Kvaterniony

Připomeňme, že kvaterniony jsou čtyřdimenzionální algebra (tedy vektorový prostor s distributivním násobením vektorů) $\mathbb{K}$ nad reálnými čísly generovaná prvky $\{1, \ell, j, k\}$, které splňují

$$\ell^2 = j^2 = k^2 = \ell jk = -1.$$

První z generátorů bývá označován i, ale abychom se vyhnuli zmatkům způsobeným identifikací s komplexní jednotkou, budeme používat ℓ. Vynásobením rovnosti $\ell jk = -1$ z obou stran prvkem k dostaneme $k\ell j = -1$. Podobně $jk\ell = -1$. Imaginární generátory jsou tedy cyklicky záměnné. Vynásobením jen jedním k také dostaneme $\ell j = k$, a symetricky $jk = \ell$ a $k\ell = j$. Z $\ell j = k$ dále dostaneme vynásobením ℓ zleva rovnost $j = -\ell k$ a podobně $k = -j\ell$ a $kj = -\ell$. Generátory jsou tedy antikomutativní. Každý kvaternion však zjevně komutuje s reálným číslem (které je samo kvaternionem).

Pro $q = a + b\ell + cj + dk$ definujeme *sdružený prvek* $q^* = a - b\ell - cj - dk$.

Normu q definujeme jako $N(q) := qq^* = a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = |q|^2$, kde $|q|$ je eukleidovská norma v $\mathbb{R}^4$. Sféra $\mathbb{S}^3$ je tedy přirozeně identifikována s jednotkovými kvaterniony $\mathbb{K}_1$ (tj. kvaterniony normy jedna).

Platí $(pq)^* = q^*p^*$. Z toho plyne $N(pq) = N(p)N(q)$, a jednotkové kvaterniony (kvaterniony s normou jedna) tvoří multiplikativní grupu. Inverzní prvek kvaternionu q má tedy tvar $q^{-1} = q^*/N(q)$, neboli $q^{-1} = q^*$ pro jednotkové kvaterniony.

Kvaterniony tvaru $b\ell + cj + dk$ se nazývají *imaginární*. Jednotkové imaginární kvaterniony lze identifikovat se sférou $\mathbb{S}^2$ a platí pro ně $p^2 = -1$ (jako pro generátory), neboť $p^{-1} = -p$.

Nyní ukážeme nejdůležitější vlastnost kvaternionů. Konjugace imaginárního kvaternionu libovolným kvaternionem odpovídá rotaci trojrozměrného prostoru.

Věta. Pro $0 \neq q = (r + x\ell + yj + zk) \in \mathbb{K}$, je zobrazení

$$\begin{aligned} \rho_q : \mathbb{R}^3 &\to \mathbb{R}^3 \\ (b, c, d) &\mapsto (b', c', d') \end{aligned}$$

určené vztahem

$$b'\ell + c'j + d'k = q(b\ell + cj + dk)q^{-1}$$

rotace kolem osy procházející bodem (x, y, z) o úhel

$$\omega = 2 \arccos \frac{r}{\sqrt{N(q)}}\,.$$

Důkaz. Protože $qpq^{-1} = (tq)p(tq)^{-1}$ pro libovolné reálné t, můžeme bez újmy na obecnosti předpokládat, že q je jednotkový a $qpq^{-1} = qpq^*$.

Konjugace je automorfismus $\mathbb{K}$. Navíc je identitou na reálných číslech, protože reálné číslo s libovolným kvaternionem komutuje. Dále platí

$$N(qpq^{-1}) = N(q)N(p)N(q^{-1}) = N(p).$$

Konjugaci tedy můžeme chápat jako ortonormální zobrazení $\mathbb{R}^4$, které zachovává první souřadnici. Z toho plyne, že je také ortonormální na ortogonálním doplňku první složky. Nechť je $q = r + v$, tedy v je imaginární část q. Pak platí

$$qvq^* = (r + v)v(r - v) = (r + v)(rv - vv) = (r + v)(r - v)v = N(q)v = v\,.$$

Vidíme, že ρ_q je isometrie s pevným bodem (x, y, z).

Vyjádřeme q jako

$$q = \cos\frac{\omega}{2} + \sin\frac{\omega}{2}(\ell\sin\vartheta\cos\varphi + j\sin\vartheta\sin\varphi + k\cos\varphi)\,,$$

kde

$$v' = \ell\sin\vartheta\cos\varphi + j\sin\vartheta\sin\varphi + k\cos\varphi$$

je jednotkový imaginární kvaternion vyjadřující osu rotace pomocí jejích polárních souřadnic. Označme

$$\kappa = \cos\frac{\omega}{2} + \sin\frac{\omega}{2}k,$$

tedy situaci, kdy $v' = k$. Přímým výpočtem obrazů $\rho_\kappa(\ell)$, $\rho_\kappa(j)$ a $\rho_\kappa(k)$ dostáváme

$$[\rho_\kappa]_{\ell,j,k} = \begin{pmatrix} \cos\omega & -\sin\omega & 0 \\ \sin\omega & \cos\omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

a věta pro tento případ platí. Podobně (nebo ze symetrie) dostaneme platnost pro případy $v' = \ell$ a $v' = j$, tedy pro rotace kolem druhé a třetí osy $\mathbb{R}^3$.

Uvažme nyní kvaterniony

$$q_\varphi = \cos\frac{\varphi}{2} + k\sin\frac{\varphi}{2}\,,$$
$$q_\vartheta = \cos\frac{\vartheta}{2} + j\sin\frac{\vartheta}{2}\,.$$

Jejich akce odpovídá příslušným rotacím, takže

$$q_\varphi q_\vartheta k q_\vartheta^* q_\varphi^* = v'\,,$$

a tedy

$$q_\varphi q_\vartheta \kappa q_\vartheta^* q_\varphi^* = q\,.$$

Odtud

$$qpq^* = q_\varphi(q_\vartheta(\kappa(q_\vartheta^*(q_\varphi^* p q_\varphi)q_\vartheta)\kappa^*)q_\vartheta^*)q_\varphi^*$$

neboli

$$\rho_q = \rho_\varphi \circ \rho_\vartheta \circ \rho_\kappa \circ \rho_\vartheta^{-1} \circ \rho_\varphi^{-1}\,,$$

tedy ρ_q je zobrazení podobné zobrazení ρ_κ, jinak řečeno, je to rotace o úhel ω vzhledem k jiné ortonormální bázi. Konkrétně

$$[\rho_q]_{\rho_\varphi^*\circ\rho_\vartheta^*(\ell,j,k)} = [\rho_\kappa]_{\ell,j,k}\,.$$

Protože pevný bod ρ_q už známe, je důkaz hotov. □

Poznámka: Přímým výpočtem obrazů $\varphi_q(\ell)$, $\varphi_q(j)$ a $\varphi_q(k)$. Dostaneme (pro jednotkové q) matici

$$[\varphi_q]_{\ell,j,k} = \begin{pmatrix} 1-2(y^2+z^2) & 2(xy-rz) & 2(ry+xz) \\ 2(xy+rz) & 1-2(x^2+z^2) & 2(yz-rx) \\ 2(xz-ry) & 2(rx+yz) & 1-2(x^2+y^2) \end{pmatrix}.$$

Můžeme ověřit, že je ortogonální s determinantem 1.

Geometrie projektivních unitárních operátorů

Pokud ztotožníme unitární operátory, které působí stejně na třídách daných projektivní ekvivalencí, dostaneme *projektivní unitární grupu*, kterou značíme PU(2) (dvojka značí dimenzi). Operátor U pak ztotožňujeme s operátorem $e^{i\varphi}U$. (Připomeňme, že $e^{i\varphi}$ zde zastupuje tzv. *skalární matici*, tedy diagonální matici se všemi indexy na diagonále rovnými $e^{i\varphi}$, mající tedy determinant $e^{i2\varphi}$.)

Uvědomme si nejprve, jak vypadá obecný unitární operátor U. Jeho prvním sloupcem je nějaký jednotkový vektor $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$. Druhý sloupec je pak na něj kolmý, je to tedy až na komplexní jednotku vektor $\begin{pmatrix} -b^* \\ a^* \end{pmatrix}$. Obecný případ unitární matice je tedy

$$U = \begin{pmatrix} a & -e^{i\psi}b^* \\ b & e^{i\psi}a^* \end{pmatrix},$$

s determinantem $e^{i\psi}$. V bázi vlastních vektorů má U tvar

$$\begin{pmatrix} e^{i\varphi_1} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi_2} \end{pmatrix},$$

kde $\psi = \varphi_1 + \varphi_2$. Matice U je projektivně ekvivalentní matici

$$e^{-i\frac{\psi}{2}}U = \begin{pmatrix} e^{-i\psi/2}a & -e^{i\psi/2}b^* \\ e^{-i\psi/2}b & e^{i\psi/2}a^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & -d^* \\ d & c^* \end{pmatrix},$$

kde $c = e^{-i\psi/2}a$ a $d = e^{-i\psi/2}b$, s determinantem jedna a diagonálním tvarem

$$\begin{pmatrix} e^{-i\omega/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega/2} \end{pmatrix},$$

kde $\omega = \varphi_2 - \varphi_1$. Nabízí se tedy zvolit tohoto jednoduchého reprezentanta unitárních operátorů projektivně ekvivalentních s U. To je prvek *speciální unitární grupy* označené SU(2). Takoví reprezentanti jsou ovšem dva! A sice $\pm e^{-i\psi/2}U$.

> **Poznámka:** Další přirozenou volbou je matice $e^{-i\varphi_1}$, která má diagonální tvar
>
> $$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\omega} \end{pmatrix}.$$
>
> Všimněme si zajímavého rozdílu. Zatímco zobrazení
>
> $$R(\omega) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\omega} \end{pmatrix}$$
>
> má periodu 2π, zobrazení
>
> $$T(\omega) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\omega}{2}} \end{pmatrix}$$
>
> má periodu 4π, přičemž matice $T(\omega)$ a $T(\omega+2\pi)$ se liší o znaménko, jsou to dva reprezentanti v SU(2) téhož prvku z PU(2).

Zapíšeme-li $c = p - ti$ a $d = s - ri$, kde $p, r, s, t \in \mathbb{R}$, $(p, r, s, t) \in \mathbb{S}^3$, dostáváme

$$\begin{pmatrix} p - ti & -s - ri \\ s - ri & p + ti \end{pmatrix}.$$

Znaménko prvku SU(2) můžeme nyní volit tak, že budeme volit p jako nezáporné. (Pokud je $p = 0$ budeme volit znaménko t nebo dokonce s.) Výhodou takto zapsané matice je vztah

$$\begin{pmatrix} p - ti & -s - ri \\ s - ri & p + ti \end{pmatrix} = pE + r(-iX) + s(-iY) + t(-iZ),$$

poskytující rozklad do matic E, $-iX$, iY, $-iZ$ splňujících stejné definující relace jako generátory kvaternionů $1, \ell, j, k$. Můžeme tedy ztotožnit $\ell = -iX$, $j = -iY$, $k = -iZ$ a dostáváme jednoznačnou korespondenci mezi jednotkovými kvaterniony s nezápornou reálnou částí a prvky PU(2). Každý prvek $U \in \mathrm{PU}(2)$ tedy můžeme jednoznačně vyjádřit jako

$$U = \cos\frac{\omega}{2}E + (x\ell + yj + zk)\sin\frac{\omega}{2},$$

kde $(x, y, z) \in \mathbb{S}^2$ a $\omega \in [0, \pi)$. To se v kvantové mechanice často vyjadřuje tzv. *rozšířenou Eulerovou formulí*

$$U = e^{-i\frac{\omega}{2}\,\xi\cdot\sigma} = E\cos\frac{\omega}{2} - i\,\xi\cdot\sigma\sin\frac{\omega}{2} = \cos\frac{\omega}{2}E + (x\ell + yj + zk)\sin\frac{\omega}{2}\,,$$

kde $\xi = (x, y, z)$ a $\sigma = (X, Y, Z)$. Každé dvojici ξ, ω odpovídá rotace $R(\xi, \omega)$ prostoru $\mathbb{R}^3$ kolem osy ξ o úhel ω. Tyto rotace tvoří *speciální ortonormální grupu* SO(3), tedy grupu matic, jejichž sloupce (a řádky) tvoří ortonormální bázi a jejich determinant je jedna. Každá neidentická rotace je přitom definována dvěma dvojicemi kvůli rovnosti $R(\xi, \omega) = R(-\xi, -\omega)$.

> **Poznámka:** Identita E způsobuje jisté technické komplikace, protože její „osu“ je možné volit libovolně (přičemž $\omega = 0$). Je přirozené zavést pro E konvenci $x = y = z = 0$, tedy $\xi = \vec{0}$.

Existuje tedy bijekce mezi $\mathbb{S}^2 \times (0, 2\pi)$ a $\mathrm{SU}(2) \setminus \{E\}$, přičemž vždy dva prvky odpovídají jedné rotaci z SO(3), resp. jednomu prvku PU(2). Naše úvahy můžeme shrnout takto:

$$\mathrm{PU}(2) \cong \mathrm{SU}(2)/\mathbb{Z}_2 \cong \mathbb{S}^3/\mathbb{Z}_2 \cong \mathbb{K}_1/\mathbb{Z}_2 \cong \mathbb{S}^2 \times (0, 2\pi)/\mathbb{Z}_2 \cup (\vec{0}, 0) \cong \mathrm{SO}(3)\,.$$

Symbol $\cong$ zde chápeme volně jako výše uvedená přiřazení.

Mezi krajními členy je ovšem vztah mnohem těsnější, zprostředkovaný vztahem mezi rotacemi a akcí konjugace kvaternionů, vyjádřený v následující větě.

Věta. Zobrazení

$$\begin{aligned} \Phi :\ & \mathrm{SO}(3) \to \mathrm{PU}(2) \\ & R(\xi, \omega) \mapsto e^{-i\frac{\omega}{2}\,\xi\cdot\sigma} \end{aligned}$$

je isomorfismus grup. Navíc pro každou rotaci $\rho \in \mathrm{SO}(3)$ platí

$$\rho = \mathcal{S}^{-1} \circ \Phi(\rho) \circ \mathcal{S},$$

kde $\mathcal{S} : \mathbb{S}^2 \to \mathbb{C}\mathbf{P}^1$ je stereografická projekce.

Důkaz. Pro $U = e^{-i\frac{\omega}{2}\,\xi\cdot\sigma}$ máme

$$R(\xi, \omega) = \rho_U \xmapsto{\Phi} U.$$

Zobrazení je tedy prosté a na, přičemž skládání rotací odpovídá násobení matic. Zbývá ukázat, že $R(\xi, \omega)$ působí na $\mathcal{S}^{-1}(|\psi\rangle)$ stejně jako U na $|\psi\rangle$. K tomu použijeme operátor hustoty. Operátor obrazu $U|\psi\rangle$ má tvar

$$U|\psi\rangle\langle\psi|U^\dagger = \frac{1}{2}E + \frac{i}{2}U(b\ell + cj + dk)U^\dagger\,.$$

Z věty o akci konjugace kvaternionů plyne, že $\mathcal{S}^{-1}\left(U|\psi\rangle\right)$ se skutečně rovná $\rho_U(b,c,d)$ a následující diagram komutuje.

$$\begin{tikzcd}
\mathbb{C}\mathbf{P}^1 \arrow[d, "e^{-i\frac{\omega}{2}\,\xi\cdot\sigma}"'] & \mathbb{S}^2 \arrow[l, "\mathcal{S}"'] \arrow[d, "R(\xi,\omega)"] \\
\mathbb{C}\mathbf{P}^1 & \mathbb{S}^2 \arrow[l, "\mathcal{S}"']
\end{tikzcd}$$

$\square$