Usporedba Dirac-von Neumannove i C-algebarske aksiomatizacije kvantne mehanike*

Matija Livaić

PMF-Fizički odsjek, Sveučilište u Zagrebu, 26.1.2020.

Mentori: doc. dr. sc. Ilja Gogić, PMF-Matematički odsjek; doc. dr. sc. Ivica Smolić, PMF-Fizički odsjek

Ključne riječi: Hilbertov prostor, opservable, stanja, C^*-algebra, reprezentacija C^*-algebre, Gelfand-Naimark-Segal konstrukcija, Gelfand-Naimarkov teorem.

Apstrakt: U ovom radu prvo rezimiramo najosnovnije postulate kvantne mehanike i predstavljamo ih u formalnijem obliku. U potrazi za alternativnim, ekvivalentnim postulatima, razmatramo klasičnu mehaniku i nalazimo da opservable čine separabilnu, abelovu, unitalnu C^*-algebru, a stanja normalizirani pozitivni linearni funkcionali na toj algebri. Motivirani potom eksperimentom, za postulate kvantne mehanike uzimamo vrlo sličnu, ali oslabljenu strukturu, ispuštajući samo komutativnost opservabli. Pomoću GNS-konstrukcije i Gelfand-Naimarkovog teorema se vraćamo na poznate aksiome kvantne mehanike.

1. Uvod

Klasična mehanika leži u pozadini formulacije kvantne mehanike od njenih samih začetaka: *"Thus quantum mechanics occupies an unusual place among physical theories: it contains classical mechanics as its limiting case, yet at the same time it requires its limiting case for its own formulation."* [9] No sam proces kvantizacije, i dugo nakon što se formalizam kvantne mehanike iskristalizirao u fizičkoj zajednici, predstavlja misterij i veliku prepreku pri učenju teorije. Klasični fazni prostor prelazi u Hilbertov prostor, funkcije na faznom prostoru (opservable) prelaze u operatore na Hilbertovom prostoru, a Poissonove zagrade prelaze u komutatore. Još veću konceptualnu poteškoću zadaje nam proces mjerenja u kvantnoj mehanici. Preostaje na kraju, barem u određenoj mjeri, složiti se sa sljedećim: *"The justification for the whole scheme depends, apart from internal consistency, on the agreement of the final results with experiment."* [4] Zadobivši čvrste, matematički egzaktne temelje, prvenstveno radom John von Neumanna [12] iz 1932. godine, ustalili su se tzv. Dirac-von Neumannovi aksiomi, što je danas standardni pristup kvantnoj mehanici. Godine 1947., Irving Segal objavljuje rad pod nazivom *Postulates for General Quantum Mechanics* [10] u kojem kaže: *"The postulates are partly algebraic and partly metric. (...) The postulates suggested themselves to us in the course of an investigation of the representations of operator algebras..."*. Tu se pojavila misao koja se unaprijeđivala tokom prošlog stoljeća i u ovom radu ćemo predstaviti te alternativne aksiome u modernijem obliku. Kratak povijesni pregled se može naći u [5].

Glavna nit vodilja u ovom radu je upravo ta klasično-kvantna korespondencija. Cilj će nam biti učiniti prelazak s klasične na kvantnu mehaniku što glađim i, koliko je to moguće, smislenijim. Vidjet ćemo da će nam teorija C^*-algebri tu biti od nemale pomoći. Smatramo ne samo da takav pristup ima mogućih prednosti pri učenju kvantne mehanike, već i da jača klasično-kvantnu sponu. U prilog njenoj važnosti govorio je Bohr: *"As our knowledge becomes wider, we must always be prepared, therefore, to expect alterations in the points of view best suited for the ordering of our experience. In this connection we must remember, above all, that, as a matter of course, all new experience makes its appearance within the frame of our customary points of view and perception. (...) We learn that these forms of perceptions are* idealizations*, the suitability of which for reducing our ordinary sense of impressions to order depends upon the practically infinite velocity of light and upon the smallness of the quantum of action. In appraising this situation, however, we must not forget that, in spite of their limitation, however, we can by no means dispense with those forms of perception which colour our whole language and in terms of which all experience must ultimately be expressed."*[1]

U ovom radu bavit ćemo se samo pojmovima *opservable* i *stanja* i obraditi samo aksiome koji se tiču tih pojmova. Dinamiku i proces mjerenja nećemo razmatrati zbog prostorne ograničenosti.

2. Hilbertovi prostori i kvantna mehanika

Započinjemo s nekoliko preliminarnih definicija. Gotovo svi pojmovi u ovom odjeljku će biti poznati, no njihova precizna formulacija nam je potrebna ne samo da iskažemo tri DvN aksioma, što ćemo učiniti na kraju poglavlja, već i stoga što su blisko povezani s teorijom C^*-algebri koju ćemo razviti u iduća dva poglavlja.

Definicija 1. *Neka je X topološki prostor. Za podskup $U \subset X$ kažemo da je* ***gust*** *ako mu je zatvarač $\mathrm{cl}\, U$ jednak X. Za X kažemo da je* ***separabilan*** *ako ima prebrojiv gust podskup. Kažemo da X zadovoljava* ***drugi aksiom prebrojivosti*** *ako ima prebrojivu bazu topologije. Ako je X metrički prostor, onda kažemo da je* ***potpun*** *ako svaki Cauchyjev niz konvergira u X.*

Definicija 2. *Neka je $\mathcal{H}$ vektorski prostor i $||\cdot||$ norma na $\mathcal{H}$. Kažemo da je par $(\mathcal{H}, ||\cdot||)$* ***normiran*** *prostor. Topologija normiranog prostora određena je metrikom definiranom s $d(x,y) = ||x-y||$, za sve $x, y \in \mathcal{H}$. Za $\mathcal{H}$ kažemo da je* ***Banachov prostor*** *ako je potpun normiran prostor.* ***Jedinična kugla*** *u $\mathcal{H}$ je skup $\mathrm{ball}\,\mathcal{H} = \{x \in \mathcal{H} \mid ||x|| \leq 1\}$.*

Neka je dan linearan operator $T : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{K}$ između Banachovih prostora. Kažemo da je operator ***ograničen*** *ako postoji $M > 0$ tako da je $||Tx|| \leq M||x||$, za svaki $x \in \mathcal{H}$. U tom slučaju definiramo normu operatora $||T|| = \sup\{||Tx|| \mid x \in \mathrm{ball}\,\mathcal{H}\}$ i ta norma zove se* ***operatorska norma****. Skup svih ograničenih operatora iz $\mathcal{H}$ u $\mathcal{K}$ označavamo s $\mathcal{B}(\mathcal{H}, \mathcal{K})$. Ako je $\mathcal{H} = \mathcal{K}$, pišemo $\mathcal{B}(\mathcal{H}, \mathcal{H}) = \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Skup svih ograničenih linearnih funckionala na $\mathcal{H}$ označavamo s $\mathcal{H}^*$.*

Mogu se lako pokazati veoma dobra svojstva linearnih operatora: T je ograničen ako i samo ako (skraćeno akko) je neprekidan akko je neprekidan u bilo kojoj točki $x \in \mathcal{H}$. Neprekidan, dakako, u odnosu na metriku iz prethodne definicije.

Neka je sad $\mathcal{H}$ vektorski prostor sa skalarnim produktom $\langle\cdot,\cdot\rangle$. Kažemo da je $\mathcal{H}$ unitaran. Skalarni produkt na prirodan način inducira normu $||x|| = \sqrt{\langle x, x\rangle}$, što čini $\mathcal{H}$ normiranim prostorom. Kad god imamo unitaran prostor, norma će uvijek biti inducirana skalarnim produktom.

Definicija 3. *Za vektorski prostor $\mathcal{H}$ sa skalarnim produktom kažemo da je* ***Hilbertov prostor*** *ako je potpun u normi.*

Do kraja rada $\mathcal{H}$ će označavati Hilbertov prostor. Svi vektorski prostori i algebre u ovo radu će biti nad poljem $\mathbb{C}$ i za $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ i $x, y \in \mathcal{H}$ će vrijediti konvencija $\langle \alpha x, \beta x\rangle = \overline{\alpha}\beta\langle x, y\rangle$ za skalarni produkt.

Ako je $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H}, \mathcal{K})$, primjetimo da je preslikavanje $x \mapsto \langle y, Tx\rangle$ ograničen linearni funkcional za svaki $y \in \mathcal{K}$, budući da je po CBS nejednakosti $|\langle y, Tx\rangle| \leq ||Tx||\,||y|| \leq ||T||\,||y||\,||x||$. Idući važan teorem nam omogućuje definirati pojam adjungiranog operatora.

Teorem 1. (Rieszov teorem o reprezentaciji) *Ako je $L : \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C}$ ograničen linearan funkcional, tada postoji jedinstveni $x_0 \in \mathcal{H}$ takav da je $L(x) = \langle x_0, x\rangle$ i $||L|| = ||x_0||$.*

Definicija 4. *Ako je $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H}, \mathcal{K})$, tada postoji jedinstveni* ***adjungirani operator*** *T^* takav da je $\langle k, Th\rangle = \langle T^*k, h\rangle$, za svaki $h \in \mathcal{H}$ i $k \in \mathcal{K}$. Za operator $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ kažemo da je* ***hermitski*** *ako je $T = T^*$. Operator je* ***normalan*** *ako je $TT^* = T^*T$. Operator je* ***unitaran*** *ako je $TT^* = T^*T = 1$.*

Na Hilbertovom prostoru imamo korisnu formulu za normu hermitskog operatora:

Propozicija 1. *Neka je T hermitski operator na $\mathcal{H}$. Tada je $||T|| = \sup\{|\langle h, Th\rangle| \mid ||h|| = 1\}$.*

Sada smo u poziciji iskazati prva dva DvN aksioma.

Dirac-von Neumannov aksiom 1. *Svakom kvantnom sistemu pridružen je separabilan kompleksan Hilbertov prostor $\mathcal{H}$.*

Dirac-von Neumannov aksiom 2. *Opservable su hermitski operatori na $\mathcal{H}$.*

Za treći aksiom, kojim ćemo opisati stanja sistema, mogli bismo uzeti samo jedinične vektore (ili ekvivalentno zrake) u $\mathcal{H}$. No u stvarnosti najčešće operiramo sa miješanim stanjima koje opisujemo s operatorom gustoće. Slijedi stoga još par definicija.

Definicija 5. *Za podskup $E \subset \mathcal{H}$ kažemo da je* ***ortonormiran*** *ako je $||e|| = 1$ i $\langle e, f\rangle = 0$, za svaka dva različita $e, f \in E$.* ***Baza*** *je maksimalan ortonormiran podskup. Ako je $\mathcal{H}$ separabilan, $\{e_n \mid n \in \mathbb{N}\}$ baza za $\mathcal{H}$ i $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, tada definiramo* ***trag*** *operatora T kao $\mathrm{Tr}\, T = \sum_{n=0}^{\infty}\langle e_n, Te_n\rangle$, ako ta suma konvergira.*

Gornja suma je neovisna o bazi. Također, koristili smo sljedeću propoziciju.

Propozicija 2. *Svaki separabilan Hilbertov prostor ima prebrojivu bazu.*

Definicija 6. *Operator T na $\mathcal{H}$ je* ***pozitivan*** *ako je $\langle Th, h\rangle \geq 0$, za sve $h \in \mathcal{H}$. Tada pišemo $T \geq 0$.*

Kako je operator hermitski akko je $\langle Th, h\rangle \in \mathbb{R}$ za sve $h \in \mathcal{H}$, pozitivan operator je nužno hermitski.

Dirac-von Neumannov aksiom 3. *Stanja kvantnog sistema kojem je pridružen $\mathcal{H}$ su pozitivni operatori traga 1 na $\mathcal{H}$.*

Stanja u prethodnom smislu, kao jedinični vektori u Hilbertovom prostoru, na prirodan se način mogu smatrati podskupom ovako definiranom skupu stanja. Neka je $\psi \in \mathcal{H}$ i $||\psi|| = 1$. Neka je P projektor na potprostor razapet s ψ. Tada je $\langle Ph, h\rangle = \langle P^2h, h\rangle = \langle P^*Ph, h\rangle = ||Ph||^2 \geq 0$, $\forall h \in \mathcal{H}$ i $\operatorname{Tr} P = 1$.

Za kraj samo definiramo direktnu sumu Hilbertovih prostora koja će nam trebati u četvrtom odjeljku.

Propozicija 3. *Neka je $\{\mathcal{H}_n\}$ niz separabilnih Hilbertovih prostora i $\mathcal{H} = \{(h_n)_{n\in\mathbb{N}} \mid h_n \in \mathcal{H}_n\,,\ \sum_{n=0}^{\infty} ||h_n||^2 < \infty\}$. Definirajmo operacije zbrajanja i množenja skalarom na $\mathcal{H}$ po koordinatama i za $h = (h_n)$ i $g = (g_n)$ u $\mathcal{H}$ definiramo $\langle h, g\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\langle h_n, g_n\rangle$. Tada je $\mathcal{H}$ s operacijom $\langle\cdot,\cdot\rangle$ separabilan Hilbertov prostor i pišemo $\mathcal{H} = \bigoplus_{n=1}^{\infty} \mathcal{H}_n$.*

3. C^*-algebre i klasična mehanika

U klasičnoj mehanici stanje sistema od N čestica jednoznačno je određeno položajima i impulsima čestica, odnosno točkom $(q,p) \equiv (q_1, ..., q_N, p_1, ..., p_N)$ u faznom prostoru. Sasvim formalno, fazni prostor ima strukturu simplektičke mnogostrukosti, no budući da nećemo raspravljati o dinamici, dovoljno je promatrati samo topološku strukturu. Stoga, definiramo **fazni prostor**, prostor stanja klasičnog sistema, kao kompaktan Hausdorffov prostor X i **klasične opservable** kao neprekidne realne funkcije na X (u oznaci $C_{\mathbb{R}}(X)$). Ove tvrdnje su naizgled aksiomatskog karaktera, no u pozadini zapravo leži jednostavan princip klasične mehanike, da se nad sistemom mogu vršiti mjerenja proizvoljne preciznosti. Pretpostavimo da vršimo niz mjerenja $P_n \in X$ stanja sistema s ciljem da odredimo vrijednost opservable f (Dakako, ovaj problem nemoguće je pravedno razmotriti zanemarivši dinamiku, jer se točka koja opisuje sistem giba u faznom prostoru. Za naše potrebe možemo pretpostaviti da vršimo mjerenja na ansamblu). Očekujemo da kako se P_n približava svojoj pravoj vrijednosti P, $f(P_n)$ se približava svojoj pravoj vrijednosti $f(P)$, što je upravo karakterizacija neprekidnosti. Nadalje, Hausdorffovo svojstvo je sasvim prirodno: ako vršimo niz mjerenja očekujemo da u limesu dolazimo do jedinstveno određenog stanja sistema, što ne bi uvijek bio slučaj da prostor nije Hausdorffov. Kompaktnost nam osigurava da opservable poprimaju konačne vrijednosti i koji god sistem promatrali, gibanje mu je ograničeno našim laboratorijem, dakle X mora biti ograničen. Iz tehničkih razloga, zahtjevamo da X još zadovoljava i drugi aksiom prebrojivosti. Mnogostrukosti zadovoljavaju taj uvjet i na neki način služi tome da prostor nema "previše" otvorenih skupova.

Kao prvi korak u određivanju strukture klasičnih opservabli dokazujemo sljedeći teorem. Primjetimo da je $C_{\mathbb{R}}(X)$ potprostor od $C(X)$, prostora svih kompleksnih neprekidnih funkcija.

Teorem 2. *Neka je X kompaktan prostor. Tada je $C(X)$ s normom $||f|| \equiv \sup\{|f(x)| \mid x \in X\}$ Banachov prostor.*

Dokaz. Neka je $\{f_n\}$ Cauchyjev niz u $C(X)$ i $x \in X$ proizvoljan. Kako je za sve $n, m \in \mathbb{N}$ $|f_n(x) - f_m(x)| \leq ||f_n - f_m||$, niz $\{f_n(x)\}$ je Cauchyjev niz u $\mathbb{C}$, i stoga konvergira. Definirajmo funkciju $f : X \longrightarrow \mathbb{C}$ s $f(x) \equiv \lim_n f_n(x)$. Pokažimo da $||f - f_n|| \longrightarrow 0$. Neka je $\epsilon > 0$ proizvoljan i $N \in \mathbb{N}$ takav da za sve $n, m \geq N$ vrijedi $||f_n - f_m|| < \epsilon/2$. Puštajući $m \longrightarrow \infty$ dobivamo da je za sve $x \in X$ $|f(x) - f_n(x)| \leq \epsilon/2$. Uzimajući supremum dobivamo $||f - f_n|| < \epsilon$.

Preostaje pokazati da je f neprekidna. Neka su $x_0 \in X$ i $\epsilon > 0$ proizvoljni, te $n \in \mathbb{N}$ takav da je $||f_n - f|| < \epsilon/3$. Kako je $f_n \in C(X)$, postoji okolina U od x_0 takva da je $|f_n(x) - f_n(x_0)| < \epsilon/3$ za sve $x \in U$. Dakle, imamo

$$|f(x) - f(x_0)| \leq |f(x) - f_n(x)| + |f_n(x) - f_n(x_0)| + |f_n(x_0) - f(x_0)| < \epsilon\,.$$

□

Sada definiramo C^*-algebru.

Definicija 7. *Neka je $\mathcal{A}$ algebra nad poljem $\mathbb{C}$.* ***Involucija*** $* : \mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{A}$ *je operacija takva da za sve $a, b \in \mathcal{A}$ i $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ vrijedi:*

- $(\alpha a + \beta b)^* = \overline{\alpha} a^* + \overline{\beta} b^*$
- $(ab)^* = b^* a^*$
- $(a^*)^* = a.$

Algebra s involucijom zove se ****-algebra****. Ako je $\mathcal{A}$ i Banachov prostor takav da je $||ab|| \leq ||a|| \, ||b||$, za sve $a, b \in \mathcal{A}$, onda kažemo da je $\mathcal{A}$* ***Banachova algebra****.*

*Ako je $\mathcal{A}$ Banachova *-algebra takva da je $||a^*a|| = ||a||^2$, za svaki $a \in \mathcal{A}$, kažemo da je $\mathcal{A}$* ***C^*-algebra****. Ako $\mathcal{A}$ ima multiplikativnu jedinicu, kažemo da je* ***unitalna****. Za element $a \in \mathcal{A}$ kažemo da je* ***hermitski*** *ako je $a = a^*$,* ***normalan*** *ako je $a^*a = aa^*$,* ***unitaran*** *ako je $a^*a = aa^* = 1$.*

Može se pokazati da je $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ u operatorskoj normi Banachov prostor, štoviše Banachova algebra. S involucijom $T \mapsto T^*$ postaje i *-algebra, a kako je T^*T hermitski operator, propozicija 1 nam daje $||T^*T|| = ||T||^2$. Dakle $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ je C^*-algebra.

Sljedeći teorem je glavni rezultat ovog odjeljka.

Teorem 3. *Neka je X kompaktan Hausdorffov prostor koji zadovoljava drugi aksiom prebrojivosti. Definirajmo involuciju na $C(X)$ kao kompleksno konjugiranje po točkama. Tada je $C(X)$ separabilna, abelova, unitalna C^*-algebra. Dakle, klasične opservable na faznom prostoru X čine hermitski elementi te algebre*

Dokaz. Potpunost je dokazana u teoremu 2. Tada je jasno da je $C(X)$ komutativna, unitalna C^*-algebra. Za kompaktan Hausdorffov prostor X vrijedi da je $C(X)$ separabilan akko X zadovoljava drugi aksiom prebrojivosti. □

U idućem odjeljku postulirat ćemo da kvantne opservable čine separabilnu, unitalnu C^*-algebru (nekomutativnu). Kao što smo istaknuli u uvodu, cilj nam je da prelazak s klasične u kvantnu mehaniku bude što prirodniji. Da bismo opravdali stoga ovakav postulat, moramo se uvjeriti u sljedeće: Odgovara li svaka separabilna, unitalna, abelova C^*-algebra nekoj algebri klasičnih opservabli? Odnosno, je li svaka separabilna, unitalna, abelova C^*-algebra jednaka $C(X)$, za neki kompaktan i Hausdorffov prostor X s prebrojivom bazom? Odgovor je potvrdan! *Biti jednak* ovdje znači biti izometrično *-izomorfan.

Definicija 8. *Kažemo da je homomorfizam *-algebri $\pi : \mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{B}$* ****-homomorfizam*** *ako je $\pi(a^*) = \pi(a)^*$, za svaki $a \in \mathcal{A}$.* ****-izomorfizam*** *je bijektivni *-homomorfizam.* ***Izometrija*** *između dva metrička prostora X i Y je funkcija $f : X \longrightarrow Y$ takva da je $d(f(x), f(y)) = d(x, y)$, za sve $x, y \in X$.*

Da bismo došli do potvrdnog odgovora na prethodna pitanja, potrebno nam je uvesti nekoliko pojmova i iskazati neke rezltate vezane uz njih. Zbog ograničenog prostora, nećemo ih dokazivati, već se mogu naći u [3] ili [7].

Definicija 9. *Neka je $\mathcal{A}$ Banachova algebra s jedinicom. Homomorfizam $h : \mathcal{A} \longrightarrow \mathbb{C}$ takav da je $h(1) = 1$ zovemo* ***karakter*** *algebre $\mathcal{A}$. Skup svih karaktera algebre $\mathcal{A}$ označavamo s $\Sigma(\mathcal{A})$. Opskrbimo $\Sigma(\mathcal{A})$ relativnom slabom* topologijom duala $\mathcal{A}^*$.*

Neka je $a \in \mathcal{A}$. Funkcija $\hat{a} : \Sigma(\mathcal{A}) \longrightarrow \mathbb{C}$ je definirana s $\hat{a}(h) = h(a)$ zove se ***Gelfandov transformat*** *od a.*

Tu smo unaprijed koristili tvrdnju idućeg teorema, da su svi karakteri $\mathcal{A} \longrightarrow \mathbb{C}$ neprekidni. Slabe i slabe* topologije nisu ključne u našoj raspravi. Za definiciju vidjeti [3]. No vidjet ćemo da će nam svojstva skupa karaktera iskazana u idućem teoremu biti važna.

Teorem 4. *Neka je $\mathcal{A}$ abelova Banachova algebra s jedinicom. Svaki karakter h je neprekidan i $||h|| = 1$. Nadalje, $\Sigma(\mathcal{A})$ je kompaktan Hausdorffov prostor.*

Za svaki $a \in \mathcal{A}$, Gelfandov transformat $\hat{a}$ je element iz $C(\Sigma(\mathcal{A}))$. Preslikavanje $\gamma : \mathcal{A} \longrightarrow C(\Sigma(\mathcal{A})) : a \mapsto \hat{a}$ je neprekidan homomorfizam i zove se ***Gelfandova transformacija*** *od $\mathcal{A}$.*

Idući teorem nam govori da ako je $\mathcal{A}$ još i C^*-algebra, tada se ona može poistovjetiti s neprekidnim funckijama na kompaktnom Hausdorffovom prostoru. U suštini, svaka unitalna abelova C^*-algebra je upravo $C(X)$.

Teorem 5. *Neka je $\mathcal{A}$ unitalna abelova C^*-algebra. Tada je je Gelfandova transformacija $\gamma : \mathcal{A} \longrightarrow C(\Sigma(\mathcal{A}))$ izometrični *-izomorfizam.*

Jasno, bijektivna izometrija je homeomorfizam, a homeomorfizam čuva separabilnost. Stoga će za separabilnu algebru $\mathcal{A}$ i $C(\Sigma(\mathcal{A}))$ biti separabilan. Kao što smo rekli u dokazu teorema 6, separabilnost od $C(\Sigma(\mathcal{A}))$ povlači da $\Sigma(\mathcal{A})$ zadovoljava drugi aksiom prebrojivosti. Kombinirajući to s teoremom 4, imamo da $\Sigma(\mathcal{A})$ odgovara nekom faznom prostoru. Time smo odgovorili na prethodno postavljeno potanje.

Pažljivija analiza ovog rezultata podiže sumnju o postojanju mogućih nekonzistencija: primjenimo li prethodni teorem na $C(X)$, za neki fazni prostor X, dobivamo da je $\gamma : C(X) \longrightarrow C(\Sigma(C(X)))$ izometrični *-izomorfizam. Stoga, je li moguće da *dva različita fazna prostora, X i $\Sigma(C(X))$, imaju iste opservable*? To je isključeno idućim teoremom.

Teorem 6. *Neka je X kompaktan. Za svaki $x \in X$ definirajmo preslikavanje $\delta_x : C(X) \longrightarrow \mathbb{C}$ definirano s $\delta_x(f) = f(x)$. Tada je δ_x karakter i preslikavanje $x \mapsto \delta_x$ je homeomorfizam prostora X i $\Sigma(C(X))$.*

Na početku odjeljka rekli smo da su stanja točke u faznom prostoru. Ovakva formulacija nije pogodna za prelazak na kvantnu mehaniku. Na početku idućeg poglavlja vidjet ćemo da je korisno poistovjetiti stanja s podskupom prostora koji ima daleko bogatiju strukturu, $C(X)^*$. Teorem 6 nam omogućuje da to učinimo na sasvim prirodan način.

Odsada nadalje pisat ćemo grčka slova ψ, ω... za stanja umjesto x, y... i umjesto δ_ψ, kao u teoremu 6, pisat ćemo samo ψ, dakle $\psi(f) = f(\psi)$. Prije nego li smo u mogućnosti reći nešto više o strukturi klasičnih stanja, definirajmo pojam pozitivnog elementa u C^*-algebri.

Definicija 10. *Neka je $\mathcal{A}$ unitalna C^*-algebra i $a \in \mathcal{A}$. Skup svih invertibilnih elemenata u $\mathcal{A}$ označavamo s $\mathcal{A}^\times$.* ***Spektar*** *elementa a definiramo kao skup $\sigma(a) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid a - \lambda \notin \mathcal{A}^\times\}$. Za element $a \in \mathcal{A}$ kažemo da je* ***pozitivan*** *ako je hermitski i $\sigma(a) \subset [0, +\infty)$. Tada pišemo $a \geq 0$ i skup svih pozitivnih elemenata označavamo s $\mathcal{A}_+$. Linearan funkcional $f : \mathcal{A} \longrightarrow \mathbb{C}$ je pozitivan ako je $f(a) \geq 0$, za svaki $a \in \mathcal{A}_+$.* ***Stanje*** *na $\mathcal{A}$ je pozitivan linearan funckional norme 1.*

Propozicija 4. *Neka je $\mathcal{A}$ C^*-algebra i $a \in \mathcal{A}$. Tada su sljedeće tvrdnje ekvivalentne:*

- $a \geq 0$.
- *Postoji $b \in \mathcal{A}$ takav da je $a = b^*b$.*
- *Postoji hermitski element $b \in \mathcal{A}$ takav da je $a = b^2$.*
- *a je hermitski i $|| \, ||a|| - a|| \leq ||a||$.*

Ako je $f : \mathcal{A} \longrightarrow \mathbb{C}$ pozitivan linearan funkcional, tada je $|f(y^*x)|^2 \leq f(y^*y)f(x^*x)$, za sve $x, y \in \mathcal{A}$. Posljedično, f je ograničen i $||f|| = f(1)$.

Može se pokazati da ako je $\mathcal{A} = \mathcal{B}(\mathcal{H})$ ova definicija pozitivnosti ekvivalentna je pozitivnosti iz definicije 6. Za $\mathcal{A} = C(X)$, $f \geq 0$ akko je $f(x) \geq 0$, za sve $x \in X$. Primjetimo da je stanje u definiciji 10 nevezano uz stanje u klasičnom smislu. Međutim, imamo idući teorem, s kojim završavamo ovaj odjeljak.

Teorem 7. *Neka je X fazni prostor i ψ stanje u* klasičnom *smislu. Tada je ψ stanje u* algebarskom *smislu.*

Dokaz. Pozitivnost i linearnost su očite, pa pokažimo normaliziranost. Račun je jednostavan: imamo

$$||\psi|| = \sup\{|\psi(f)| \mid f \in \operatorname{ball} C(X)\} \geq |\psi(1)| = 1 \,.$$

S druge strane,

$$|\psi(f)| = |f(\psi)| \leq \sup\{|f(x)| \mid x \in X\} = ||f|| \,,$$

iz čega slijedi i $||\psi|| \leq 1$. □

4. C^*-algebre i kvantna mehanika

Jedna od osnovnih pretpostavki u prošlom odjeljku bila je da se stanje sistema, položaj i impuls, može izmjeriti s proizvoljnom preciznošću. Savršena mjerenja su, naravno, idealizacija, no pretpostavka je da kad bi se moglo izvršiti beskonačno mnogo mjerenja, u limesu kad broj mjerenja ide u beskonačnost dobivamo jedinstveno stanje sistema, do na nepreciznost naših mjernih uređaja. Kao što znamo, to se ne slaže sa stvarnošću, dokle god pod *stanje* mislimo *točka u faznom prostoru.* Koliko god bila visoka preciznost naših uređaja, položaj i impuls ne mogu se istovremeno jednoznačno odrediti, što je sadržaj poznate Heisenbergove relacije neodređenosti.

Da bismo malo osvjetlili pojam stanja (u algebarskom smislu), koristimo jedan teorem iz analize (u malo izmjenjenom obliku):

Teorem 8. (Riesz-Markovljev teorem) *Neka je X kompaktan Hausdorffov prostor i ψ stanje na $C(X)$. Tada postoji jedinstvena Borelova vjerojatnostna mjera μ_ψ takva da za sve $f \in C(X)$ vrijedi*

$$\psi(f) = \int_X f d\mu_\psi$$

Stoga se $\psi(f)$ može interpretirati kao očekivanje od f u stanju ψ. Sasvim je smisleno stoga definirati varijancu, ili **neodređenost** od f u stanju ψ kao $\sigma_\psi(f)^2 = \psi\left((f - \psi(f))^2\right)$. Za *klasična stanja* imamo $\psi(f) = f(\psi)$, pa jedinstvenost iz prethodnog teorema povlači da su μ_ψ tzv. *Diracove mjere*: $\mu_\psi(E) = 1$, kad je $\psi \in E$ i $\mu_\psi(E) = 0$ inače. Jasno je da su za takva stanja neodređenosti svih opservabli jednaka nuli, suprotno onom što sugeriraju eksperimenti. Zapravo, poznato je da vrijedi $\sigma_\psi(Q)\sigma_\psi(P) \geq \frac{1}{2}\hbar$.

Stoga slijedi potraga za potrebnom izmjenom (ili zamjenom) formalizma. Označimo s $\mathcal{A}$ skup opservabli. Tvrdimo da se i dalje stanja $\mathcal{S}$ mogu smatrati funkcijama opservabli. Naime, pretpostavimo da su $\psi, \phi \in \mathcal{S}$ dva stanja i $\psi(a) = \phi(a)$, za svaku opservablu a. Drugim riječima, ne postoji eksperiment kojim bismo razaznali ψ i ϕ. Zapravo, kakav ϕ? Postoji samo ψ, dokle god je domena iskustva nepromjenjena. (Za kratku raspravu o matematičkom opisu generalnih fizikalnih sustava vidjeti [11])

Pristup će nam stoga biti zamjena strukture opservabli. U svom revolucionarnom članku iz 1925. godine, Heisenberg naslućuje da opservable u kvantnoj mehanici ne komutiraju: *"Whereas in classical theory $x(t)y(t)$ is always equal to $y(t)x(t)$, this is not necessarily the case in quantum theory".* [8] Promatrajući spektar zračenja atoma, račun ga je naveo na formulu za produkt koju Jordan i Born prepoznaju kao produkt matrica, koje sačinjavaju nekomutativnu algebru. Motivirani smo stoga postaviti sljedeće aksiome kvantne mehanike. U duhu Bohrova citata s početka rada, izražavamo se jezikom što bližim klasičnoj mehanici.

Aksiom 1. *Opservable kvantnog sistema čine hermitski elementi separabilne, unitalne C^*-algebre $\mathcal{A}$.*

Aksiom 2. *Stanja kvantnog sistema su stanja na $\mathcal{A}$ (def. 10).*

Očekivanje opservable a u stanju ψ je i dalje $\psi(a)$, stoga je definicija neodređenosti nepromjenjena: $\sigma_\psi(a)^2 = \psi((a - \psi(a))^2)$. Zamjena komutativne algebre nekomutativnom algebrom osigurava nam i neiščezavajuće neodređenosti: jednostavan račun, koji se provodi i na kursu kvantne mehanike, pokazuje da vrijedi $\sigma_\psi(a)\sigma_\psi(b) \geq \frac{1}{2}|\psi([a,b])|$.

Do kraja ovog odjeljka cilj nam je pokazati kako iz ovih aksioma nužno slijede DvN aksiomi 1-3. Želimo naći izometrični *-izomorfizam između C^*-algebri $\mathcal{A}$ i $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, gdje je $\mathcal{H}$ separabilan. Time će se opservable, hermitski elementi u $\mathcal{A}$ poistovjetiti s hermitskim operatorima na separabilnom kompleksnom Hilbertovom prostoru. To su DvN 1 i 2. Želimo da se s tim izomorfizmom stanja ujedno poistovjete s pozitivnim operatorima na $\mathcal{H}$ traga jedan i imamo DvN 3.

Počinjemo s pojmom reprezentacije C^*-algebre. Od sada nadalje će sve algebre biti unitalne.

Definicija 11. ***Reprezentacija*** *C^*-algebre $\mathcal{A}$ je par $(\pi, \mathcal{H})$, gdje je $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor i $\pi : \mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$ *-homomorfizam. Reprezentacija je* ***ciklička*** *ako postoji vektor $e \in \mathcal{H}$ takav da je $\pi(\mathcal{A})e$ gust u $\mathcal{H}$ i u tom slučaju se e zove ciklički vektor reprezentacije π.*

Dvije reprezentacije $(\pi_1, \mathcal{H}_1)$ i $(\pi_2, \mathcal{H}_2)$ su ekvivalentne ako postoji izomorfizam $U : \mathcal{H}_1 \longrightarrow \mathcal{H}_2$ takav da je $U\pi_1(a)U^{-1} = \pi(a)_2$, za svaki $a \in \mathcal{H}$.

Pod izomorfizmom Hilbertovih prostora uvijek se misli unitarna transformacija. Sljedeća propozicija nam govori o povezanosti algebarske i topološke strukture.

Propozicija 5. *Ako je π *-homomorfizam između dvije C^*-algebre $\mathcal{A}$ i $\mathcal{B}$, tada je $||\pi(a)|| \leq ||a||$, za svaki $a \in \mathcal{A}$. Dakle, *-homomorfizmi C^*-algebri su ograničeni i $||\pi|| \leq 1$. Ako je π *-izomorfizam, vrijedi jednakost.*

Teorem 9. *Ako je π reprezentacija C^*-algebre $\mathcal{A}$, tada postoji familija cikličkih reprezentacija $\{\pi_i\}$ od $\mathcal{A}$ takva da je $\pi = \bigoplus_i \pi_i$.*

Prethodni teorem ilustrira važnost cikličkih reprezentacija. Neka je π ciklička reprezentacija s cikličkim vektorom e. Definirajmo $f : \mathcal{A} \longrightarrow \mathbb{C}$ s $f(a) = \langle e, \pi(a)e \rangle$. Očito je f linearan funkcional. Ako je $a = b^*b$ pozitivan element, tada, pošto je π *-homomorfizam, slijedi

$$f(b^*b) = \langle e, \pi(b)^*\pi(b)e \rangle = \langle \pi(b)e, \pi(b)e \rangle \geq 0\,.$$

Dakle, f je pozitivan linearan funkcional s normom $||f|| = f(1) = ||e||^2$. Stoga je $g = ||e||^{-2}f$ stanje. Pokazali smo važnu činjenicu: *svakoj cikličkoj reprezentaciji pridružujemo stanje na $\mathcal{A}$.* Teorem 10 dat će nam obrat ove tvrdnje i više od toga. U dokazu ćemo koristiti idući pojam iz algebre:

Definicija 12. *Neka je $\mathcal{A}$ algebra i $\mathcal{I}$ vektorski potprostor od $\mathcal{A}$. Kažemo da je $\mathcal{I}$ **lijevi ideal** ako za svaki $a \in \mathcal{A}$ i $x \in \mathcal{I}$ vrijedi $ax \in \mathcal{I}$. Kažemo da je $\mathcal{I}$ **desni ideal** ako je $xa \in \mathcal{I}$. Ako je $\mathcal{I}$ i lijevi i desni ideal, kažemo da je **ideal**.*

Teorem 10. (Gelfand-Naimark-Segal konstrukcija) *Neka je $\mathcal{A}$ C^*-algebra.*

- *Ako je f stanje na $\mathcal{A}$, tada postoji ciklička reprezentacija $(\pi_f, \mathcal{H}_f)$ od $\mathcal{A}$ s cikličkim vektorom e takvim da je $f(a) = \langle e, \pi_f(a)e \rangle$, za sve $a \in \mathcal{A}$.*
- *Ako je $(\pi, \mathcal{H})$ ciklička reprezentacija od $\mathcal{A}$ s cikličkim vektorom e takvim da je $f(a) = \langle e, \pi(a)e \rangle$, tada su π i π_f ekvivalentne.*

U dokazu teorema koristimo standardnu činjenicu da svaki normiran prostor $\mathcal{X}$ ima *upotpunjenje* $\overline{\mathcal{X}}$, Banachov prostor takav da je $\mathcal{X}$ gust podskup od $\overline{\mathcal{X}}$ [2].

Dokaz. Neka je f stanje na $\mathcal{A}$. Stavimo $\mathcal{I} = \{x \in \mathcal{A} \mid f(x^*x) = 0\}$ i neka su $a \in \mathcal{A}$ i $x \in \mathcal{I}$ proizvoljni. Prema propoziciji 4 imamo

$$|f((ax)^*(ax))|^2 = |f(x^*(a^*ax))|^2 \leq f(x^*x)f((a^*ax)^*(a^*ax)) = 0\,,$$

pa je $\mathcal{I}$ lijevi ideal. Skupu $\mathcal{A}/\mathcal{I}$ možemo dati strukturu vektorskog prostora. Štoviše, lako je vidjeti da

$$\langle x + \mathcal{I}, y + \mathcal{I} \rangle = \overline{f(y^*x)}$$

definira skalarni produkt na $\mathcal{A}/\mathcal{I}$. S $\mathcal{H}_f$ označimo upotpunjenje od $(\mathcal{A}/\mathcal{I}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$.

Neka je sad $a \in \mathcal{A}$ proizvoljan i definirajmo s $\pi_f(a)$ preslikavanje $x + \mathcal{I} \mapsto ax + \mathcal{I}$. Kako je $\mathcal{I}$ lijevi ideal, preslikavanje je dobro definiran linearan operator. Imamo

$$||\pi_f(a)(x + \mathcal{I})||^2 = \langle ax + \mathcal{I}, ax + \mathcal{I} \rangle = f(x^*a^*ax)\,.$$

Sada nam treba nam jedna lema. Navodimo ju bez dokaza.

Lema 1. $x^*(||a^*a|| - a^*a)x \geq 0\,.$

Sjetimo se svojstva C^*-algebre: $||a^*a|| = ||a||^2$. Stoga imamo

$$f(x^*(||a^*a|| - a^*a)x) = ||a||^2 f(x^*x) - f((ax)^*(ax)) = ||a||^2||x + \mathcal{I}||^2 - ||ax + \mathcal{I}||^2 \geq 0\,.$$

Dakle, $\pi_f(a)$ je ograničen linearan operator i $||\pi_f(a)|| \leq ||a||$. Možemo stoga proširiti definiciju od $\pi_f(a)$ da bude element iz $\mathcal{B}(\mathcal{H}_f)$. Naime, kako je $\mathcal{A}/\mathcal{I} \subset \mathcal{H}_f$ gust, za $h \in \mathcal{H}_f \setminus \mathcal{A}/\mathcal{I}$ stavljamo $\pi_f(a)h = \lim_{x+\mathcal{I} \longrightarrow h} \pi_f(a)(x+\mathcal{I})$. Pokažimo da je $\pi_f : \mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_f)$ reprezentacija. Očito je $\pi_f(ab) = \pi_f(a)\pi_f(b)$. Neka su sad $x+\mathcal{I}, y+\mathcal{I} \in \mathcal{A}/\mathcal{I}$ proizvoljni. Imamo

$$\begin{aligned}\langle x + \mathcal{I}, \pi_f(a^*)(y + \mathcal{I}) \rangle &= \langle x + \mathcal{I}, a^*y + \mathcal{I} \rangle = \overline{f(y^*ax)} \\ &= \langle ax + \mathcal{I}, y + \mathcal{I} \rangle \\ &= \langle \pi_f(a)(x + \mathcal{I}), y + \mathcal{I} \rangle\,.\end{aligned}$$

Iz jedinstvenosti adjungiranog operatora slijedi $\pi_f(a)^* = \pi_f(a^*)$. Sve tvrdnje se prenose na prošireni $\pi_f(a)$ promatrajući nizove. Stavljajući $e = 1 + \mathcal{I}$ dobivamo ciklički vektor reprezentacije i formula $f(a) = \langle e, \pi_f(a)e\rangle$ je očita. Time smo pokazali prvu točku teorema.

Neka su $(\pi, \mathcal{H})$, e i f kao u pretpostavci i $(\pi_f, \mathcal{H}_f)$ kao u prvom dijelu dokaza te e_f ciklički vektor reprezentacije π_f. Za svaki $a \in \mathcal{A}$ imamo $f(a) = \langle e_f, \pi_f(a)e_f\rangle = \langle e, \pi(a)e\rangle$. Stoga je

$$||\pi(a)e||^2 = \langle \pi(a)e, \pi(a)e\rangle = \langle e, \pi(a^*a)e\rangle = \langle e_f, \pi_f(a^*a)e_f\rangle = \langle \pi_f(a)e_f, \pi_f(a)e_f\rangle = ||\pi_f(a)e_f||^2 .$$

Definirajmo linearan operator $U : \pi_f(\mathcal{A})e_f \longrightarrow \mathcal{A}/\mathcal{I}$ s $U\pi_f(a)e_f = \pi(a)e$. Prema upravo dokazanom, U je izometrija. Kako je po definiciji cikličkog vektora $\pi_f(\mathcal{A})e_f$ gust u $\mathcal{H}_f$, U se proširuje do izomorfizma između $\mathcal{H}_f$ i $\mathcal{H}$. Kako su π i π_f homomorfizmi, za sve $a, x \in \mathcal{A}$ imamo

$$U\pi_f(a)\pi_f(x)e_f = \pi(ax)e = \pi(a)U\pi_f(x)e_f .$$

Ako jednakost vrijedi na gustom podskupu, vrijedit će i na cijelom $\mathcal{H}_f$. Stoga imamo $\pi(a)U = U\pi_f(a)$ te su π i π_f ekvivalentne. □

Konačno iskazujemo glavni rezultat ovog odjeljka: *Gelfand-Naimarkov teorem.* Glavna oružja dokaza su upravo dokazana GNS-konstrukcija i teorem 9, no koriste se i neki pojmovi koje nismo pokrili u ovom radu, pa ga izostavljamo. Vidjeti [6].

Teorem 11. (Gelfand-Naimarkov teorem) *Neka je $\mathcal{A}$ separabilna unitalna C^*-algebra. Tada postoji separabilan Hilbertov prostor $\mathcal{H}$ takav da*

- *Postoji izometrični *-izomorfizam $\pi : \mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$,*
- *ψ je stanje u $\mathcal{A}$ akko postoji pozitivan $\Psi \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ traga 1 takav da je $\psi(a) = \mathrm{Tr}\,(\Psi\pi(a))$.*

Zadnja točka je upravo očekivanje opservable a, ekvivalentno operatora $\pi(a)$, u miješanom stanju ψ određenim operatorom gustoće Ψ.

5. Zaključni komentari

Još jednom ponavljamo da je mnogo toga ostalo nedorečenog. Kanonske komutacijske relacije, Schrödingerova jednadžba i Bornovo pravilo nisu doticane. Međutim, opisani su najosnovniji aspekti strukture kvantne mehanike.

Primjetimo da Dirac-von Neumannovi aksiomi ovdje iskazani automatski zadovoljavaju aksiome 1 i 2. Što smo onda zapravo postigli? Oslanjajući se na par jednostavnih, intuitivnih principa, iz klasične mehanike destilirali smo topološku i algebarsku strukturu koja opisuje opservable i stanja te njihov odnos. Neke od tih principa zamijenili smo novim principima koje je, koliko je to moguće, sugerirala eksperimentalna realnost. Dobivena je nova, vrlo malo izmijenjena struktura koja rezultira starim kvantno mehaničkim aksiomima. Može se i reći da smo kvantnu mehaniku "ogolili" do strukture koja je u bliskoj poveznici s klasičnom mehanikom.

Literatura

[1] N. Bohr *Atomic Theory and the Description of Nature* Cambridre at the University Press, 1961.
[2] J.B. Conway *A Course in Abstract Analysis* American Mathematical Society, 2013.
[3] J.B. Conway *A Course in Functional Analysis* Springer-Verlag, New York, 1990.
[4] P.A.M. Dirac *The Principles of Quantum Mechanics* Oxford University Press, USA, 1967.
[5] A. Drago *Is the C^*-algebraic Approach to Quantum Mechanics an Alternative Formulation to the Dominant One?* Advances in Historical Studies, 7, 58-78., 2018.
[6] J.J. Gleason *The C^*-algebraic formalism of quantum mechanics* 2009. `https://www.math.uchicago.edu/~may/VIGRE/VIGRE2009/REUPapers/Gleason.pdf`
[7] I. Gogić *Odabrana poglavlja teorije operatorskih algebri* PMF-Matematički odsjek, Zagreb (interna skripta) 2017. `http://https://web.math.pmf.unizg.hr/~ilja/OPTOA.pdf`
[8] W. Heisenberg *Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen* Zeitschrift für Physik. 33 (1): 879–893., 1925. U prijevodu: *Quantum-Theoretical Re-interpretation of Kinematic and Mechanical Relations*
[9] L. Landau, E.M. Lifshitz *Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory: Vol. 3 of Course of Theoretical Physics.* 3 ed. Pergamon Press, 1991.
[10] I. Segal *Postulates for General Mechanics* Annals of Mathematics, Second Series, Vol. 48, No. 4, 930-948., 1947.
[11] F. Strocchi *An Introduction to Quantum Mechanics: A Short Course for Mathematicians* Toh Tuck Link, Singapore: World Scientific Publishing Co., 2005.
[12] J. von Neumann *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* Princeton University Press, 1932.