České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Kvantové systémy se smíšenou dimensionalitou

Quantum systems of a mixed dimensionality

Bakalářská práce

Autor: **Adam Gottfried**

Vedoucí práce: **prof. RNDr. Pavel Exner, DrSc.**

Akademický rok: 2021/2022

Poděkování:
Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli prof. RNDr. Pavlu Exnerovi, DrSc. za pečlivost, ochotu, vstřícnost a odborné i lidské zázemí při vedení mé bakalářské práce.

Čestné prohlášení:
Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci vypracoval samostatně a použil jsem pouze podklady (literaturu, projekty, SW atd. . .) uvedené v přiloženém seznamu.

Nemám závažný důvod proti použití tohoto školního díla ve smyslu §60 Zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon).

V Praze dne . . . . Adam Gottfried

Název práce:

Kvantové systémy se smíšenou dimensionalitou

Autor: Adam Gottfried

Obor: Matematické inženýrství

Zaměření: Matematická fyzika

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: prof. RNDr. Pavel Exner, DrSc., Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze, Katedra fyziky a oddělení teoretické fyziky Ústavu jaderné fyziky AV ČR, v.v.i.

Abstrakt: V této práci se zabýváme kvantovými systémy kombinujícími dimenze jedna a tři. Konkrétně se zabýváme systémem složeným z polopřímky a poloprostoru a systémem složeným z konečné třídimenzionální variety, ke které jsou připojeny dvě polopřímky. Popisujeme konstrukci samosdruženého Hamiltoniánu na těchto systémech, rozptyl a v případě poloprostoru i spektrum a resolventu Hamiltoniánu.

Klíčová slova: Rezolventa, rozptyl, samosdružená rozšíření, spektrum

Title:

Quantum systems of a mixed dimensionality

Author: Adam Gottfried

Abstract: In this work we concern ourselves with quantum systems combining dimesnions one and three. Specifically we explore a system made up of a halfline and a halfspace and a system made up of finite three dimensional manifold with two halflines connected to it. We describe the construction of self-adjoint Hamiltonian, scattering and in the case of the halfspace we also describe the spectrum and the resolvent of the Hamiltonian.

Key words: Resolvent, scattering, self-adjoint extensions, spectrum

Obsah

Úvod

Ve fyzice se často můžeme setkat s případy, kdy se konfigurační prostor naší úlohy skládá z více částí, jejichž dimenze jsou odlišné. Příkladem takového systému může být nanodrát připojený ke kvantové tečce. Pohyb částice v tomto systému je ze zřejmých důvodů nutno popisovat z pohledu kvantové fyziky. Nabízí se proto, ptát se na otázky s kvantovým popisem spojené, jako je spektrum a rezolventa Hamiltoniánu nebo rozptyl na kontaktním bodu.

Tyto systémy lze geometricky chápat jako sestávající z variet různých dimenzí, které jsou na sebe navzájem napojeny pomocí nějaké okrajové podmínky. Existující literatura zabývající se systémy smíšené dimenze se zpočátku zaměřovala převážně na kombinaci dimenzí jedna a dva. V tomto ohledu zmíníme [12] a [15]. K těmto účelům byla využívána teorie samosdružených rozšíření. Pomocí této teorie se dále podařilo popsat složitější systémy [4][16][7] včetně těch, které se již zabývaly i kombinací dimenzí tři a jedna [10][5].

Teorie samosdružených rozšíření se ukázala být užitečným nástrojem pro popis širší třídy fyzikálních problémů. Jedná se zejména o popis variet stejné dimenze oddělených tenkou vrstvou [11][14] nebo rozptylu na geometricky netriviálních systémech [8][17][6] včetně kvantových grafů [2]. Dále našla teorie samosdružených rozšíření uplatnění v popisu bodových interakcí. Veškeré důležité výsledky v tomto odvětví jsou důkladně rozepsány v [1].

Výše zmíněné pokroky v teoretickém popisu nacházejí široké využití v oblasti nanotechnologií nebo kvantové spektroskopii bodových kontaktů [13]. Kvantové grafy zase našly využití jako vhodný model pro některé druhy molekul.

Tato práce se bude zabývat kombinací dimenzí jedna a tři. Práce je strukturována do tří kapitol. V první kapitole vyslovíme několik základních vět a tvrzení týkajících se teorie samosdružených rozšíření, jejich spektra a jejich rezolventy. V druhé kapitole bude popsána konstrukce samosdružených rozšíření na polopřímce připojené k poloprostoru, parametrizace okrajových podmínek v bodě napojení, spektrum jednotlivých rozšíření, jejich rezolventa a rozptyl. V poslední kapitole se zaměříme na aplikaci poznatků z druhé kapitoly k prozkoumání rozptylu na systému tvořeném trojrozměrnou varietou a dvěma polopřímkami k ní připojenými.

Kapitola 1

Shrnutí teoretických poznatků

V kvantové fyzice přiřazujeme pozorovatelným samosdružené operátory odpovídající jejich klasickým protějškům podle principu korespondence, pokud klasický protějšek existuje. Princip korespondence ovšem udává pouze diferenciální symbol operátoru, a ne jeho definiční obor. V případě, kdy operátor získaný principem korespondence není samosdružený, je třeba zkonstruovat jeho samosdružená rozšíření. K tomu lze využít teorii, kterou John von Neumann představil v [18]. S touto teorií se zde blíže seznámíme.

1.1 Von Neumannova teorie samosdružených rozšíření

Budeme se zabývat pouze uzavřenými symetrickými operátory. Pokud by operátor, se kterým pracujeme nebyl uzavřený, vezmeme místo něj jeho uzávěr, který bude také symetrický. Dále uvedeme několik výsledků důležitých pro konstrukci samosdružených rozšíření.

Věta 1. *[19, Theorem X.1] Mějme symetrický uzavřený operátor A na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$. Potom platí:*

a) $\dim[Ker(\lambda I - A^*)]$ *je konstantní na množině* $\{\lambda | \operatorname{Im} \lambda > 0\}$

b) $\dim[Ker(\lambda I - A^*)]$ *je konstantní na množině* $\{\lambda | \operatorname{Im} \lambda < 0\}$

c) A je samosdružený právě když dimenze v a) a b) jsou obě nula

d) A je samosdružený právě když $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$

Dimenze z a) a b) mají v teorii samosdružených rozšíření důležitou roli a proto pro ně definujeme samostatný pojem.

Definice. *(Indexy defektu) Budiž A symetrický uzavřený operátor, pak indexy defektu definujeme jako*

$$n_+(A) := \dim[Ker(i - A^*)]$$

$$n_-(A) := \dim[Ker(i + A^*)]$$

Operátor je maximální, právě když je jeden z jeho indexů defektu roven nule [18, Satz 33].

Věta 2. *[3, Věta 8.3.1]*

a) Uzavřený symetrický operátor A má uzavřené symetrické rozšíření $A' \neq A$ právě tehdy, když jsou oba indexy $n_\pm(A)$ defektu nenulové *b) Nutnou a postačující podmínkou existence samosdruženého rozšíření je rovnost indexů defektu*

c) Nechť $n_+(A) = d = n_-(A)$; jestliže $d < \infty$ pak je každé maximální rozšíření samosdružené. V opačném případě existují nesamosdružená rozšíření.

Věta 3. *[3, Věta 8.1.8](První von Neumannova formlue) Budiž A uzavřený symetrický operátor. Pak pro každé $x \in D(A^*)$ existuje jednoznačný rozklad*

$$x = x_0 + x_+ + x_- \,, \tag{1.1}$$

kde $x \in D(A)$ a $x_\pm \in Ker(i \pm A^*)$

Definice. *(Cayleyova transformace) Pro každý symetrický operátor A definujeme jeho Cayleyovu transformaci $C(A)$ jako*

$$C(A) := (A - i)(A + i)^{-1} \qquad D(C(A)) = Ran(A + i)$$

Věta 4. *[22, Theorem 2.25] Cayleyova transformace je bijekce mezi množinou symetrických operátorů A a množinou izometrických operátorů V, pro které je $Ran(1 - V)$ hustá množina*

Pomocí Cayleyovy transformace můžeme tedy úlohu hledání symetrických rozšíření A přeformulovat jako úlohu hledání izometrických rozšíření $V = C(A)$. Tuto úlohu nám pomůže řešit následující tvrzení

Tvrzení 1. *[3, Tvrzení 8.2.5] Buď A uzavřený symetrický operátor a V jeho Cayleyův obraz. Aby byl operátor $V' \supset V$ Cayleyovým obrazem nějakého uzavřeného symetrického rozšíření $A' \supset A$ je nutné a stačí aby současně platilo*

(i) existují uzavřené podprostory $\mathcal{G}_\pm \subset Ran(A \pm i)^\perp$ takové, že

$$\dim \mathcal{G}_+ = \dim \mathcal{G}_- > 0 \tag{1.2}$$

(ii)

$$D(V') = Ran(A + i) \oplus \mathcal{G}_+, \quad RanV' = Ran(A - i) \oplus \mathcal{G}_- \tag{1.3}$$

(iii) pro každé $x \in D(V')$ tvaru $x = y + z$, kde $y \in Ran(A + i)$ a $z \in \mathcal{G}_+$ platí

$$V'x = V(y) + \hat{V}z \,, \tag{1.4}$$

kde $\hat{V}$ je nějaký izometrický operátor zobrazující $\mathcal{G}_+$ na $\mathcal{G}_-$.

Platí-li navíc $\dim \mathcal{G}_+ = \dim \mathcal{G}_- = d < \infty$, pak $n_\pm(A') = n_\pm(A) - d$

Věta 5. *[3, Věta 8.3.2](Druhá von Neumannova fomule) Nechť $A', A, V', V, \hat{V}$ jsou operátory z předchozího tvrzení. Pak ke každému $y' \in D(A')$ existují právě jedno $y \in D(A)$ a $x \in \mathcal{G}_+$ tak, že*

$$y' = y + (I - \hat{V})x \tag{1.5}$$

$$A'y' = Ay + i(I + \hat{V})x \tag{1.6}$$

Mějme nyní situaci, kdy $\dim \mathcal{G}_+ = d = \dim \mathcal{G}_- < \infty$. Zvolíme ortonormální báze $\{v_k\}_{k=1}^d \subset \mathcal{G}_+$ a $\{w_k\}_{k=1}^d \subset \mathcal{G}_-$. Izometrické zobrazení $\hat{V}$ lze v těchto bazích reprezentovat unitární maticí $\mathbb{U}$ velikosti $d \times d$. Druhou von Neumannovu formuli lze tedy vyjádřit jako

$$y' = y + \sum_{k=1}^{d} \alpha_k \Big(v_k - \sum_{j=1}^{d} u_{jk} w j \Big) \tag{1.7}$$

$$A'y' = Ay + i\sum_{k=1}^{d}\alpha_k\Big(v_k + \sum_{j=1}^{d}u_{jk}wj\Big)\,, \tag{1.8}$$

kde u_{jk} jsou prvky matice $\mathbb{U}$ a $\mathcal{G}_+ \ni x = \sum_{k=1}^{d}\alpha_k v_k$

Speciálně v případě, kdy indexy defektu $n_\pm(A) = d$ je A' samosdružené rozšíření, které je s obousměrnou jednoznačností určeno maticí $\mathbb{U}$ [3].

1.2 Spektrum a rezolventa

V této části shrneme některé poznatky užitečné pro hledání spektra a rezolventy samosružených rozšíření

Tvrzení 2. *[3, Tvrzení 8.4.1] Nechť A je uzavřený symetrický operátor s konečnými indexy defektu (n, n) a A' je jeho uzavřené symetrické rozšíření. Jestliže je λ vlastní hodnotou A' s konečnou násobností $\nu_{A'}(\lambda)$ pak platí*

$$\nu_{A'}(\lambda) \le \nu_A(\lambda) + n\,, \tag{1.9}$$

kde $\nu_A(\lambda)$ je násobnost λ ve spektru oparátoru A.

Věta 6. *[1, Theorem A.2](Kreinova formule pro indexy defektu $n = 1$) Nechť A je symetrický, uzavřený operátor s indexy defektu $(1, 1)$ a B, C jsou jeho samosdružená rozšíření. Pak pro $z \in \rho(B) \cap \rho(C)$ platí*

$$(B - z)^{-1} - (C - z)^{-1} = \lambda(z)(\overline{\varphi_z}, \cdot)\varphi_z \tag{1.10}$$

pro $\varphi_z, \lambda(z)$ splňující

$$\varphi_z = \varphi_+ + (z - i)(C - z)^{-1}\varphi_+ \tag{1.11}$$

$$\lambda(z)^{-1} = \lambda(z')^{-1} - (z - z')(\varphi_{\bar{z}}, \varphi_{z'})\,, \tag{1.12}$$

kde $\varphi_+ \in Ker(A^* - i)$ a $z' \in \rho(B) \cap \rho(C)$

Věta 7. *[1, Theorem A.3](Kreinova formule pro indexy defektu $n > 1$) Nechť A je symetrický, uzavřený operátor s indexy defektu $(n, n), n > 1$ a B, C jsou jeho samosdružená rozšíření. Dále nechť A' je největší společná část B a C, tedy A' je maximální operátor s vlastností $B \supset A' \subset C$. Pak pro $z \in \rho(B) \cap \rho(C)$ platí*

$$(B - z)^{-1} - (C - z)^{-1} = \sum_{m,n=1}^{M}\lambda_{mn}(z)(\overline{\varphi_{n,z}}, \cdot)\varphi_{m,z} \tag{1.13}$$

pro $\varphi_{m,z}$ splňující

$$\varphi_{m,z} = \varphi_{m,+} + (z - i)(C - z)^{-1}\varphi_{m,+}\,, \tag{1.14}$$

kde $\varphi_{m,+}$ tvoří bázi $Ker(A^* - i)$ a $\lambda(z)$ je regulární matice a její inverze splňuje

$$[\lambda(z)]^{-1}_{mn} = [\lambda(z')]^{-1}_{mn} - (z - z')(\varphi_{n,\bar{z}}, \varphi_{m,z'}) \tag{1.15}$$

Kapitola 2

Polopřímka a poloprostor

V této kapitole blíže popíšeme konfigurační prostor G tvořený polopřímkou připojenou k poloprostoru v bodě P. Hilbertův prostor v tomto případě bude tvaru

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}_-) \oplus L^2(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_+)$$

Na jednotlivých částech G definujeme následující operátory

$$H_{0,1} = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \tag{2.1}$$

$$\begin{aligned} D(H_{0,1}) = \{ & f \in L^2(\mathbb{R}_-) | f'' \in L^2(\mathbb{R}_-) \wedge \\ & f = 0 \text{ na nějakém okolí } 0\} \end{aligned} \tag{2.2}$$

$$H_{0,2} = -\triangle \tag{2.3}$$

$$\begin{aligned} D(H_{0,2}) = \{ & f \in L^2(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_+) | \triangle f \in L^2(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_+) \wedge \\ & f = 0 \text{ na nějakém okolí } P\} \end{aligned} \tag{2.4}$$

Pro G jako celek máme

$$H_0 = H_{0,1} \oplus H_{0,2} \tag{2.5}$$

Jak ukážeme, H_0 není samosdružený. K nalezení defektních indexů $H_{0,1}$ je třeba vyřešit tyto diferenciální rovnice pro f_1

$$H_{0,1}^* f_1 = -\frac{\mathrm{d}^2 f_1}{\mathrm{d}x^2} = \pm \mathrm{i} f_1 \tag{2.6}$$

Jedná se o diferenciální rovnice druhého řádu a každá bude tedy mít dvě lineárně nezávislá řešení. My ale hledáme pouze řešení z $L^2(\mathbb{R}^-)$. Tato podmínka nám zanechá funkce

$$f_1^{(+)} = \exp\Big((-1 + \mathrm{i})x/\sqrt{2}\Big) \;\; f_1^{-} = \exp\Big((-1 - \mathrm{i})x/\sqrt{2}\Big) \tag{2.7}$$

Z toho plyne, že defektní indexy $H_{0,1}$ jsou

$$n_+(H_{0,1}) = 1 = n_-(H_{0,1}) \tag{2.8}$$

$H_{0,1}$ tedy není samosdružený, a jako důsledek ani H_0 není samosdružený

K určení indexů defektu operátoru $H_{0,2}$ nejprve přejdeme ke sférickým souřadnicím se středem v P, čímž se prostor funkcí na G rozloží následujícím způsobem

$$L^2(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}y\, \mathrm{d}z) = L^2(\mathbb{R}^+, r^2\, \mathrm{d}r) \otimes L^2(S_+, \mathrm{d}\Omega)\,, \tag{2.9}$$

kde

$$S_+ = [0, 2\pi) \times [0, \pi/2] \quad \mathrm{d}\Omega = \sin(\theta)\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta \tag{2.10}$$

Hamiltonián na poloprostoru se transformuje do následující podoby

$$H_{0,2} f = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2 \sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin(\theta)\frac{\partial f}{\partial \theta}\right) - \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)}\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \tag{2.11}$$

Tento výraz lze zapsat pomocí kvadrátu orbitálního momentu hybnosti jako

$$H_{0,2} f = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{r^2 \hbar^2} \tag{2.12}$$

Funkci na poloprostoru zapíšeme jako kombinaci funkcí ve tvaru

$$f(r, \theta, \varphi) = g(r) k_{lm}(\theta, \varphi)\ , \tag{2.13}$$

kde $k_{lm} := Y_{lm}(\theta, \varphi)|_{S^+}$ jsou vlastní funkce L^2 pro vlastní hodnoty $\hbar^2 l(l+1)$ zúžené na poloprostor, které tvoří ortonormální bázi $L^2(S_+, \mathrm{d}\Omega)$. [14] Za pomoci tohoto faktu lze dále rozložit funkce na poloprostoru následujícím způsobem

$$L^2(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_+, \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} L^2(\mathbb{R}^+, r^2\,\mathrm{d}r) \otimes [k_{lm} | m \in \{-l, -l+2, ..., l\}]_\lambda \tag{2.14}$$

$$H_{0,2} = \bigoplus_{l=0}^{\infty} h_l \otimes I\ , \tag{2.15}$$

kde

$$h_l g = -\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2 \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}r}\right) + \frac{l(l+1)}{r^2} g \tag{2.16}$$

Lze dokázat, že pokud

$$l(l+1) \geq \frac{3}{4}\ , \tag{2.17}$$

potom je h_l v podstatě samosdružený. To znamená, že jediné netriviální rozšíření lze provést na h_0 komponentě, která má defektní indexy $n_-(h_0) = 1 = n_+(h_0)$ [19, Theorem X.10]. Nyní máme

$$n_\pm(H_0) = n_\pm(H_{0,1}) + n_\pm(H_{0,2}) = 2 \tag{2.18}$$

Řešením rovnice

$$h_0^* f_2 = -\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2 \frac{\mathrm{d}f_2}{\mathrm{d}r}\right) = \pm \mathrm{i} f_2 \tag{2.19}$$

dostaneme společně s podmínkou na kvadratickou integrabilitu bazické funkce defektních podprostorů h_0

$$f_2^{(+)} = \frac{1}{r}\exp\Big((-1+\mathrm{i})r/\sqrt{2}\Big) \quad f_2^{(-)} = \frac{1}{r}\exp\Big((-1-\mathrm{i})r/\sqrt{2}\Big) \tag{2.20}$$

Máme tedy rozklad

$$H_0 = H_{0,1} \oplus (h_0 \otimes I) \oplus \left(\bigoplus_{l=1}^{\infty} (h_l \otimes I)\right) \tag{2.21}$$

Samosdružené rozšíření bude mít tvar

$$H = K \oplus \overline{\left(\bigoplus_{l=1}^{\infty} (h_l \otimes I)\right)}\ , \tag{2.22}$$

kde K je samosdružené rozšíření $H_{0,1} \oplus (h_0 \otimes I)$ charakterizované defektními podprostory $\mathcal{K}_\pm$ dimenze dva s bázemi

$$\begin{aligned} \varphi_1^{(+)} &= (f_1^{(+)}, 0)\,,\ \varphi_2^{(+)} = (0, f_2^{(+)}) \\ \varphi_1^{(-)} &= (f_1^{(-)}, 0)\,,\ \varphi_2^{(-)} = (0, f_2^{(-)}) \end{aligned} \tag{2.23}$$

Pomocí těchto bazí můžeme zapsat funkci $f \in D(K)$ jako

$$f = \psi + c_1(\varphi_1^{(+)} + u_{11}\varphi_1^{(-)} + u_{12}\varphi_2^{(-)}) + c_2(\varphi_2^{(+)} + u_{21}\varphi_1^{(-)} + u_{22}\varphi_2^{(-)})\,, \tag{2.24}$$

kde $\psi \in D(K_0)$ a parametry u_{ij} tvoří unitární matici $\mathbb{U}$. Dále ukážeme, jak tato unitární matice určuje okrajovou podmínku v P.

2.1 Okrajové podmínky

Samosdružené rozšíření operátoru K_0 můžeme charakterizovat pomocí čtyř volných parametrů tvořících unitární matici. Tato volba se odrazí v chování systému na okolí bodu P. Mějme operátor $K_{\mathbb{U}}$ určený maticí $\mathbb{U}$. Víme, že $K_0 \subset K_{\mathbb{U}}$ a $K_{\mathbb{U}}$ je samosdružený. Z toho plyne, že

$$K_{\mathbb{U}} = K_{\mathbb{U}}^* \subset K_0^* \tag{2.25}$$

Jelikož známe, jak působí K_0^*, víme, že $K_{\mathbb{U}}$ bude působit na funkci $f \in D(K_{\mathbb{U}})$ jako

$$K_{\mathbb{U}} f = \left(-\frac{d^2 f_1}{dx^2}, -\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{df_2}{dr}\right)\right) \tag{2.26}$$

Protože funkce $\varphi_2^{(\pm)}$ mají v bodě P singularitu, definujeme regularizované okrajové podmínky následujícím způsobem [14]

$$\begin{aligned} L_0(\varphi) &= \lim_{r\to 0+} r\varphi(r) \\ L_1(\varphi) &= \lim_{r\to 0+} \left(\varphi(r) - \frac{L_0(\varphi)}{r}\right) \end{aligned} \tag{2.27}$$

Konkrétně pro funkce (2.20) jsou tyto podmínky rovny

$$\begin{aligned} L_0(f_2^{(+)}) &= 1 = L_0(f_2^{(-)}) \\ L_1(f_2^{(+)}) &= -\frac{1-i}{\sqrt{2}} =: w \\ L_1(f_2^{(-)}) &= -\frac{1+i}{\sqrt{2}} = \overline{w} \end{aligned} \tag{2.28}$$

Nejprve prozkoumáme případ, kdy je $\mathbb{U}$ diagonální, tj.

$$\mathbb{U} = \begin{pmatrix} e^{i\omega_1} & 0 \\ 0 & e^{i\omega_2} \end{pmatrix}\,, \tag{2.29}$$

kde $\omega_{1,2} \in (-\pi, \pi]$. Mějme libovolnou funkci $f = (\varphi_1, \varphi_2) \in D(K_{\mathbb{U}})$. V tomto případě dostáváme

$$\begin{aligned} \varphi_1(0-) &= 1 + e^{i\omega_1} \\ L_0(\varphi_2) &= 1 + e^{i\omega_2} \\ \varphi_1'(0-) &= w + \overline{w}e^{i\omega_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tan(\omega_1/2) - 1)\varphi_1(0-) \\ L_1(\varphi_2) &= w + \overline{w}e^{i\omega_2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tan(\omega_2/2) - 1)L_0(\varphi_2)\,, \end{aligned} \tag{2.30}$$

kde využíváme zkráceného zápisu

$$\varphi_1(0-) = \lim_{x\to 0-} \varphi_1(x),\ \varphi_1'(0-) = \lim_{x\to 0-} \frac{\mathrm{d}\varphi_1(x)}{\mathrm{d}x}$$

Pro speciální případy, kdy $\omega_1 = \pi$ resp. $\omega_2 = \pi$ nebo obojí, dostáváme $\varphi_1(0-) = 0$ $\varphi_1'(0-) = \mathrm{i}\sqrt{2}$ resp. $L_0(\varphi_2) = 0$ $L_1(\varphi_2) = \mathrm{i}\sqrt{2}$ nebo obojí. Tato parametrizace je zřejmě injektivní, tj. každá sada okrajových podmínek odpovídá nejvýše jedné unitární matici. Okrajové podmínky nám udávají chování funkcí na okolí bodu P. Charakterizují tak definiční obor operátoru, do kterého patří pouze funkce, které tyto podmínky splňují. Charakterizace pomocí okrajových podmínek je ekvivalentní popisu pomocí unitárních matic, pokud je vztah přiřazující unitární matici okrajové podmínky injektivní. Jelikož řešíme rovnice druhého řádu, potřebujeme dvě rovnice udávající okrajové podmínky. Obecně lze tedy zapsat okrajové podmínky pro funkci $\phi = (\varphi_1(x), \varphi_2(r))$ jako lineární soustavu

$$(\mathbb{I} + \mathbb{U})\phi + \mathrm{i}(\mathbb{I} - \mathbb{U})\phi' = 0\,, \tag{2.31}$$

kde

$$\phi := \begin{pmatrix} \varphi_1(0-) \\ L_0(\varphi_2) \end{pmatrix},\ \phi' := \begin{pmatrix} \varphi_1'(0-) \\ L_1(\varphi_2) \end{pmatrix}$$

Pokud lze jedna z matic invertovat, je možné přenásobit tuto podmínku onou inverzí a získat podmínku speciálního tvaru. tyto speciální tvary si ukážeme.

Uvažujme případ, kdy je $\mathbb{U}$ nediagonální.

Tvrzení 3. *Každé samosdružené rozšíření operátoru H_0 je tvaru $H_\mathbb{U} = K_\mathbb{U} \oplus \overline{\left(\bigoplus_{l=1}^{\infty}(h_l \otimes I)\right)}$ a operátor $K_\mathbb{U}$ je jednoznačně určen okrajovou podmínkou pro $f = (\varphi_1, \varphi_2) \in D(K_\mathbb{U})$. Pokud je v nediagonální člen $u_{21} \neq 0$, je tato podmínka určena vztahy.*

$$L_0(\varphi_2) = A\varphi_1(u-) + B\varphi_1'(0-) \tag{2.32}$$

$$L_1(\varphi_2) = C\varphi_1(0-) + D\varphi_1'(0-)\,, \tag{2.33}$$

kde koeficienty A, B, C, D jsou určeny prvky $\mathbb{U}$

$$A = \frac{w(1 + u_{22}) + \overline{w}(u_{11} + \det \mathbb{U})}{iu_{21}\sqrt{2}} \tag{2.34}$$

$$B = -\frac{1 + u_{11} + u_{22} + \det \mathbb{U}}{iu_{21}\sqrt{2}} \tag{2.35}$$

$$C = \frac{\overline{w}^2 \det \mathbb{U} + w(w + \overline{w}u_{11} + \overline{w}u_{22})}{iu_{21}\sqrt{2}} \tag{2.36}$$

$$D = -\frac{w(1 + u_{11}) + \overline{w}(u_{22} + \det \mathbb{U})}{iu_{21}\sqrt{2}}, \tag{2.37}$$

kde $w = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{3\pi}{4}}$

Důkaz. Tvar samosdruženého rozšíření byl ukázán na začátku kapitoly. Z rovnice (2.24) dostaneme pro volby $c_1 = 1,\ c_2 = 0$ a $c_1 = 0,\ c_2 = 1$ dosazením do rovnic (2.32) a (2.33) soustavu lineárních rovnic

$$\begin{aligned} u_{12} &= A(1 + u_{11}) + B(w + u_{11}\overline{w}) \\ 1 + u_{22} &= Au_{21} + Bu_{21} \\ u_{12\overline{w}} &= C(1 + u_{11}) + B(w + u_{11}\overline{w}) \\ w + u_{22} &= Cu_{21} + Du_{21}\,, \end{aligned} \tag{2.38}$$

kde jsme využili $f_1^{(+)}(0-) = 1 = f_1^{(-)}(0-)$ a $f_1'^{(+)}(0-) = w = \overline{f_1'^{(+)}(0-)}$. Řešením této soustavy získáme závislost koeficientů A, B, C, D na prvcích matice $\mathbb{U}$.

Dále je třeba ukázat, že tento způsob přiřazení okrajové podmínky unitární matici je injektivní. Pro diagonální případ to je zřejmé z injektivity funkce tangens na $(-\pi/2, \pi/2)$. Pro nediagonální případ to ukážeme sporem. Předpokládejme tedy, že existují dvě různé unitární matice $\mathbb{U}$ a $\mathbb{U}'$ a platí $A = A'$, $B = B'$, $C = C'$ a $D = D'$. Tedy

$$\begin{aligned} w(1 + u'_{22}) + \overline{w}(u'_{11} + \det\mathbb{U}') &= \gamma[w(1 + u_{22}) + \overline{w}(u_{11} + \det\mathbb{U})] \\ 1 + u'_{11} + u'_{22} + \det\mathbb{U}' &= \gamma[1 + u_{11} + u_{22} + \det\mathbb{U}] \\ \overline{w}^2\det\mathbb{U}' + w(w + \overline{w}u'_{11} + \overline{w}u'_{22}) &= \gamma[\overline{w}^2\det\mathbb{U} + w(w + \overline{w}u_{11} + \overline{w}u_{22})] \\ w(1 + u'_{11}) + \overline{w}(u'_{22} + \det\mathbb{U}') &= \gamma[w(1 + u_{11}) + \overline{w}(u_{22} + \det\mathbb{U})]\ , \end{aligned} \tag{2.39}$$

kde $\gamma = \frac{u'_{21}}{u_{21}}$. Vhodnou kombinací těchto rovnic, konkrétně

$$\frac{-\overline{w}(w + \overline{w})}{w - \overline{w}}A - \frac{\overline{w}^2(w + \overline{w})}{w - \overline{w}}B - C + \frac{\overline{w}(w + \overline{w})}{w - \overline{w}}D \tag{2.40}$$

dostaneme rovnici

$$-w^2\overline{w}^2 = \gamma[-w^2\overline{w}^2] \tag{2.41}$$

tedy $\gamma = 1 \Leftrightarrow u'_{21} = u_{21}$. Dále kombinacemi $A + \overline{w}B$ a $D - \overline{w}B$ dostaneme rovnice

$$\begin{aligned} 1 + u'_{22} &= \gamma[1 + u_{22}] = 1 + u_{22} \\ 1 + u'_{11} &= \gamma[1 + u_{11}] = 1 + u_{11} \end{aligned} \tag{2.42}$$

ze kterých je zřejmé, že $u'_{11} = u_{11}$ a $u'_{22} = u_{22}$. Pokud tyto tři výsledky dosadíme do libovolné z rovnic (2.39) dostaneme $\det\mathbb{U}' = \det\mathbb{U}$ a tedy $u_{12} = u_{12} \Rightarrow \mathbb{U}' = \mathbb{U}$, což je spor. □

Alternativně je možné okrajovou podmínku získat přímo bez parametrizace pomocí unitárních matic. To provedeme tak, že klademe podmínku na H, které je rozšířením H_0. Jelikož víme, že $H^* \subset H_0^*$, bude mít podmínka tvar

$$(\phi, H_0^*\psi) - (H_0^*\phi, \psi) = 0 \tag{2.43}$$

pro všechna $\phi, \psi \in D(H^*) = D(H)$. Jak jsme ukázali na začátku této kapitoly, stačí za ϕ_2, ψ_2 uvažovat funkce závisející pouze na vzdálenosti r od bodu P (tj. $\psi_2(r) = k_{00}(\theta, \varphi)g(r) = \frac{g(r)}{\sqrt{2\pi}}$), na které operátor H_0^* působí jako h_0. Pomocí integrace per partes se tato podmínka zredukuje na

$$\begin{aligned} &[\overline{\phi_1(x)}\psi'_1(x)]_{-\infty}^0 - [\overline{\phi'_1(x)}\psi_1(x)]_{-\infty}^0 \\ &+[r^2\overline{\phi_2(r)}\psi'_2(r)]_0^{+\infty} - [r^2\overline{\phi'_2(r)}\psi_2(r)]_0^{+\infty} = 0 \end{aligned} \tag{2.44}$$

Jelikož požadujeme, aby funkce byly absolutně spojité, víme, že limity v nekonečnu budou existovat. Z podmínky kvadratické integrability dále plyne, že tyto limity budou nula a zbyde podmínka

$$\begin{aligned} &\overline{\phi_1(0-)}\psi'_1(0-) - \overline{\phi'_1(0-)}\psi_1(0-) \\ &+ \lim_{r\to 0+} r^2[\overline{\phi'_2(r)}\psi_2(r) - \overline{\phi_2(r)}\psi'_2(r)] = 0 \end{aligned} \tag{2.45}$$

Využijeme-li asymptotický popis pomocí (2.27) tj.

$$\varphi_2(r) = \frac{L_0(\varphi_2)}{r} + L_1(\varphi_2) + O(r) \tag{2.46}$$

$$\varphi_2'(r) = -\frac{L_0(\varphi_2)}{r^2} + O'(r)\,, \tag{2.47}$$

dostaneme finální podmínku ve tvaru

$$\overline{\phi_1(0-)}\psi_1'(0-) - \overline{\phi_1'(0-)}\psi_1(0-) + \overline{L_1(\phi_2)}L_0(\psi_2) - \overline{L_0(\phi_2)}L_1(\psi_2) = 0 \tag{2.48}$$

Dosazením za L_0 a L_1 z (2.32) a (2.33) dostaneme podmínku na koeficienty A, B, C, D

$$\begin{aligned} A\overline{C} &\in \mathbb{R} \\ B\overline{D} &\in \mathbb{R} \\ A\overline{D} - \overline{B}C &= 1 \end{aligned} \tag{2.49}$$

Okrajovou podmínku parametrizovanou pomocí unitární matice $\mathbb{U}$ lze charakterizovat i jiným způsobem, než pomocí (2.32) a (2.33). Předpokládejme, že pro $\mathbb{U}$ platí

$$1 + u_{11} + u_{22} + \det\mathbb{U} \neq 0 \tag{2.50}$$

Pak lze využít následující charakterizace okrajové podmínky

$$\varphi_1'(0-) = a\varphi_1(0-) + bL_0(\varphi_2) \tag{2.51}$$

$$L_1(\varphi_2) = c\varphi_1(0-) + dL_0(\varphi_2) \tag{2.52}$$

Postupem analogickým k důkazu tvrzení 3 získáme tvar koeficientů a, b, c, d. Tj. řešíme soustavu rovnic

$$\begin{aligned} w + u_{11}\overline{w} &= a(1 + u_11) + bu_{12} \\ u_{21}\overline{w} &= au_{21} + b(1 + u_{22}) \\ u_{12}\overline{w} &= c(1 + u_11) + du_{12} \\ w + u_{22}\overline{w} &= cu_{21} + d(1 + u_{22}) \end{aligned} \tag{2.53}$$

a dostáváme řešení

$$a = \frac{w(1 + u_{22}) + \overline{w}(u_{11} + \det\mathbb{U})}{1 + u_{11} + u_{22} + \det\mathbb{U}} \tag{2.54}$$

$$b = \frac{-\sqrt{2}u_{21}}{1 + u_{11} + u_{22} + \det\mathbb{U}} \tag{2.55}$$

$$c = \frac{-\sqrt{2}u_{12}}{1 + u_{11} + u_{22} + \det\mathbb{U}} \tag{2.56}$$

$$d = \frac{w(1 + u_{11}) + \overline{w}(u_{22} + \det\mathbb{U})}{1 + u_{11} + u_{22} + \det\mathbb{U}} \tag{2.57}$$

Přímým výpočtem, tedy dosazením do rovnice (2.48), získáme podmínky

$$\begin{aligned} a &\in \mathbb{R} \\ d &\in \mathbb{R} \\ b &= -\overline{c} \end{aligned} \tag{2.58}$$

Poznámka. *Pokud by nebyla splněna podmínka (2.50), museli bychom využít charakterizaci popsanou v tvrzení 3, kde bychom dostali speciální případ* $B = 0$

Jednoduchými úpravami rovnic (2.32) a (2.33) lze získat konkrétní vzorce pro přechod k novým okrajovým podmínkám, a to sice

$$\begin{aligned} a =& \frac{-A}{B} \\ b =& \frac{1}{B} \\ c =& C - \frac{AD}{B} \\ d =& \frac{D}{B} \end{aligned} \tag{2.59}$$

Při této transformaci lze ukázat, že i podmínky (2.49) přejdou na (2.58). Také je zřejmé, že aby bylo možné tuto transformaci provést, musí $B \neq 0$, což odpovídá podmínce (2.50)

Z výše popsaného plyne, že žádnou z těchto charakterizací nelze použít vždy. Diagonální $\mathbb{U}$ lze až na globální fázi vyjádřit pomocí fázového posunu diagonálních prvků jako

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega} \end{pmatrix}$$

Z tohoto zápisu je vidět, že pokud je matice diagonální, pak matice $(\mathbb{I} - \mathbb{U})$ je singulární a tedy nelze invertovat. Podmínka (2.50) je zase ekvivalentní s podmínkou $\det(\mathbb{I} + \mathbb{U}) \neq 0$. Druhá charakterizace jde tedy použít pouze tehdy, kdy je matice $(\mathbb{I} + \mathbb{U})$ invertibilní.

Prozkoumejme ještě blíže formulaci okrajových podmínek (2.51), (2.52). Z posledního výsledku(2.58) plyne, že můžeme jeden z parametrů odstranit a přepsat rovnici (2.52) jako

$$-L_1(\varphi_2) = \overline{b}\varphi_1(0-) - dL_0(\varphi_2) \tag{2.60}$$

Vidíme tedy, že okrajové podmínky lze parametrizovat dvěma reálnými a jedním komplexním parametrem. Odtud lze přejít k další sadě parametrů pomocí následující transformace [9, Proposition 2.1]

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ -\overline{\gamma} & \beta \end{pmatrix} = \frac{4}{a - d - 2\operatorname{Re} b} \begin{pmatrix} -ad - |b|^2 & \frac{1}{2}(a+d) - \mathrm{i}\operatorname{Im} b \\ -\frac{1}{2}(a+d) - \mathrm{i}\operatorname{Im} b & 1 \end{pmatrix}, \tag{2.61}$$

kde $\alpha, \beta \in \mathbb{R}, \gamma \in \mathbb{C}$. Dostáváme novou parametrizaci okrajové podmínky ve formě

$$L_1(\varphi_2) - \varphi_1'(0-) = \frac{\alpha}{2}(L_0(\varphi_2) + \varphi_1(0-)) + \frac{\gamma}{2}(L_1(\varphi_2) + \varphi_1'(0-)) \tag{2.62}$$

$$L_0(\varphi_2) - \varphi_1(0-) = -\frac{\overline{\gamma}}{2}(L_0(\varphi_2) + \varphi_1(0-)) + \frac{\beta}{2}(L_1(\varphi_2) + \varphi_1'(0-)) \tag{2.63}$$

Poznámka. *Na poloprostoru lze definovat operátor $\tilde{h}_0 = U^{-1}h_0U = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}$, kde U je unitární transformace $U : L^2(\mathbb{R}+, r^2\,\mathrm{d}r) \to L^2(\mathbb{R}+, \mathrm{d}r)$ definovaná jako $(Uf)(r) = \frac{f(r)}{r}$. Operátor na poloprostoru zúžený na podprostor s nulovým orbitálním momentem hybnosti má stejný diferenciální symbol jako operátor na polopřímce. Z toho plyne, že popis operátoru na poloprostoru je ekvivalentní popisu operátoru na polopřímce.*

Explicitní vyjádření koeficientů získáme stejným způsobem jako dříve

$$\begin{aligned} \alpha =& \sqrt{8}\mathrm{i}\frac{w^2 + |w|^2(u_{11} + u_{22}) + \overline{w}^2 \det\mathbb{U}}{u_{11} + u_{12} - u_{21} - u_{22}} \\ \beta =& -\sqrt{8}\mathrm{i}\frac{1 + u_{11} + u_{22} + \det\mathbb{U}}{u_{11} + u_{12} - u_{21} - u_{22}} \\ \gamma =& -\sqrt{2}\mathrm{i}\frac{w(2 + u_{11} + u_{22} + u_{21} + u_{12}) + \overline{w}(u_{11} + u_{22} - u_{21} - u_{12} + \det\mathbb{U})}{u_{11} + u_{12} - u_{21} - u_{22}} \end{aligned} \tag{2.64}$$

Odtud jasně vidíme, že podmínka na využití této parametrizace je

$$u_{11} + u_{12} - u_{21} - u_{22} \neq 0 \tag{2.65}$$

Rovnice (2.62), (2.63) lze také přepsat následujícím způsobem, využívaje vztahu $\det \mathcal{A} = \alpha\beta + |\gamma|^2$

$$L_0(\varphi_2) = \frac{4 + \det \mathcal{A} - 4\operatorname{Re}\gamma}{4 - \det \mathcal{A} - 2\gamma + 2\overline{\gamma}}\varphi_1(0-) + \frac{4\beta}{4 - \det \mathcal{A} - 2\gamma + 2\overline{\gamma}}\varphi_1'(0-) \tag{2.66}$$

$$L_1(\varphi_2) = \frac{4\alpha}{4 - \det \mathcal{A} - 2\gamma + 2\overline{\gamma}}\varphi_1(0-) + \frac{4 + \det \mathcal{A} + 4\operatorname{Re}\gamma}{4 - \det \mathcal{A} - 2\gamma + 2\overline{\gamma}}\varphi_1'(0-)\,, \tag{2.67}$$

čímž získáme přechod zpět k první parametrizaci, tedy transformaci od α, β, γ k A, B, C, D. Vidíme, že tato úprava lze provést právě tehdy, je-li $4 - \alpha\beta - 2\gamma + 2\overline{\gamma} - |\gamma|^2 \neq 0$. Tuto formu lze také dosadit do (2.48) a získat tak okrajové podmínky přímo ve tvaru

$$\begin{aligned} 4\overline{\alpha}(4 + \det \mathcal{A} - 4\operatorname{Re}\{\gamma\}) &\in \mathbb{R} \\ 4\beta(\overline{4 + \det \mathcal{A} + 4\operatorname{Re}\{\gamma\}}) &\in \mathbb{R} \\ (4 + \det \mathcal{A} - 4\operatorname{Re}\{\gamma\})(\overline{4 + \det \mathcal{A} + 4\operatorname{Re}\{\gamma\}}) - 16\alpha\overline{\beta} &= |4 - \det \mathcal{A} - 2\gamma + 2\overline{\gamma}|^2 \end{aligned} \tag{2.68}$$

Ty jsou triviálně splněny, jelikož jsme volili α, β reálné.

Pro další zkoumání je vhodné vyčlenit případ, kdy chování funkce na polopřímce nezávisí na chování funkce na poloprostoru, tj. v (2.51) a (2.52) $c = -\overline{b} = 0$. Úloha se zde efektivně separuje na dva nezávislé problémy. Díky výše popsaným parametrizacím víme, že tento případ nastává právě tehdy, když je matice $\mathbb{U}$ diagonální. Z toho plyne, že nebude možné použít parametrizaci (2.32), (2.33) a bude nutné ji nahradit parametrizací (2.30).

2.2 Spektrum

Podívejme se nyní na bodové spektrum jednotlivých rozšíření. Jelikož indexy defektu jsou $(2, 2)$, bude mít libovolné rozšíření nejvýše dvě vlastní hodnoty [21, Theorem 8.19]. Tážeme se, zda je $\lambda \in \mathbb{R}$ vlastní hodnotou operátoru $H_{\mathbb{U}}$. Pro polopřímku řešíme rovnici

$$\Big(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \lambda\Big)\varphi_1(x) = 0\,, \tag{2.69}$$

která má obecné řešení ve tvaru $\varphi_1(x) = c_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{\lambda}x} + c_2 e^{-\mathrm{i}\sqrt{\lambda}x}$. Poloprostor rozložíme na podprostory podle orbitálního momentu hybnosti a řešíme pouze pro h_0.

$$\Big(-\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\Big(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\Big) - \lambda\Big)\varphi_2(r) = 0 \tag{2.70}$$

Pro tuto rovnici má řešení obecný tvar $\varphi_2(r) = c_3\frac{1}{r}e^{\mathrm{i}\sqrt{\lambda}r} + c_4\frac{1}{r}e^{-\mathrm{i}\sqrt{\lambda}r}$. Aby bylo řešení vlastní funkcí, musí být kvadraticky integrabilní. To nás omezí na $\lambda < 0$. Označme $\sqrt{\lambda} = \mathrm{i}\kappa, \kappa > 0$. Z podmínky na kvadratickou integrabilitu dále plyne $c_1 = 0 = c_4$. Máme tedy funkce

$$\begin{aligned} \varphi_{1,\kappa}(x) &= c_2\mathrm{e}^{\kappa x} \\ \varphi_{2,\kappa}(r) &= c_3\frac{\mathrm{e}^{-\kappa r}}{r} \end{aligned} \tag{2.71}$$

Aby $\lambda \in \sigma_p(H_{\mathbb{U}})$ musí $\varphi_{1,\kappa}, \varphi_{2,\kappa}$ splňovat příslušnou okrajovou podmínku. Ve výše zmíněném separovaném případě je tato podmínka jednoduchá a to sice

$$\begin{aligned} \varphi'_{1,\kappa}(0-) &= a\varphi_{1,\kappa}(0-) \\ L_1(\varphi_{2,\kappa}) &= dL_0(\varphi_{2,\kappa}) \end{aligned} \tag{2.72}$$

Po dosazení dostaneme

$$\begin{aligned} a =& \kappa \\ -d =& \kappa \end{aligned} \tag{2.73}$$

V případě že $a > 0$ pak je $-a^2$ vlastní hodnotou a příslušná vlastní funkce je triviální na poloprostoru, tj. $c_3 = 0$. Pokud je $d < 0$, pak je vlastní hodnotou $-d^2$ a příslušná vlastní funkce je naopak triviální na polopřímce, tj. $c_2 = 0$.

Obecný případ řešíme analogicky. Výsledky jsou shrnuty v následujícím tvrzení.

Tvrzení 4. *Buď $H_{\mathbb{U}}$ samosdružené rozšíření H_0 zkonstruované podle Tvrzení 3. Dále nechť matice $\mathbb{U}$ určující toto rozšíření není diagonální. Nastává jeden ze tří případů:*

a) $ad + |b|^2 \leq 0 \wedge d > a$
potom $H_{\mathbb{U}}$ nemá žádnou vlastní hodnotu

b) Buď $ad + |b|^2 \leq 0 \wedge d \leq a$ *nebo* $ad + |b|^2 > 0 \wedge d \geq a$
potom má $H_{\mathbb{U}}$ jednu vlastní hodnotu, a sice

$$\lambda = -\frac{a^2 + 2|b|^2 + d^2 + (a-d)\sqrt{(a+d)^2 + 4|b|^2}}{2} \tag{2.74}$$

c) $ad + |b|^2 > 0 \wedge d < a$
potom má $H_{\mathbb{U}}$ dvě vlastní hodnoty, a sice

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= -\frac{a^2 + 2|b|^2 + d^2 + (a-d)\sqrt{(a+d)^2 + 4|b|^2}}{2} \\ \lambda_2 &= -\frac{a^2 + 2|b|^2 + d^2 + (d-a)\sqrt{(a+d)^2 + 4|b|^2}}{2} \end{aligned} \tag{2.75}$$

Důkaz. Dosazením do (2.51), (2.52) dostaneme

$$\begin{aligned} \kappa c_2 =& ac_2 + bc_3 \\ -\kappa c_3 =& -\bar{b}c_2 + dc_3 \end{aligned} \tag{2.76}$$

pokud $a = \kappa$ nebo $\kappa = -d$, pak pro nediagonální případ nenalezneme žádnou vlastní hodnotu. Dále za předpokladu $|b| \neq 0, a \neq \kappa \neq -d$ dostaneme podmínku na κ

$$\kappa^2 + (d-a)\kappa - ad - |b|^2 = 0 \tag{2.77}$$

a tedy

$$\kappa_\pm = \frac{a - d \pm \sqrt{(a+d)^2 + 4|b|^2}}{2} \tag{2.78}$$

tento vztah nadále rozdělí možné výsledky na základě počtu kladných řešení κ. Vlastní hodnoty pak přiřadíme těmto řešením vztahem $\lambda = -\kappa^2$. Poznamenejme, že diskriminant rovnice (2.77) je kladný pro $a, d \in \mathbb{R}, b \neq 0$. □

Stejným postupem jako v důkazu Tvrzení 4, nebo pomocí transformací uvedených v první části kapitoly lze získávat podmínky na spektrum formulované pomocí jiných parametrů. Pro nediagonální případ, který je popsán tvrzením se tedy nabízí využít formulace okrajových podmínek (2.32), (2.33). V tomto případě už nemusí být splněna podmínka (2.50) a lze tedy v případě nediagonální $\mathbb{U}$ popsat širší třídu okrajových podmínek. Pro případy, kdy $B = 0$, tedy právě ty, kdy nelze použít předchozí parametrizaci a není proto možné využít závěrů Tvrzení 4, budou dvě možnosti

a) $C(A + D) \geq 0$
$H_{\mathbb{U}}$ nemá žádnou vlastní hodnotu

b) $C(A + D) < 0$
$H_{\mathbb{U}}$ má jednu vlastní hodnotu, a sice

$$\lambda = \frac{C^2}{A^2 + 2AD + D^2} \tag{2.79}$$

Je-li $B \neq 0$, dostáváme se k následujícím výsledkům

a) $A + D > 0 \wedge BC \geq 0$ nebo $BC > \frac{1}{4}(A + D)^2$
$H_{\mathbb{U}}$ nemá žádnou vlastní hodnotu

b) $A + D > 0 \wedge BC < 0$ nebo $A + D \leq 0 \wedge \frac{1}{4}(A + D)^2 \leq BC \geq 0$
$H_{\mathbb{U}}$ má jednu vlastní hodnotu, a sice

$$\lambda = \frac{A^2 + 2AD - 2BC + (A + D)\sqrt{(A + D)^2 - 4BC}}{2B^2} \tag{2.80}$$

c) $A + D \leq 0 \wedge BC < 0$
$H_{\mathbb{U}}$ má dvě vlastní hodnoty, a sice

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{A^2 + 2AD - 2BC + (A + D)\sqrt{(A + D)^2 - 4BC}}{2B^2} \\ \lambda_2 &= \frac{A^2 + 2AD - 2BC - (A + D)\sqrt{(A + D)^2 - 4BC}}{2B^2} \end{aligned} \tag{2.81}$$

U posledního typu parametrizace okrajových podmínek (2.62), (2.63) také nejprve nahlédněme případ, kdy $\beta = 0$. V tomto případě není splněna podmínka (2.50). Stejným postupem jako dříve dojdeme k následujícímu výsledku

a) $\alpha \geq 0$
$H_{\mathbb{U}}$ nemá žádnou vlastní hodnotu

b) $\alpha < 0$
$H_{\mathbb{U}}$ má jednu vlastní hodnotu, a sice

$$\lambda = \frac{4\alpha^2}{16 + 8|\gamma|^2 + |\gamma|^4} \tag{2.82}$$

Dále předpokládejme, že $\beta \neq 0$. Také předpokládejme, že jsou splněny následující podmínky

$$\begin{aligned} \gamma k - 2k - \alpha &\neq 0 \\ \gamma k + 2k + \alpha &\neq 0 \\ 2 + \beta k + \overline{\gamma} &\neq 0 \\ 2 + \beta k - \overline{\gamma} &\neq 0 \end{aligned} \tag{2.83}$$

Pokud by jedna z podmínek nebyla splněna, pak jedna z rovnic (2.69), (2.70) má pouze triviální řešení a tedy $-k^2$ není vlastním číslem. Pokud není splněna první, resp. druhá dvojice podmínek, pak vlastní hodnota může existovat, a sice $\lambda = \alpha^2/4$, resp. $\lambda = 4/\beta^2$. Naopak při splnění všech čtyř podmínek bude obecný případ vypadat následovně

a) $\det\mathcal{A} > -4 \wedge \alpha\beta \geq 0$ nebo $16\alpha\beta > \frac{1}{16}(4+\det\mathcal{A})^2$
   $H_{\mathbb{U}}$ nemá žádnou vlastní hodnotu

b) $\det\mathcal{A} > -4 \wedge \alpha\beta < 0$ nebo $\det\mathcal{A} \leq -4 \wedge \frac{1}{16}(4+\det\mathcal{A})^2 \geq \alpha\beta \geq 0$
   $H_{\mathbb{U}}$ má jednu vlastní hodnotu, a sice

$$\lambda = \frac{16 + 8\det\mathcal{A} - 8\alpha\beta + (\det\mathcal{A})^2 + (4+\det\mathcal{A})\sqrt{(4+\det\mathcal{A})^2 - 16\alpha\beta}}{8\beta^2} \tag{2.84}$$

c) $\det\mathcal{A} \leq -4 \wedge \alpha\beta < 0$ $H_{\mathbb{U}}$ má dvě vlastní hodnoty, a sice

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{16 + 8\det\mathcal{A} - 8\alpha\beta + (\det\mathcal{A})^2 + (4+\det\mathcal{A})\sqrt{(4+\det\mathcal{A})^2 - 16\alpha\beta}}{8\beta^2} \\ \lambda_2 &= \frac{16 + 8\det\mathcal{A} - 8\alpha\beta + (\det\mathcal{A})^2 - (4+\det\mathcal{A})\sqrt{(4+\det\mathcal{A})^2 - 16\alpha\beta}}{8\beta^2} \end{aligned} \tag{2.85}$$

2.3 Rozptyl

V další části se zaměříme na rozptyl na bodě P. Rozptyl budeme popisovat pomocí translačního a odrazového koeficientu. V případě diagonální $\mathbb{U}$ se nám oddělí poloprostor od polopřímky a průchod částice mezi nimi není možný. Dochází tedy k úplnému odrazu.

Pro obecný případ uvažujme částici (vlnu) přicházející po polopřímce k nule zleva. Vlna se částečně odrazí a částečně projde do poloprostoru. Máme tedy na G funkci $\psi = (\psi_1, \psi_2)$, kde

$$\psi_1(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{2.86}$$

$$\psi_2(r) = T\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{2.87}$$

Funkce ψ není obecně kvadraticky integrabilní, proto ji chápeme jako zobecněnou funkci, čímž zeslabíme podmínku na pouhou lokální kvadratickou integrabilitu. Využijeme prvně parametrizace (2.51), (2.52), ze které plyne soustava rovnic

$$\mathrm{i}k(1-R) = a(1+R) + bT \tag{2.88}$$

$$\mathrm{i}kT = -\overline{b}(1+R) + dT \tag{2.89}$$

Řešením této soustavy dostáváme, za předpokladu $b \neq 0$, vztahy pro koeficienty průchodu a odrazu ve tvaru

$$\begin{aligned} R &= \frac{k^2 - ad - |b|^2 + \mathrm{i}(ak+dk)}{k^2 + ad + |b|^2 - \mathrm{i}(ak-dk)} \\ T &= \frac{2\mathrm{i}k\overline{b}}{k^2 + ad + |b|^2 - \mathrm{i}(ak-dk)} \end{aligned} \tag{2.90}$$

Přímým výpočtem je možné se přesvědčit, že skutečně $|R|^2 + |T|^2 = 1$ V sadě parametrů A, B, C, D lze koeficienty R, T vyjádřit stejným způsobem.

$$\begin{aligned} R =& \frac{Bk^2 + C + \mathrm{i}(kD - kA)}{Bk^2 - C + \mathrm{i}(kD + kA)} \\ T =& \frac{2\mathrm{i}k(AD - BC)}{Bk^2 - C + \mathrm{i}(kD + kA)} \end{aligned} \tag{2.91}$$

Zde je ještě třeba vyčlenit případy $A = \mathrm{i}kB$ kdy $T = 2A$ a $C = \mathrm{i}kD$ kdy $T = 2D$. Předpis pro R je ve všech případech stejný. Konečně pro parametry α, β, γ nalezneme vyjádření

$$\begin{aligned} R =& \frac{2k^2\beta + 2\alpha + 4\mathrm{i}k\,\mathrm{Re}\{\gamma\}}{2k^2\beta - 2\alpha + \mathrm{i}k(4 + \alpha\beta + |\gamma|^2)} \\ T =& \frac{-4k\,\mathrm{Im}\{\gamma\} + \mathrm{i}k(4 - \alpha\beta - |\gamma|^2)}{2k^2\beta - 2\alpha + \mathrm{i}k(4 + \alpha\beta + |\gamma|^2)} \end{aligned} \tag{2.92}$$

Ani tento předpis však není universální a musíme z něj vyčlenit několik případů. Konkrétně

$$\begin{aligned} 2\mathrm{i}k - \alpha - \mathrm{i}k\gamma = 0 \Rightarrow& R = \frac{2 + \alpha + \mathrm{i}k\gamma}{-2\mathrm{i}k + \alpha - \mathrm{i}k\gamma} \\ -2\mathrm{i}k + \alpha - \mathrm{i}k\gamma = 0 \Rightarrow& T = \frac{2 + \alpha + \mathrm{i}k\gamma}{2\mathrm{i}k - \alpha - \mathrm{i}k\gamma} \\ 2 + \overline{\gamma} - \mathrm{i}k\beta = 0 \Rightarrow& R = \frac{-2 + \overline{\gamma} - \mathrm{i}k\beta}{2 - \overline{\gamma} - \mathrm{i}k\beta} \\ 2 - \overline{\gamma} - \mathrm{i}k\beta = 0 \Rightarrow& T = \frac{-2 + \overline{\gamma} - \mathrm{i}k\beta}{2 + \overline{\gamma} - \mathrm{i}k\beta} \end{aligned} \tag{2.93}$$

Ve všech výše zmíněných vyjádřeních R, T platí $|R|^2 + |T|^2 = 1$.

Dále se blíže podíváme, co nám tyto koeficienty říkají o rozptylu při vysokých, resp. nízkých energiích. Budeme tedy zkoumat limitu $k \to \infty$ resp. $k \to 0$. Pro vysoké energie rozlišíme tři případy

1. $\beta \neq 0$

$$\lim_{k\to\infty} R(k) = 1 \tag{2.94}$$

$$\lim_{k\to\infty} T(k) = 0 \tag{2.95}$$

2. $\beta = 0 \wedge \mathrm{Re}(\gamma) \neq 0$

$$\lim_{k\to\infty} R(k) = \frac{4\,\mathrm{Re}(\gamma)}{4 + |\gamma|^2} \tag{2.96}$$

$$\lim_{k\to\infty} T(k) = \frac{4\mathrm{i}\,\mathrm{Im}(\gamma) + 4 - |\gamma|^2}{4 + |\gamma|^2} \tag{2.97}$$

3. $\beta = 0 \wedge \mathrm{Re}(\gamma) = 0$

$$\lim_{k\to\infty} R(k) = 0 \tag{2.98}$$

$$\lim_{k\to\infty} T(k) = \frac{\gamma + 2}{\gamma - 2} \tag{2.99}$$

Podobně pro nízké energie rozlišíme tři případy

1. $\alpha \neq 0$

$$\lim_{k\to 0} R(k) = -1 \tag{2.100}$$

$$\lim_{k\to 0} T(k) = 0 \tag{2.101}$$

2. $\alpha = 0 \wedge \mathrm{Re}(\gamma) \neq 0$

$$\lim_{k\to 0} R(k) = \frac{4\,\mathrm{Re}(\gamma)}{4+|\gamma|^2} \tag{2.102}$$

$$\lim_{k\to 0} T(k) = \frac{4\mathrm{i}\,\mathrm{Im}(\gamma) + 4 - |\gamma|^2}{4+|\gamma|^2} \tag{2.103}$$

3. $\alpha = 0 \wedge \mathrm{Re}(\gamma) = 0$

$$\lim_{k\to 0} R(k) = 0 \tag{2.104}$$

$$\lim_{k\to 0} T(k) = \frac{\gamma+2}{\gamma-2} \tag{2.105}$$

2.4 Rezolventa

K nalezení rezolventy využijeme Kreinovu formuli. K tomu je třeba znát rezolventu alespoň jednoho rozšíření. Pro zjednodušení zápisu pokládáme $k = \sqrt{z}$. Na poloprostoru pro operátor s okrajovou podmínkou $L_0(\varphi) = 0$ má rezolventa známý tvar integrálního operátoru s jádrem [19, str. 59]

$$g^{(2)}_{k,0}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\vec{x}-\vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x} - \vec{x}'|} \tag{2.106}$$

Omezíme-li se na prostor s nulovým orbitálním momentem hybnosti, tedy na hledání operátoru $g^{(2)}_{k,0} = (h_0 - k^2)^{-1}$, zjistíme, že je to znovu integrální operátor tentokrát s jádrem

$$g^{(2)}_{k,0}(r, r'; k) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|r+r'|} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}k|r-r'|}}{2\mathrm{i}krr'} \tag{2.107}$$

Skutečně, pokud pro libovolnou $\varphi \in L^2(\mathbb{R}+, r^2\,\mathrm{d}r)$ položíme

$$\psi(r) = \int_0^{+\infty} g^{(2)}_{k,0}(r, r')\varphi(r')r'^2\,\mathrm{d}r' = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{kr}\int_0^r \sin(kr')\varphi(r')r'\,\mathrm{d}r' + \frac{\sin(kr)}{kr}\int_r^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr'}\varphi(r')r'\,\mathrm{d}r'\ , \tag{2.108}$$

potom

$$\psi'(r) = \frac{\mathrm{i}kr\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{kr^2}\int_0^r \sin(kr')\varphi(r')r'\,\mathrm{d}r' + \frac{kr\cos(kr) - \sin(kr)}{kr^2}\int_r^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr'}\varphi(r')r'\,\mathrm{d}r' \tag{2.109}$$

$$\begin{gathered}\psi''(r) = \Big(-\frac{k^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{kr} - 2\frac{\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r^2} + \frac{2\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{kr^3}\Big)\int_0^r \sin(kr')\varphi(r')r'\,\mathrm{d}r' + \\ \Big(\frac{-k^2\sin(kr)}{kr} - 2\frac{\mathrm{i}\cos(kr)}{kr^2} + 2\frac{\sin(r)}{kr^3}\Big)\int_r^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr'}\varphi(r')r'\,\mathrm{d}r' - \varphi(r)\end{gathered} \tag{2.110}$$

Zřejmě tedy platí

$$-\psi''(r) - 2\frac{\psi'(r)}{r} - k^2\psi(r) = \varphi(r) \tag{2.111}$$

$$L_0(\psi) = 0 \tag{2.112}$$

Analogickým způsobem lze ukázat, že pro operátor s okrajovou podmínkou $\varphi(0-) = 0$ na polopřímce má jádro rezolventy $g^{(1)}_{k,0}$ tvar

$$g^{(1)}_0(x, x'; k) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x+x'|} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x-x'|}}{2\mathrm{i}k} \tag{2.113}$$

Tyto okrajové podmínky odpovídají podle (2.30) matici $\mathbb{V} \equiv \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Rezolventa celého operátoru, ze které budeme konstruovat rezolventy ostatních rozšíření, má tvar

$$G_{k,0} = (H_{\mathbb{V}} - k^2)^{-1} = \begin{pmatrix} g^{(1)}_{k,0} & 0 \\ 0 & g^{(2)}_{k,0} \end{pmatrix} \tag{2.114}$$

Tvrzení 5. *Rezolventa samosdruženého rozšíření $H_{\mathbb{U}}$ charakterizovaného okrajovými podmínkami (2.51) a (2.52) je integrální operátor s jádrem*

$$\begin{aligned} G_{\mathbb{U}}(x, x', r, r'; k) = & \begin{pmatrix} g^{(1)}_0(x, x'; k) & 0 \\ 0 & g^{(2)}_0(r, r'; k) \end{pmatrix} \\ & + D^{-1} \begin{pmatrix} \frac{|b|^2 - b^2 + (k-\mathrm{i}a)(k+\mathrm{i}d)}{a+\mathrm{i}k} e^{-\mathrm{i}kx} e^{-\mathrm{i}kx'} & b e^{-\mathrm{i}kx} \frac{e^{\mathrm{i}kr'}}{r'} \\ \overline{b} \frac{|b|^2 - b^2 + (k-\mathrm{i}a)(k+\mathrm{i}d)}{(a+ik)(d-ik)} \frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r} e^{-\mathrm{i}kx'} & -(a + \mathrm{i}k) \frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r} \frac{e^{\mathrm{i}kr'}}{r'} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.115}$$

pro $\mathrm{Im}\, k > 0$*, kde* $D = (\mathrm{i}k + a)(\mathrm{i}k - d) - |b|^2$

Důkaz. Důkaz vychází z Kreinovy formule. Hledáme tedy jádro rezolventy ve tvaru

$$G_{k,\mathbb{U}} = G_{k,0} + \sum_{j,l=1}^{2} \lambda_{jl}(k)(F^k_l, \cdot)F^k_j \,, \tag{2.116}$$

kde za funkce $F^k_1(x), F^k_2(r)$ volíme

$$F^k_1(x) = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \\ 0 \end{pmatrix} \qquad F^k_2(r) = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \end{pmatrix} \tag{2.117}$$

Položíme

$$\chi = G_{k,\mathbb{U}} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \tag{2.118}$$

pro libovolné $\varphi_1 \in L^2(\mathbb{R}-, \mathrm{d}x)$ a $\varphi_2 \in L^2(\mathbb{R}+, r^2\, \mathrm{d}r)$. Chceme aby χ splňovalo počáteční podmínky. Z této podmínky dostaneme dosazením do (2.51),(2.52) lineární soustavu rovnic pro λ_{jl}

$$\begin{aligned} (a + \mathrm{i}k)\lambda_{11} &= -1 - b\lambda_{21} \\ (d - \mathrm{i}k)\lambda_{21} &= \overline{b}\lambda_{11} \\ (a + \mathrm{i}k)\lambda_{12} &= -b\lambda_{22} \\ (d - \mathrm{i}k)\lambda_{22} &= 1 + \overline{b}\lambda_{12} \end{aligned} \tag{2.119}$$

Řešením této soustavy dostaneme koeficienty λ_{jl}. □

Poznámka. *Vidíme, že ve jmenovateli rezolventy se vyskytuje výraz* $(\mathrm{i}k + a)(\mathrm{i}k - d) - |b|^2 = -k^2 + \mathrm{i}k(a - d) - ad - |b|^2$, *jehož kořeny určují spektrum. Vztah mezi* κ *a* k *určuje vztah* $\mathrm{i}\kappa = \sqrt{z} = k$. *Pokud toto dosadíme do jmenovatele rezolventy, pak lze vidět, že je ekvivalentní s rovnicí (2.77), tedy zřejmě vede na stejné spektrum.*

Poznámka. *Pokud se omezíme na diagonální případ, tedy* $b = 0$ *lze z tohoto tvaru vidět jak vypadají jednotlivé rezolventy pro samotný poloprostor a samotnou polopřímku. Opravdu, pro diagonální případ nalezneme v jádru celkové rezolventy jádro rezolventy pro polopřímku s Robinovou okrajovou podmínkou a syemtrickou část rezolventy trojrozměrnou bodovou interakci [1].*

Kapitola 3

Polopřímka a konečná oblast

Nyní je popsán systém složený z polopřímky a poloprostoru. Dále budeme popisovat případ, kdy je polopřímka navázána na konečnou trojrozměrnou oblast.

Uvažujme tedy systém tvořený konečnou trojrozměrnou oblastí G, ke které jsou v bodech x_1, x_2 připojeny polopřímky. Souřadnice na polopřímkách označíme y volíme je tak, aby jejich počátky $y = 0$ odpovídaly bodům x_1 a x_2. Indexy defektu H_0 jsou v tomto případě $(4, 4)$, protože rovnice (2.19) má nyní dvě kvadraticky integrabilní řešení. Charakterizujeme tedy jednotlivá rozšíření pomocí 4×4 unitárních matic. Chtěli bychom v analogii s předchozí kapitolou popsat jednotlivá rozšíření pomocí okrajových podmínek v bodech $x_i,\ i = 1, 2$

$$\begin{aligned} \varphi'(0\pm) &= a_i\varphi(0\pm) + b_i L_0^{(i)}(\varphi) \\ L_1^{(i)}(\varphi) &= -\overline{b_i}\varphi(0\pm) + d_i L_0^{(i)}(\varphi)\ , \end{aligned} \tag{3.1}$$

kde plus a mínus odpovídá opačné orientaci polopřímek a regularizované okrajové hodnoty jsou definovány následovně

$$\begin{aligned} L_0^{(i)}(\varphi) &= \lim_{x\to x_i} \varphi(x)|x - x_i| \\ L_1^{(i)}(\varphi) &= \lim_{x\to x_i} \left(\varphi - \frac{L_0^{(i)}(\varphi)}{|x - x_i|}\right) \end{aligned} \tag{3.2}$$

Takto popsaná samosdružená rozšíření zaručují, že napojení je lokální. To odpovídá tomu, že příslušná unitární matice $\mathbb{U}$ má blokově diagonální strukturu, tedy

$$\mathbb{U} = \begin{pmatrix} \mathbb{U}_1 & 0 \\ 0 & \mathbb{U}_2 \end{pmatrix}\ , \tag{3.3}$$

kde $\mathbb{U}_{1,2}$ jsou 2×2 matice korespondující s okrajovými podmínkami v bodech $x_{1,2}$ způsobem popsaným v předchozí kapitole.

3.1 Rozptyl

Zaměřme se na rozptyl částice na trojrozměrné oblasti. Mějme vlnu přicházející po první polopřímce a zajímá nás, jak bude vypadat odražená vlna a jak vlna, která projde až na druhou polopřímku. Na první polopřímce tedy máme zobecněnou vlnovou funkci tvaru

$$\varphi_1(y) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}ky} + R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ky} \tag{3.4}$$

Na druhé polopřímce potom máme prošlou vlnu tvaru

$$\varphi_2(x) = T\mathrm{e}^{\mathrm{i}ky} \tag{3.5}$$

Otázkou zůstává, jak bude vypadat trojrozměrná část vlny. Ta lze na základě [10, Lemma3.3] zapsat jako

$$\varphi_3(x) = c_1 g(x, x_1, k) + c_2 g(x, x_2, k)\ , \tag{3.6}$$

kde $g(x, x', k)$ jsou Greenovy funkce pro operátor $\triangle_0 - k^2$ s definičním oborem $D(\triangle_0) = W^{2,2}(G)$. Tvar těchto funkcí záleží na konkrétní varietě G, ale v limitním přiblížení se pro $|x - x'| \to 0$ budou vždy chovat jako

$$\frac{1}{4\pi|x - x'|} + O(1) \tag{3.7}$$

Regularizované okrajové hodnoty funkce φ_3 pak budou

$$\begin{aligned} L_0^{(i)} &= \frac{c_i}{4\pi} \\ L_1^{(i)} &= c_i \xi(x_i, k) + c_{3-i} g(x_1, x_2, k)\ , \end{aligned} \tag{3.8}$$

kde $\xi(x_i, k) = L_1^{(i)}(\varphi_3) = \lim_{x \to x_i} \left(g(x, x_i, k) - \frac{c_i}{4\pi|x - x_i|} \right)$. Tím dostáváme soustavu rovnic

$$\begin{aligned} ik(1 - R) &= a_1(1 + R) + b_1 \frac{c_1}{4\pi} \\ c_1\xi(x_1, k) + c_2 g(x1, x2, k) &= -\overline{b_1}(1 + R) + d_1 \frac{c_1}{4\pi} \\ ikT &= a_2 T + b_2 \frac{c_2}{4\pi} \\ c_2\xi(x_2, k) + c_1 g(x1, x2, k) &= -\overline{b_2} T + d_2 \frac{c_2}{4\pi} \end{aligned} \tag{3.9}$$

pro neznámé R, T, c_1, c_2. Řešením této soustavy získáme obecný předpis

$$\begin{aligned} R(k) &= \frac{|b_1|^2\Delta + (a_1 - \mathrm{i}k)[g^2(a_2 - \mathrm{i}k) + (d_1 - \xi(x_1, k))\Delta]}{|b_1|^2\Delta + (a_1 + \mathrm{i}k)[g^2(a_2 - \mathrm{i}k) + (d_1 - \xi(x_1, k))\Delta]} \\ T(k) &= \frac{2\mathrm{i}b_2\overline{b_1}g}{|b_1|^2\Delta + (a_1 + \mathrm{i}k)[g^2(a_2 - \mathrm{i}k) + (d_1 - \xi(x_1, k))\Delta]}\ , \end{aligned} \tag{3.10}$$

kde $\Delta = (a_2 - \mathrm{i}k)(\xi(x_2, k) - d_2) - |b_2|^2,\ g = g(x_1, x_2, k)$.

Pro přesné určení hodnot $g(x_1, x_2, k), \xi(x_i, k)$ bychom potřebovali znát konkrétní tvar variety G. Na obecné úrovni je nicméně možné je rozepsat pomocí vlastních funkcí operátoru $\triangle_G$ - volného Hamiltoniánu na varietě G s Neumannovou okrajovou podmínkou. Označme tedy ϕ_n vlastní funkce $\triangle_G$ příslušející vlastní hodnotě λ_n. Tyto funkce tvoří bázi prostoru $L^2(G)$. Můžeme tedy psát

$$g(x, x', k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi_n(x)\overline{\phi_n(x')}}{\lambda_n - k^2} \tag{3.11}$$

Odtud

$$g(x_1, x_2, k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi_n(x_1)\overline{\phi_n(x_2)}}{\lambda_n - k^2} \tag{3.12}$$

Pro druhý výraz získáme z Taylorova rozvoje funkce $\frac{1}{x}$ v bodě $x = 1$ vyjádření

$$\xi(x_i, k) = \lim_{\varepsilon \to 0} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\phi_n(x_i + \varepsilon n)\overline{\phi_n(x_i)}}{\lambda_n - k^2} + \frac{(1-\varepsilon)^n}{4\pi} \right) - 1 \, , \tag{3.13}$$

kde n je jednotkový vektor. Tato suma je sice konvergentní pro všechna $\epsilon > 0$, nekonverguje ale stejnoměrně na okolí nuly. Nelze tedy zaměnit limitu a sumu. Můžeme však vyjádřit rozdíl

$$\xi(x_i, k) - \xi(x_i, k') = (k^2 - k'^2) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\phi_n(x_i)|^2}{(\lambda_n - k^2)(\lambda_n - k'^2)} \tag{3.14}$$

Závislost na parametru zmizela a zbyla pouze suma, která už je konvergentní. To plyne z Weylova asymptotického vzorce [23, Satz XI], který říká, že pro $n \to \infty$

$$\frac{1}{\lambda_n - k^2} \sim \frac{1}{n^{2/3}}. \tag{3.15}$$

Závěr

V této práci byla využita teorie samosdružených rozšíření k popsání systémů kombinujícím dimenze jedna a tři, konkrétně sytém složený z polopřímky a poloprostoru a systém složený z konečné trojrozměrné variety a dvou polopřímek. Detailně jsme popsali závislost podoby definičního oboru samosdruženého rozšíření na okrajových podmínkách, a možné formulace oné závislosti. Pro systém složený z polopřímky a poloprostoru bylo nalezeno spektrum Hamiltoniánu, jeho resolventa a jejich závislost na okrajových podmínkách. Prozkoumán byl i speciální zjednodušený případ, kdy okrajové podmínky na polopřímce nezávisí na okrajových podmínkách na poloprostoru. Dále byly nalezeny rozptylové koeficienty pro systém polopřímky a poloprostoru, jejich závislost na okrajových podmínkách a jejich chování pro nízké a vysoké energie. Nakonec bylo nalezeno obecné vyjádření rozptylových koeficientů pro systém tvořený dvěma polopřímkami připojenými ke hladké trojrozměrné varietě.

V dalším výzkumu by bylo možné využít výsledků z poslední kapitoly pro nalezení rozptylových koeficientů pro konkrétní volbu variety, například pro kouli, a zkoumat závislost rozptylu na vzájemné poloze bodů x_1 a x_2. Pomocí vhodné volby variety by také bylo možné zkoumat kvantový chaos na tomto systému, v analogii k Šebovu biliaru [20]. Dále by bylo možné zkoumat rezolventní a rozptylové resonance pro systémy kombinující dimenzi jedna a tři a porovnat s výsledky práce [10].

Literatura

[1] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, H. Holden, and an appendix by P. Exner. *Solvable Models in Quantum Mechanics*. American Mathematical Soc., 1988.

[2] G. Berkolaiko and P. Kuchment. *Introduction to Quantum Graphs*. Mathematical surveys and monographs. American Mathematical Society, 2013.

[3] J. Blank, P. Exner, and M. Havlíček. *Lineární operátory v kvantové fyzice*. Karolinum, 1993.

[4] J. Brüning, P. Exner, and V. A. Geyler. Large gaps in point-coupled periodic systems of manifolds. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(17):4875–4890, apr 2003.

[5] J. Brüning and V. A. Geyler. Scattering on compact manifolds with infinitely thin horns. *Journal of Mathematical Physics*, 44(2):371, 2003.

[6] J. Brüning, V. A. Geyler, V. A. Margulis, and M. A. Pyataev. Ballistic conductance of a quantum sphere. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 35(19):4239–4247, may 2002.

[7] R. Carlone and P. Exner. Dynamics of an electron confined to a "hybrid plane" and interacting with a magnetic field. *Reports on Mathematical Physics*, 67(2):211–227, apr 2011.

[8] P. Exner. A solvable model of two-channel scattering. *Helvetica Physica Acta*, 64(5):592–609, 1991.

[9] P. Exner and H. Grosse. Some properties of the one-dimensional generalized point interactions (a torso), 1999.

[10] P. Exner and J. Lipovsky. Resonances on hedgehog manifolds. *Acta Polytechnica*, 2013.

[11] P. Exner and P. Šeba. Quantum motion on two planes connected at one point. *Letters in Mathematical Physics*, 12(3):193–198, Oct 1986.

[12] P. Exner and P. Šeba. Quantum motion on a half-line connected to a plane. *Journal of Mathematical Physics*, 28:386–391, 02 1987.

[13] P. Exner and P. Šeba. Mathematical models for quantum point-contact spectroscopy. *Czechoslovak Journal of Physics B*, 38(1):1–11, Jan 1988.

[14] P. Exner and P. Šeba. A simple model of thin-film point contact in two and three dimensions. *Czechoslovak Journal of Physics B*, 38(10):1095–1110, Oct 1988.

[15] P. Exner and P. Šeba. Resonance statistics in a microwave cavity with a thin antenna. *Physics Letters A*, 228(3):146–150, 1997.

[16] P. Exner and P. Šeba. A “hybrid plane” with spin-orbit interaction. *Russian Journal of Mathematical Physics*, 14(4):430–434, dec 2007.

[17] A. Kiselev. Some examples in one-dimensional “geometric” scattering on manifolds. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 212:263–280, 08 1997.

[18] J. von Neumann. Allgemeine eigenwerttheorie hermitescher funktionaloperatoren. *Mathematische Annalen*, 102:49–131, 1930.

[19] M. Reed and B. Simon. *II: Fourier Analysis, Self-Adjointness*. Methods of Modern Mathematical Physics. Elsevier Science, 1975.

[20] P. Šeba. Wave chaos in singular quantum billiard. *Phys. Rev. Lett.*, 64:1855–1858, Apr 1990.

[21] J. Szücs and J. Weidmann. *Linear Operators in Hilbert Spaces*. Graduate Texts in Mathematics. Springer New York, 2012.

[22] G. Teschl. *Mathematical Methods in Quantum Mechanics: With Applications to Schrödinger Operators*. Graduate studies in mathematics. American Mathematical Society, 2009.

[23] H. Weyl. Das asymptotische verteilungsgesetz der eigenwerte linearer partieller differentialgleichungen (mit einer anwendung auf die theorie der hohlraumstrahlung). *Mathematische Annalen*, 71:441–479, 1912.