x}_k|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\widehat{\boldsymbol{p}}^2\cdot T_N}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}V(\widehat{\boldsymbol{x}})\cdot T_N}\cdot e^{-\frac{1}{4\,m\,\hbar^2}\left[\widehat{\boldsymbol{p}}^2,\,V(\widehat{\boldsymbol{x}})\right]\cdot T_N^2}\,|\boldsymbol{x}_{k-1}\rangle\,.
\end{aligned}\tag{4.26}$$

V limitě velkého N je $T_{N}\xrightarrow{N\to\infty}0$. Komutátor v posledním členu, působící na nějaký obecný stav $|\boldsymbol{x}\rangle$ lze rozepsat jako

$$\begin{aligned}
\left[\widehat{\boldsymbol{p}}^2,\,V(\widehat{\boldsymbol{x}})\right]|\boldsymbol{x}\rangle \;&=\; -\,\hbar^2\Big(\big(\Delta V(\boldsymbol{x})\big)\,|\boldsymbol{x}\rangle+V(\boldsymbol{x})\Delta\,|\boldsymbol{x}\rangle-V(\boldsymbol{x})\Delta\,|\boldsymbol{x}\rangle\Big) \;= \\
&=\; -\,\hbar^2\,\big(\Delta V(\boldsymbol{x})\big)\,|\boldsymbol{x}\rangle\;,
\end{aligned}\tag{4.27}$$

kde Δ je Laplaceův operátor. Pokud je laplace $\Delta V(\boldsymbol{x})$ potenciálu V omezený, bude v limitě dostatečně velkého N platit

$$e^{-\frac{1}{4\,m\,\hbar^2}\,T_N^2\left[\widehat{\boldsymbol{p}}^2,\,V(\widehat{\boldsymbol{x}})\right]}\,|\boldsymbol{x}\rangle \;=\; e^{\frac{1}{4\,m}\,T_N^2\,\Delta V(\boldsymbol{x})}\,|\boldsymbol{x}\rangle \;\approx\; 1\,. \tag{4.28}$$

První dva členy ve výrazu (4.26) jsou úměrné exponenciále od T_{N}, zatímco poslední člen (4.28) je úměrný exponenciále od T_{N}^2. Zanedbáním členů úměrných exponenciálám druhých (resp. vyšším) mocnin T_{N} lze výraz (4.26) zjednodušit na

$$\langle\boldsymbol{x}_k|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\widehat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\widehat{\boldsymbol{x}})\right)\cdot T_N}\,|\boldsymbol{x}_{k-1}\rangle \;\approx\; \langle\boldsymbol{x}_k|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\widehat{\boldsymbol{p}}^2\cdot T_N}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}V(\widehat{\boldsymbol{x}})\cdot T_N}\,|\boldsymbol{x}_{k-1}\rangle\,, \tag{4.29}$$

kde lze jednotlivé členy tohoto výrazu již snadno upravit. Potenciál $\widehat{V}$ ve druhém členu výrazu (4.29) závisí pouze na operátorech polohy $\widehat{\boldsymbol{x}}$. Stavy $|\boldsymbol{x}_k\rangle$ jsou, pro $\forall k\in\{0,\,1,\ldots,\,N\}$, vlastními stavy operátoru polohy $\widehat{\boldsymbol{x}}$ s vlastními hodnotami $\boldsymbol{x}_k$, tj. $\widehat{\boldsymbol{x}}\,|\boldsymbol{x}_k\rangle=\boldsymbol{x}\,|\boldsymbol{x}_k\rangle$, aplikací čehož dostáváme

$$\begin{aligned}
&\langle\boldsymbol{x}_k|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\widehat{\boldsymbol{p}}^2\cdot T_N}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}V(\widehat{\boldsymbol{x}})\cdot T_N}\,|\boldsymbol{x}_{k-1}\rangle \;= \\
&\qquad\qquad=\;\langle\boldsymbol{x}_k|\;e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\widehat{\boldsymbol{p}}^2\cdot T_N}\,|\boldsymbol{x}_{k-1}\rangle\;e^{-\frac{i}{\hbar}V(\boldsymbol{x}_{k-1})\cdot T_N}\,.
\end{aligned}\tag{4.30}$$

První člen (maticový element) na pravé straně ve výrazu (4.30) výše, představuje amplitudu přechodu pro volnou částici, kterou jsme již spočítaly výše, viz. (4.14):

$$\langle\boldsymbol{x}_k|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\widehat{\boldsymbol{p}}^2\cdot T_N}\,|\boldsymbol{x}_{k-1}\rangle \;=\; \left(\frac{m}{i\,2\pi\hbar\,T_{N}}\right)^{\frac{n}{2}}\,e^{\frac{i}{\hbar}\,\frac{m}{2\,T_N}\,(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_{k-1})^2}\,. \tag{4.31}$$

Za předpokladu omezenosti $\Delta V(\boldsymbol{x})$, a v limitě dostatečně velkého N, pak celkově pro maticový element (4.26) platí

$$\langle \boldsymbol{x}_k |\, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\widehat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\widehat{\boldsymbol{x}})\right)\cdot T_N}\, |\boldsymbol{x}_{k-1}\rangle \;\approx\; \left(\frac{m}{i\,2\pi\hbar\, T_N}\right)^{\frac{n}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_{k-1})^2}{2\,T_N^2}-V(\boldsymbol{x}_{k-1})\right)\cdot T_N}\,. \tag{4.32}$$

Dosazením takto upravených maticových elementů do výrazu (4.23) dostáváme

$$(4.23) \;=\; \int\limits_{\mathbb{R}^n}\cdots\int\limits_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{m}{i\,2\pi\hbar\, T_N}\right)^{\frac{n}{2}N} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m(\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{B}}-\boldsymbol{x}_{N-1})^2}{2\,T_N^2}-V(\boldsymbol{x}_{N-1})\right)\cdot T_N} \times$$

$$\times \prod_{k=1}^{N-1} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_{k-1})^2}{2\,T_N^2}-V(\boldsymbol{x}_{k-1})\right)\cdot T_N} d\boldsymbol{x}_k \;=$$

$$= \int\limits_{\mathbb{R}^n}\cdots\int\limits_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{m}{i\,2\pi\hbar\, T_N}\right)^{\frac{n}{2}N} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m(\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{B}}-\boldsymbol{x}_{N})^2}{2\,T_N^2}-V(\boldsymbol{x}_{N})\right)\cdot T_N} \times$$

$$\times\; e^{\frac{i}{\hbar}\sum\limits_{k=1}^{N-1}\left(\frac{m(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_{k-1})^2}{2\,T_N^2}-V(\boldsymbol{x}_{k-1})\right)\cdot T_N} d\boldsymbol{x}_{N-1}\dots d\boldsymbol{x}_1 \;=$$

$$= \int\limits_{\mathbb{R}^n}\cdots\int\limits_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{m}{i\,2\pi\hbar\, T_N}\right)^{\frac{n}{2}N} e^{\frac{i}{\hbar}\sum\limits_{k=1}^{N} S_N(k)} d\boldsymbol{x}_{N-1}\dots d\boldsymbol{x}_1\,, \tag{4.33}$$

kde jsme označily $\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{x}_N$ a

$$S_N(k) \;\equiv\; \left(\frac{m(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_{k-1})^2}{2\,T_N^2} \;-\; V(\boldsymbol{x}_{k-1})\right) T_N\,. \tag{4.34}$$

Dosazením limitníhu vyjádření (4.19) evolučního operátoru do vztahu (4.20) pro amplitudu přechodu dostaneme

$$W(\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{B}}, t_B\,; \boldsymbol{x}_{\boldsymbol{A}}, t_A) \;=\; \langle \boldsymbol{x}_{\boldsymbol{B}}|\,\widehat{U}(t_B-t_A)\,|\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{A}}\rangle \;=$$

$$= \lim_{N\to\infty} \langle \boldsymbol{x}_{\boldsymbol{B}}| \prod_{k=1}^{N} \widehat{U}(T_N)\; |\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{A}}\rangle \;=$$

$$= \lim_{N\to\infty} \int\limits_{\mathbb{R}^n}\cdots\int\limits_{\mathbb{R}^n} \mathcal{N}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\sum\limits_{k=1}^{N} S_N(k)} d\boldsymbol{x}_{N-1}\dots d\boldsymbol{x}_1\,, \tag{4.35}$$

kde jsme označily $\mathcal{N} = \mathcal{N}(N) \equiv \left(\frac{m}{i\,2\pi\hbar T_N}\right)^{\frac{n}{2}N}$.

Klasický lagrangián odpovídající operátoru hamiltoniánu (4.16) má tvar

$$L(\boldsymbol{y},\,\dot{\boldsymbol{y}}) \;=\; \frac{m}{2}\,\dot{\boldsymbol{y}}^{\,2} \;-\; V(\boldsymbol{y})\,, \tag{4.36}$$

kde $\boldsymbol{y} : [t_A,\, t_B] \to \mathbb{R}^n$, jsou libovolné, ne nutně fyzikální, klasické C^2 trajektorie. Uvažujme dělení (4.17) časového intervalu $(t_A,\, t_B)$. Platí pak $\sum_{k=1}^{N} T_N = t_B - t_A$. Označme $t_0 = t_A$, $t_N = t_B$ a definujme

$$t_k \;\equiv\; t_{\boldsymbol{A}} + \sum_{j=1}^{k} T_N\,. \tag{4.37}$$

Ze všech možných klasických C^2 trajektorií $\boldsymbol{y}$ vyberme nyní všechny takové trajektorie $\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t)$, pro které platí $\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t_A) = \boldsymbol{x}_{\boldsymbol{A}}$ a $\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t_B) = \boldsymbol{x}_{\boldsymbol{B}}$. Zdůrazněme, že trajektorie $\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t)$ sice spojují náš počáteční a koncový bod, ale jinak jsou zcela obecné, tedy i nefyzikální. Tyto trajektorie $\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t)$ nyní pro libovolné $N \in \mathbb{N}$ a $\forall t \in [t_A,\, t_B]$ aproximujeme po částech konstantními funkcemi $\boldsymbol{y}_N(t)$, kde

$$\boldsymbol{y}_N(t) \;=\; \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t_k) \;\equiv\; \boldsymbol{y}_k\,, \qquad t \in [t_k,\, t_{k+1})\,, \quad k \in \{0, \ldots, N-1\}\,. \tag{4.38}$$

Původní trajektorie $\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t)$ lze pak pro $\forall t \in [t_A,\, t_B]$ aproximovat jako

$$\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t) \;=\; \lim_{N\to\infty} \boldsymbol{y}_N(t)\,. \tag{4.39}$$

Volme libovolné $t \in [t_A,\, t_B)$. Pak bude $t \in [t_k,\, t_{k+1})$ pro nějaké $k \in \{0, \ldots, N-1\}$. Je-li časový úsek T_N dostatečně malý, tj. N je dostatečně velké, lze potom přibližně psát

$$L\big(\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t),\, \dot{\boldsymbol{y}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big) \;\approx\; \frac{m}{2}\,\frac{(\boldsymbol{y}_{k+1} - \boldsymbol{y}_k)^2}{\big(t_{k+1} - t_k\big)^2} - V(\boldsymbol{y}_k) \;=\; \frac{m}{2}\,\frac{(\boldsymbol{y}_{k+1} - \boldsymbol{y}_k)^2}{T_N^2} - V(\boldsymbol{y}_k)\,, \tag{4.40}$$

Tímto způsoben dostaneme z lagrangiánu (4.36) diskretizovaný lagrangián

$$L_N\big(\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t),\, \dot{\boldsymbol{y}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big) \;\equiv\; \begin{cases} \frac{m}{2T_N^2}\,(\boldsymbol{y}_1 - \boldsymbol{x}_{\boldsymbol{A}})^2 \;-\; V(\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{A}}), & \text{pro}\;\; \forall t \in [t_A,\, t_1), \\ \qquad\vdots & \\ \frac{m}{2T_N^2}\,(\boldsymbol{y}_{k+1} - \boldsymbol{y}_k)^2 \;-\; V(\boldsymbol{y}_k), & \text{pro}\;\; \forall t \in [t_k,\, t_{k+1}), \\ \qquad\vdots & \\ \frac{m}{2T_N^2}\,(\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{B}} - \boldsymbol{y}_{N-1})^2 \;-\; V(\boldsymbol{y}_{N-1}), & \text{pro}\;\; \forall t \in [t_{N-1},\, t_B). \end{cases} \tag{4.41}$$

Původní (spojitý) lagrangián (4.36) na trajektoriích $\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t)$ je pak limitou diskretizovaného lagrangiánu:

$$L\big(\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t),\, \dot{\boldsymbol{y}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big) \;=\; \lim_{N\to\infty} L_N\big(\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t),\, \dot{\boldsymbol{y}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big)\,. \tag{4.42}$$

Diskretizovaný lagrangián (4.41) má na každém z N intervalů $[t_k,\, t_{k+1})$ konstantní hodnotu. Je tedy $L_N\big(\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{AB}}(t),\, \dot{\boldsymbol{y}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big) = \text{konst.}$ pro $\forall t \in (t_k,\, t_{k+1})$. Dosadíme-li pak lagrangián (4.42) do definičního vztahu pro akční funkcionál, dostaneme

$$
\begin{aligned}
\mathcal{S}(\boldsymbol{y_{AB}}) &= \int_{t_A}^{t_B} L\big(\boldsymbol{y_{AB}}(t),\, \dot{\boldsymbol{y}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big)\, dt \;= \\
&= \lim_{N\to\infty} \int_{t_A}^{t_B} L_N\big(\boldsymbol{y_{AB}}(t),\, \dot{\boldsymbol{y}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big)\, dt \;= \\
&= \lim_{N\to\infty} \sum_{k=0}^{N} \int_{t_k}^{t_{k+1}} L_N\big(\boldsymbol{y_{AB}}(t),\, \dot{\boldsymbol{y}}_{\boldsymbol{AB}}(t)\big)\, dt \;= \\
&= \lim_{N\to\infty} \sum_{k=0}^{N} \left(\frac{m}{2}\, \frac{(\boldsymbol{y}_{k+1} - \boldsymbol{y}_k)^2}{T_{\scriptscriptstyle N}^2} \;-\; V(\boldsymbol{y}_k) \right) \cdot T_{\scriptscriptstyle N}\,.
\end{aligned}
\tag{4.43}
$$

Vzhledem k tomu, že v integrálu (4.33) integrujeme v každé z proměnných $\boldsymbol{x}_k$, pro $\forall k \in \{1, \ldots, N-1\}$, přes celé $\mathbb{R}^n$, lze výraz (4.34) chápat jako k-tý člen diskretní aproximace klasické akce $\mathcal{S}(\boldsymbol{y_{AB}})$, vyčíslené na nějaké C^2 trajektorii $\boldsymbol{y_{AB}}(t)$ aproximované vhodnou, po částech konstantní funkcí $\boldsymbol{y}_N(t)$, viz. (4.39). Je tedy

$$
\mathcal{S}(\boldsymbol{y_{AB}}) \;=\; \lim_{N\to\infty} \sum_{k=0}^{N} S_N(k)\,. \tag{4.44}
$$

Vraťme se nyní zpět k amplitudě přechodu. Ve výrazu (4.35) je problematický především multiplikativní faktor $\mathcal{N}$, který diverguje pro $N \to \infty$. Limitu $\lim\limits_{N\to\infty}$, divergující multiplikativní faktor $\mathcal{N}$ a míru $d\boldsymbol{x}_{\scriptscriptstyle N-1} \ldots d\boldsymbol{x}_1$ pak formálně přepíšeme pomocí tzv. *Wienerovy míry* $\mathcal{D}$ do tvaru tzv. *Feynmanova integrálu*

$$
W(\boldsymbol{x_B},\, t_{\scriptscriptstyle B}\,;\, \boldsymbol{x_A},\, t_{\scriptscriptstyle A}) \;=\; \int e^{\frac{i}{\hbar}\,\mathcal{S}(\boldsymbol{y_{AB}})}\; \mathcal{D}(\boldsymbol{y_{AB}})\,, \tag{4.45}
$$

kde Wienerovou mírou $\mathcal{D}$ integrujeme exponenciálu akčního funkcionálu $\mathcal{S}$ přes všechny, ne nutně fyzikální trajektorie $\boldsymbol{y_{AB}}(t)$, které spojují počáteční bod $\boldsymbol{x_A}$ s koncovým bodem $\boldsymbol{x_B}$. Přesněji řečeno, integrujeme přes všechny C^2 trajektorie $\boldsymbol{y_{AB}} : [t_{\scriptscriptstyle A},\, t_{\scriptscriptstyle B}] \to \mathbb{R}^n$, pro které je $\boldsymbol{y_{AB}}(t_{\scriptscriptstyle A}) = \boldsymbol{x_A}$ a $\boldsymbol{y_{AB}}(t_{\scriptscriptstyle B}) = \boldsymbol{x_B}$.

Amplituda přechodu W je vztahem (4.5) dobře definovaná. Dobře definovaná je také akce $\mathcal{S}$ a její komplexní exponenciála. Zbývá tedy zodpovědět, co přesně znamená Wienerova míra $\mathcal{D}$. Podrobný rozbor Wienerovy míry spolu s postupy jak správně pracovat s integrály přes Wienerovu míru lze nalézt v textu [12] *Vybrané partie z teorie kvantových polí*, od Jiřího Novotného. Zde v této práci se Wienerovou mírou podrobněji zabývat nebudeme.

Z Hamiltonova variačního principu (2.13) víme, že akční funkcionál $\mathcal{S}$ nabývá extrému na fyzikálních trajektoriích. Pro jednoduchost předpokládejme, že je taková fyzikální trajektorie $\boldsymbol{x_{AB}}(t)$, spojující zadaný počáteční a koncový bod pouze jedna. Je-li pro daný systém takových fyzikálních trajektorií více, potom bychom Feynmanův integrál (4.45) uvažovaly pouze na okolí jedné takové fyzikální trajektorie. Z extremality akce na fyzikálních trajektoriích platí $\delta\,\mathcal{S}(\boldsymbol{x_{AB}}) = 0$. Funkcionální integrál (4.45) dále upravíme tak, že rozvineme akční funkcionál $\mathcal{S}$ okolo fyzikální trajektorie $\boldsymbol{x_{AB}}$. Za tímto účelem si definujeme reálnou funkci jedné proměnné $F(\alpha) \equiv \mathcal{S}(\boldsymbol{x_{AB}} + \alpha\,\boldsymbol{h})$, kde je $\alpha \in \mathbb{R}$ a $\boldsymbol{h}(t)$ je trajektorie splňující $\boldsymbol{h}(t_A) = \boldsymbol{h}(t_B) = 0$. Označme $\boldsymbol{y_{AB}} = \boldsymbol{x_{AB}} + \alpha\,\boldsymbol{h}$. Trajektorie $\boldsymbol{y_{AB}}(t)$ pak budou zjevně splňovat podmínky $\boldsymbol{y_{AB}}(t_A) = \boldsymbol{x_{AB}}(t_A) + \alpha\,\boldsymbol{h}(t_A) = \boldsymbol{x_A}$ a $\boldsymbol{y_{AB}}(t_B) = \boldsymbol{x_{AB}}(t_B) + \alpha\,\boldsymbol{h}(t_B) = \boldsymbol{x_B}$, a odpovídají tedy trajektoriím, přes které integrujeme ve Feynmanově integrálu (4.45). Předpokládejme, že je funkcionál $\mathcal{S}$ dostatečně hladký, abychom mohli funkci $F(\alpha)$ rozvinout do Taylorovy řady o středu 0. Rozvoj funkcionálu $\mathcal{S}$ prostřednictvím funkce $F(\alpha)$ pak bude mít tvar

$$
\begin{aligned}
\mathcal{S}(\boldsymbol{y_{AB}}) \;&=\; \mathcal{S}(\boldsymbol{x_{AB}} + \alpha\,\boldsymbol{h}) \;=\; F(\alpha) \;= \\
&= F(0) + \alpha\,\frac{dF(\alpha)}{d\alpha}\bigg|_{\alpha=0} + \frac{\alpha^2}{2!}\,\frac{d^2F(\alpha)}{d\alpha^2}\bigg|_{\alpha=0} + \ldots = \\
&= \mathcal{S}(\boldsymbol{x_{AB}}) + \alpha\,\frac{d\,\mathcal{S}(\boldsymbol{x_{AB}} + \alpha\,\boldsymbol{h})}{d\alpha}\bigg|_{\alpha=0} + \frac{\alpha^2}{2!}\,\frac{d^2\,\mathcal{S}(\boldsymbol{x_{AB}} + \alpha\,\boldsymbol{h})}{d\alpha^2}\bigg|_{\alpha=0} + \ldots = \\
&= \mathcal{S}(\boldsymbol{x_{AB}}) + \alpha\,[\delta\,\mathcal{S}(\boldsymbol{x_{AB}})](\boldsymbol{h}) + \frac{\alpha^2}{2!}\,[\delta^2\,\mathcal{S}(\boldsymbol{x_{AB}})](\boldsymbol{h}) + \ldots = \\
&= S(t_A, \boldsymbol{x_A}, t_B, \boldsymbol{x_B}) + \frac{\alpha^2}{2!}\,[\delta^2\,\mathcal{S}(\boldsymbol{x_{AB}})](\boldsymbol{h}) + \ldots\,,
\end{aligned}
\tag{4.46}
$$

kde jsme jednak využily toho, že variace akce je na fyzikální trajektorii nulová (pro všechny směry), a toho, že Hamiltonova funkce je rovna akci na konkrétní fyzikální trajektorii, viz. (3.4). Trajektorie $\boldsymbol{x_{AB}}$ je z hlediska funkcionálního integrálu (4.45) konstantní (neintegruje se přes ni). Potom, označíme-li $\widetilde{\mathcal{D}}(\boldsymbol{h}) = \mathcal{D}(\boldsymbol{x_{AB}} + \alpha\,\boldsymbol{h})$, můžeme integrál (4.45) přepsat do tvaru

$$
\begin{aligned}
W(\boldsymbol{x_B}, t_B\,; \boldsymbol{x_A}, t_A) \;&= \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}\,S(t_A, \boldsymbol{x_A}, t_B, \boldsymbol{x_B})} \int e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\alpha^2}{2!}\,[\delta^2\,\mathcal{S}(\boldsymbol{x_{AB}})](\boldsymbol{h}) + \ldots\right)}\, \widetilde{\mathcal{D}}(\boldsymbol{h})\,,
\end{aligned}
\tag{4.47}
$$

kde tentokrát Wienerovou mírou $\widetilde{\mathcal{D}}$ integrujeme přes všechny C^2 trajektorie $\boldsymbol{h} : [t_A, t_B] \to \mathbb{R}^n$, které splňují $\boldsymbol{h}(t_A) = \boldsymbol{h}(t_B) = 0$.

Integrand integrálu je tvořen komplexní exponenciálou, která pro malé $\hbar$ rychle osciluje. K dopočítání integrálu (4.47) bychom museli jednak znát vlastnosti a interpretaci Wienerovy míry, a také by bylo vhodné rozvinout funkcionál $\mathcal{S}$ do funkcionální Taylorovy řady. Vlastnosti a interpretaci Wienerovy míry lze opět nalézt v textu [12], který se problematikou přímo zabývá a podrobnosti ohledně rozvojů funkcionálů lze nalézt např. ve třetím dodatku v knize [13].

Z výrazu (4.47), aniž bychom dopočítávaly přítomný integrál, opět vidíme, že je amplituda přechodu, i pro obecnější hamiltoniány úměrná Hamiltonově funkci:

$$W(\boldsymbol{x_B},\, t_B\,;\, \boldsymbol{x_A},\, t_A) \;\propto\; e^{\frac{i}{\hbar}\, S(t_A, \boldsymbol{x_A}, t_B, \boldsymbol{x_B})}\,. \tag{4.48}$$

Podobně jako v případě Hamiltonovy funkce, kterou můžeme vypočítat jednak přímo z definice, tak také řešením Hamiltonových-Jacobiho rovnic, je amplituda přechodu též řešením Schödingerových rovnic. Ukážeme nyní, že amplituda přechodu $W(\boldsymbol{x_B},\, t_B;\, \boldsymbol{x_A},\, t_A)$ definovaná jako (4.1), s obecným, časově nezávislým operátorem hamiltoniánu $\widehat{H} = \widehat{H}(\widehat{\boldsymbol{p}},\, \widehat{\boldsymbol{x}})$, skutečně splňuje Schödingerovu rovnici v počáteční i koncovém sadě proměnných (tj. v počátečních a koncových stavech, resp. polohách, a časech). Pro koncovou sadu t_B a $\boldsymbol{x_B}$ dostáváme

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t_B}\, W(\boldsymbol{x_B},\, t_B;\, \boldsymbol{x_A},\, t_A) \;=\; i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t_B}\, \langle \boldsymbol{x_B}|\; e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)}\, |\boldsymbol{x_A}\rangle\;. \tag{4.49}$$

Protože jsou počáteční a koncové stavy nezávislé na čase, lze derivaci podle času aplikovat přímo na exponenciálu operátoru hamiltoniánu:

$$\begin{aligned}(4.49) \;&=\; \langle \boldsymbol{x_B}|\; i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t_B}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)}\, |\boldsymbol{x_A}\rangle \;= \\ &=\; \langle \boldsymbol{x_B}|\; \widehat{H}(\widehat{\boldsymbol{p}},\, \widehat{\boldsymbol{x}})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)}\, |\boldsymbol{x_A}\rangle \;= \\ &=\; \widehat{H}\big(i\hbar\,\nabla_{\boldsymbol{x_B}},\, \boldsymbol{x_B}\big)\; \langle \boldsymbol{x_B}|\; e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)}\, |\boldsymbol{x_A}\rangle\;,\end{aligned} \tag{4.50}$$

kde jsme v posledním kroku užili vztahů $\langle \boldsymbol{x_B}|\, \widehat{\boldsymbol{x}} = \langle \boldsymbol{x_B}|\, \boldsymbol{x_B} = \boldsymbol{x_B}\, \langle \boldsymbol{x_B}|$ pro vlastní hodnoty polohy, a vyjádření operátoru hybnosti v souřadnicové reprezentaci

$$\langle \boldsymbol{x_B}|\, \widehat{\boldsymbol{p}} \;=\; \big(\widehat{\boldsymbol{p}}\, |\boldsymbol{x_B}\rangle\big)^{\dagger} \;=\; \big(-i\hbar\,\nabla_{\boldsymbol{x_B}}\, |\boldsymbol{x_B}\rangle\big)^{\dagger} \;=\; +i\hbar\,\nabla_{\boldsymbol{x_B}}\, \langle \boldsymbol{x}_B|\;. \tag{4.51}$$

Pro počáteční sadu proměnných t_A a $\boldsymbol{x_A}$ provedeme podobný výpočet:

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t_A}\, \langle \boldsymbol{x_B}|\; e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)}\, |\boldsymbol{x_A}\rangle \;&=\; \langle \boldsymbol{x_B}|\; i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t_A}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)}\, |\boldsymbol{x_A}\rangle \;= \\ &=\; \langle \boldsymbol{x_B}|-\; \widehat{H}(\widehat{\boldsymbol{p}},\, \widehat{\boldsymbol{x}})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)}\, |\boldsymbol{x_A}\rangle \;= \\ &=\; -\; \langle \boldsymbol{x_B}|\; e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)}\, \widehat{H}(\widehat{\boldsymbol{p}},\, \widehat{\boldsymbol{x}})\; |\boldsymbol{x_A}\rangle \;= \\ &=\; -\; \langle \boldsymbol{x_B}|\; e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)}\, \widehat{H}\big(-i\hbar\,\nabla_{\boldsymbol{x_A}},\, \boldsymbol{x_A}\big)\; |\boldsymbol{x_A}\rangle \;= \\ &=\; -\,\widehat{H}\big(-i\hbar\,\nabla_{\boldsymbol{x_A}},\, \boldsymbol{x_A}\big)\; \langle \boldsymbol{x_B}|\; e^{-\frac{i}{\hbar}\,\widehat{H}\cdot(t_B - t_A)}\, |\boldsymbol{x_A}\rangle\;.\end{aligned} \tag{4.52}$$

Celkem pak pro amplitudu přechodu dostáváme následující dvě Schrödingerovy rovnice, v počáteční a koncové sadě proměnných:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_B} W(\boldsymbol{x_B}, t_B; \boldsymbol{x_A}, t_A) &= \widehat{H}\big(i\hbar \nabla_{\boldsymbol{x_B}}, \boldsymbol{x_B}\big)\, W(\boldsymbol{x_B}, t_B; \boldsymbol{x_A}, t_A)\,, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_A} W(\boldsymbol{x_B}, t_B; \boldsymbol{x_A}, t_A) &= -\,\widehat{H}\big(-i\hbar \nabla_{\boldsymbol{x_A}}, \boldsymbol{x_A}\big)\, W(\boldsymbol{x_B}, t_B; \boldsymbol{x_A}, t_A)\,. \end{aligned} \tag{4.53}$$

Na závěr ještě ověříme, že amplituda přechodu (4.14) pro volnou částici, kterou jsme zde explicitně spočítali, splňuje výše uvedené Schrödingerovy rovnice. Pro jednoduchost vyšetříme pouze jednodimenzionální případ volné částice. Pro koncovou sadu proměnných má pak levá strana příslušné Schrödingerovy rovnice (4.53) pro amplitudu přechodu W volné částice tvar

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_B} W &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t_B} \left(\sqrt{\frac{m}{i\,2\pi\hbar\,(t_B - t_A)}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\,(x_B - x_A)^2}{2(t_B - t_A)}} \right) = \\ &= \frac{-i\hbar W}{2(t_B - t_A)} + \frac{m\,(x_B - x_A)^2}{2(t_B - t_A)^2}\, W\,, \end{aligned} \tag{4.54}$$

a pravá strana Schrödingerovy rovnice bude

$$\begin{aligned} \widehat{H}\big(i\hbar \nabla_{x_B}, x_B\big)\, W &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_B^2} \left(\sqrt{\frac{m}{i\,2\pi\hbar\,(t_B - t_A)}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\,(x_B - x_A)^2}{2(t_B - t_A)}} \right) = \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x_B} \left(\frac{im}{\hbar} \frac{(x_B - x_A)}{(t_B - t_A)}\, W \right) = \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{im}{\hbar} \frac{W}{(t_B - t_A)} - \frac{m^2}{\hbar^2} \frac{(x_B - x_A)^2}{(t_B - t_A)^2}\, W \right) = \\ &= -\,\frac{i\hbar}{2} \frac{W}{(t_B - t_A)} + \frac{m}{2} \frac{(x_B - x_A)^2}{(t_B - t_A)^2}\, W\,. \end{aligned} \tag{4.55}$$

Vypočtené levé a pravé strany Schrödingerovy rovnice pro volnou částici jsou stejné. Amplituda přechodu volné částice tedy splňuje Schrödingerovu rovnici v koncové sadě proměnných. Analogickým postupem lze též ověřit, že amplituda přechodu volné částice rovněž splňuje Schrödingerovu rovnici v počáteční sadě proměnných.

Závěr

Shrňme nyní stručně základní poznatky, ke kterým jsme dospěly. V kapitole 3 jsme zavedly Hamiltonovu funkci jako funkci počátečního bodu (polohy a času) a koncového bodu mající hodnotu akce na konkrétní fyzikální trajektorii, určené tímto počátečním a koncovým bodem. Na rozdíl od samotné akce, která je pro konkrétní trajektorii vždy definovaná, Hamiltonova funkce již není dobře definovaná pro takové okrajové body, mezi kterými lze vést více fyzikálních trajektorií. V takových případech je pak nutné kromě počátečního a koncového bodu vybrat také konkrétní fyzikální trajektorii vedoucí mezi těmito body, a namísto Hamiltonovy funkce se pokusit pracovat s akčním funkcionálem vyčísleným podél této zvolené trajektorie.

V sekci (3.1) jsme derivacemi podle každé z proměnných Hamiltonovy funkce odvodily několik jejích základních vlastností. Každá z těchto derivací přitom vede na důvěrně známé veličiny charakterizující dynamiku systému. Derivace Hamiltonovy funkce podle počáteční polohy je rovna záporně vzaté počáteční hybnosti systému a derivace podle koncové polohy odpovídá koncové hybnosti systému. Známe-li Hamiltonovu funkci nějakého systému, lze pak snadno spočítat počáteční hybnost, a inverzí této počáteční hybnosti pak získat koncovou polohu jako funkci koncového času a počátečních podmínek, tzn. počátečního času, polohy a hybnosti. Dosazením takto vyjádřené koncové polohy do koncové hybnosti, lze pak též získat koncovou hybnost jako funkci koncového času a počátečních podmínek. Dále má derivace Hamiltonovy funkce podle počátečního času význam celkové energie systému na počátku a derivace podle koncového času zase odpovídá záporně vzaté celkové energii systému na konci. V závěru sekce (3.1) jsme pak tyto vlastnosti Hamiltonovy funkce využily k sestavení dvou Hamiltonových-Jacobiho rovnic, z nichž jedna se vztahuje k počátečnímu bodu, a druhá ke koncovému bodu. Zjistili jsme, že Hamiltonova funkce musí obě tyto rovnice řešit. Naopak řešením každé jedné z těchto dvou rovnic již není celá Hamiltonova funkce, ale nějaké dvě generující funkce. Nezáleží přitom jakému ze 4 typů generujících funkcí odpovídají nalezená řešení obou z Hamiltonových-Jacobiho rovnic. Na konci sekce (3.1) jsme pak předvedly jak najít Hamiltonovu funkci z řešení Hamiltonových-Jacobiho rovnic, přičemž jsme dospěli k závěru, že součet řešení obou Hamiltonových-Jacobiho rovnic bude mít stejné vlastnosti jako Hamiltonova funkce.

V příkladech kapitoly 3 jsme spočetly Hamiltonovy funkce pro volnou částici a harmonický oscilátor. Na těchto dvou příkladech jsme dále ověřily základní vlastnosti Hamiltonovy funkce. Na volné částici jsme ilustrovali postup při hledání Hamiltonovy funkce řešením Hamiltonových-Jacobiho rovnic. Ve 3. příkladu systému s centrální silou nemůžeme explicitně spočítat Hamiltonovu funkci z definice. Pokusili jsme se ji tedy nalézt řešením obou Hamiltonových-Jacobiho rovnic, avšak Hamiltonovu funkci, vyjádřenou ve správných proměnných se nám explicitně spočítat nepodařilo. Problém spočívá v tom, že pro dva libovolně volené počáteční a koncové body může existovat více fyzikálních trajektorií spojující tyto body, což se pak konkrétně projevilo na složitosti rovnic pro konstanty vystupující v řešeních obou Hamiltonyvých-Jacobiho rovnic.

V kapitole 4 jsme se zabývali souvislostmi mezi amplitudou přechodu a Hamiltonovou funkcí. Amplitudu přechodu jsme definovaly jako maticový element evolučního operátoru mezi počátečním a koncovým stavem. Pro volnou částici nám explicitně vyšlo, že je amplituda přechodu přímo úměrná komplexní exponenciále Hamiltonovy funkce. Pro obecnější systémy než je volná částice jsme využily grupových vlastností evolučního operátoru, což nás přivedlo v Feynmanovu integrálu. Integrandem přitom byla exponenciála akčního funkcionálu. Rozvojem akčního funkcionálu pomocí speciálně definované reálné funkce do Taylorovy řady jsme pak ještě byly schopni Feynmanův integrál upravit do podoby, ze které je vidět, že i pro obecnější systémy je amplituda přechodu úměrná komplexní exponenciále Hamiltonova funkce. Při výpočtu jsme narazili na Wienerovu míru. Studium vlastností Wienerovy míry jde již za rámec této práce. Funkcionální integrál, kterým je exponenciála Hamiltonovy funkce přenásobena jsme tedy už dále neupravovaly. V závěru kapitoly 4 jsme ještě ukázali, že amplituda přechodu řeší dvojici Schrödingerových rovnic formulovaných v proměnných počátečního a koncového bodu.

Celkově můžeme pozorovat zajímavé souvislosti mezi Hamiltonovou funkcí a amplitudou přechodu. Jak Hamiltonova funkce tak amplituda přechodu jsou funkcemi počátečních a koncových poloh a časů. Hamiltonova funkce řeší Hamiltonovu-Jacobiho rovnici, zatímco amplituda přechodu řeší Schrödingerovu rovnici. Derivace Hamiltonovy funkce podle poloh má význam hybnosti, a její derivace podle času má význam energie. Podobně se v kvantové mechanice zavádí operátor hybnosti, který má v souřadnicové reprezentaci tvar derivace podle polohy a operátor energie, který se zavádí jako derivace podle času. Historicky byla pak Schrödingerova rovnice nalezena zobecněním Hamiltonovy-Jacobiho rovnice, a naopak v eikonálové aproximaci a limitě malého $\hbar$ lze ze Schrödingerovy rovnice odvodit rovnici Hamiltonovu-Jacobiho. Na závěr tedy můžeme konstatovat, že mezi Hamiltonovou funkcí a amplitudou přechodu existuje zajímavý vztah, propojující klasickou a kvantovou mechaniku.

Seznam použité literatury

[1] ROVELLI Carlo, VIDOTTO Francesca, 2015. *Covariant Quantum Loop Gravity. An elementary introduction to Quantum Gravity and Spinfoam Theory* [online]. Cambridge University Press 2015. ISBN 978-1-856-04485-1. [cit. 19.5.2016]. Dostupné v pdf na adrese: http://www.cpt.univ-mrs.fr/ rovelli/IntroductionLQG.pdf

[2] LAHIRI Amitabha, 2011. *Lecture Notes on Differential Geometry for Physicists 2011* [online]. [cit. 19.5.2016]. Dostupné v pdf na adrese: http://www.bose.res.in/ amitabha/lecnotes.html

[3] KLAZAR Martin, 2005. Učební text k Matematické analýze III [online]. [cit. 14.12.2015]. Dostupné na adrese: http://kam.mff.cuni.cz/ klazar/text2MAIII.pdf

[4] PODOLSKÝ Jiří, 2006. *Teoretická mechanika v jazyce diferenciální geometrie* [online]. Studijní text k prosemináři TMF069 "Proseminář teoretické fyziky I". [cit. 19.5.2016]. Dostupné v pdf na adrese: http://utf.mff.cuni.cz/vyuka/TMF069/tmf069.pdf

[5] SOUČEK Vladimír, 1998. *9 Variační počet* [online]. Pages 1-13. [cit. 19.5.2016]. Dostupné v ps na adrese: http://www.karlin.mff.cuni.cz/ soucek/ . Path: Texty přednášek: Přednáška třetí semestr, Mat. analýza pro fyziky.

[6] GOLDSTEIN Herbert, POOLE P. Charles, SAFKO L. John. *Classical mechanics.* 3rd edition. Addison-Wesley 2000. ISBN-13: 978-0201657029 / ISBN-10: 0201657023.

[7] JOSE V. Jorge, SALETAN J. Eugene. *Classical Dynamics: A Contemporary Approach.* Cambridge University Press 1998. ISBN 0521631769.

[8] TILLICH Josef, RICHTEREK Lukáš, 2008. *Klasická mechanika* [online]. Katedra experimentální fyziky Přírodovědecké fakulty UP Olomouc [cit. 14.12.2015]. Dostupné na adrese: http://muj.optol.cz/richterek/lib/exe/fetch.php?media=mechanika:mechanika.pdf

[9] KRUPKOVÁ Olga, SWACZYNA Martin, 2006. *Variační Počet* [online]. Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ostrava 2006 [cit. 14.12.2015]. Dostupné na adrese: http://www1.osu.cz/ rossi/UcebTextVarPoc(final)(barev).pdf

[10] DIRAC Paul A. M. *The Principles of Quantum Mechanics.* 4th edition. Pages 84-98. Oxford University Press 1958. ISBN 0201657023.

[11] RISEBOROUGH Peter S., 2013. *Quantum Mechanics I* [online]. Pages 112-118. [cit. 19.5.2016]. Dostupné v pdf na adrese: https://math.temple.edu/ prisebor/qm1.pdf

[12] NOVOTNÝ Jiří, 1999. *Vybrané partie z teorie kvantových polí* [online]. Pages 9-16. [cit. 19.5.2016]. Dostupné v pdf na adrese: http://www-ucjf.troja.mff.cuni.cz/new/wp-content/uploads/2014/02/text23.pdf

[13] FREDRICKSON Glenn. *The Equilibrium Theory of Inhomogeneous Polymers.* Oxford University Press 2005. ISBN 10: 0198567294 / ISBN 13: 9780198567295. Kapitola *APPENDIX C CALCULUS OF FUNCTIONALS* je dostupná online na adrese: http://users.auth.gr/tgaitano/TheoNucPhys/ghf_monog_appx_C.pdf , [cit. 20.5.2016].