



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Kvazi-relativistická kvantová částice na kružnici s komplexním magnetickým polem

Quasi-relativistic quantum particle on a circle with complex magnetic field

Bakalářská práce

Autor: **Jan Havel**

Vedoucí práce: **prof. Mgr. David Krejčířík, Ph.D. DSc.**

Akademický rok: 2021/2022



Katedra: fyziky

Akademický rok: 2021/2022

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student: Jan Havel

Studijní program: Aplikace přírodních věd

Obor: Matematické inženýrství, zaměření Matematická fyzika

Název práce: Kvazi-relativistická kvantová částice na kružnici s komplexním
(česky) magnetickým polem

Název práce: Quasi-relativistic quantum particle on a circle with complex magnetic
(anglicky) field

Pokyny pro vypracování:

- 1) Nerelativistická kvantová mechanika. Schrödingerova rovnice.
- 2) Relativistická kvantová mechanika. Diracova a Klein-Gordonova rovnice.
- 3) Koncept magnetického pole. Fyzikální motivace pro komplexní magnetické pole.
- 4) Kvazi-hermitovská kvantová mechanika. Rieszova báze.
- 5) Uzavřené, sektoriální a akretivní operátory. Odmocnina operátoru.
- 6) Kvazi-relativistická kvantová částice na kružnici. Definice a spektrální analýza.

Doporučená literatura:

- [1] A. A. Balinsky and W. D. Evans: Spectral Analysis of Relativistic Operators, Imperial College Press, London, 2011
- [2] D. Krejčířík: Complex magnetic fields: An improved Hardy-Laptev-Weidl inequality and quasi-self-adjointness. SIAM J. Math. Anal. 51 790-807 (2019)
- [3] D. Krejčířík, P. Siegl, M. Tater and J. Viola: Pseudospectra in non-Hermitian quantum mechanics. J. Math. Phys. 56, 103513 (2015)
- [4] B. Thaller: The Dirac Equation, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1992

Jméno a pracoviště vedoucího bakalářské práce:

doc. Mgr. David Krejčířík, Ph.D. DSc., Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze

Datum zadání bakalářské práce: 20.10.2021

Termín odevzdání bakalářské práce: 07.07.2022

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

.....
garant oboru

.....
vedoucí katedry

.....
děkan

V Praze dne 20.10.2021

Poděkování:

Chtěl bych zde poděkovat svému školiteli prof. Mgr. Davidu Krejčířkovi, Ph.D. DSc. za trpělivost, ochotu, vstřícnost a také za cenné rady, podněty a připomínky při vedení mé bakalářské práce.

Čestné prohlášení:

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci vypracoval samostatně a použil jsem pouze podklady uvedené v příloženém 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 7. července 2022

Jan Havel

Název práce:

Kvazi-relativistická kvantová částice na kružnici s komplexním magnetickým polem

Autor: Jan Havel

Obor: Matematické inženýrství

Zaměření: Matematická fyzika

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: prof. Mgr. David Krejčířík, Ph.D. DSc., Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze

Abstrakt: Uvažujeme kvazi-relativistickou kvantovou částici na kružnici s komplexním magnetickým polem. Nejprve vyšetříme její hybnost s reálným a komplexním vektorovým potenciálem. Pomocí hybnosti získáme pro reálný potenciál magnetický kvazi-relativistický operátor a najdeme jeho spektrum. Dále pro komplexní potenciál, kdy operátory nejsou samosdružené, odvodíme za jaké podmínky lze získat magnetický kvazi-relativistický operátor jako odmocninu m -akretivního operátoru. Vyšetříme jeho vlastnosti a navrhne jeho tvar. Nakonec ukážeme, za jaké podmínky je kvazi-hermitovský.

Klíčová slova: komplexní magnetické pole, kvazi-hermitovský operátor, kvazi-relativistický operátor, odmocnina m -akretivního operátoru

Title:

Quasi-relativistic quantum particle on a circle with complex magnetic field

Author: Jan Havel

Abstract: We consider a quasi-relativistic particle on a circle with complex magnetic field. First, the momentum of the particle with real and complex magnetic vector potential is investigated. Thence, we obtain the magnetic quasi-relativistic operator with real potential and find its spectrum. Since operators with complex potential are non-self-adjoint, we derive the condition under which the magnetic quasi-relativistic operator can be obtained as a square root of an m -accretive operator. Furthermore, its properties are investigated, and we attempt to construct such operator. Finally, we derive the condition under which the operator is quasi-Hermitian.

Key words: complex magnetic field, quasi-Hermitian operator, quasi-relativistic operator, square root of an m -accretive operator

Obsah

Úvod	7
1 Magnetické pole v klasické fyzice	8
1.1 Lorentzova síla	9
1.2 Maxwellovy rovnice	11
2 Magnetické pole v kvantové mechanice	15
2.1 Kvantová mechanika	15
2.1.1 Částice v elektromagnetickém poli	16
2.2 Relativistická kvantová mechanika	18
2.3 Kvazi-hermitovská kvantová mechanika	20
3 Komplexní magnetické pole	21
3.1 Lee–Yang zeros	21
3.2 Stabilita černé díry	21
4 Matematický aparát	23
4.1 Základní pojmy	23
4.2 Báze a kvazi-hermitovské operátory	30
5 Spektrální analýza	33
5.1 Operátor hybnosti	33
5.2 Magnetický potenciál	37
5.3 Kvazi-relativistická částice na kružnici	43
Závěr	51

Úvod

V zákonech elektrodynamiky v klasické fyzice vystupují jako hlavní fyzikální veličiny elektrická intenzita a magnetická indukce, jež popisují elektromagnetické pole. V kvantové mechanice ovšem jejich roli přebírají skalární a vektorový potenciál, což je nezbytné například k vysvětlení Aharonov–Bohmova jevu. Další změnou by mohla být fyzikální relevance komplexních parametrů daných veličin. V kvantové statistické fyzice se využívá komplexní magnetické pole v matematické teorii, stejně jako potenciály elektromagnetického pole v klasické fyzice. Před několika lety byl publikován článek [14] samotného experimentálního pozorování vlivu komplexního magnetického pole. Mimo to se v článku [16] zmiňuje matematická analogie mezi částicí v imaginárním magnetickém poli a popisem stability černých děr.

V této práci navazujeme na článek prof. D. Krejčířika [17], ve kterém se věnoval operátoru

$$P_a := -i \frac{d}{dx} - a(x)$$

s komplexním vektorovým potenciálem $a(x)$ na kružnici. Operátor P_a se ukázal jako dobrý model pro studium kvazi-hermitovskosti. Řekneme, že je operátor P_a kvazi-hermitovský, pokud splňuje se svým sdruženým operátorem P_a^* a metrikou Θ vztah

$$\Theta P_a \Theta^{-1} = P_a^*.$$

Poznatky z tohoto článku využijeme k získání magnetického kvazi-relativistického operátoru

$$H_a := \sqrt{P_a^2 + m^2 I}.$$

Kvazi-relativistický operátor byl první snahou sjednotit speciální teorii relativity s kvantovou mechanikou.

V první kapitole se seznámíme se zákony popisující elektromagnetické pole v klasické fyzice. V další kapitole uvedeme popis elektromagnetického pole v kvantové mechanice a její rozšíření do relativistické a kvazi-hermitovské kvantové mechaniky. Ve třetí kapitole se seznámíme blíže s fyzikální motivací pro komplexní magnetické pole. Na matematický aparát spektrální teorie včetně bázi Hilbertova prostoru a vlastností kvazi-hermitovských operátorů se podíváme ve čtvrté kapitole. V poslední kapitole provedeme postupně spektrální analýzu operátoru hybnosti na různých intervalech a operátoru hybnosti s magnetickým potenciálem na kružnici. Nakonec se budeme věnovat magnetickému kvazi-relativistickému operátoru, který budeme chtít získat jako odmocninu z m -akretivního operátoru.

Kapitola 1

Magnetické pole v klasické fyzice

Počátky teoretické fyziky jsou spojeny s Isaacem Newtonem. Isaac Newton ve svém díle *Philosophiae naturalis principia mathematica* vyslovil zákon síly:

Změna pohybu je úměrná hybné vtištěné síle a nastává ve směru přímky, podél níž síla působí.

Matematicky zapsané: $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, kde \mathbf{F} je síla, m hmotnost a \mathbf{a} zrychlení. Tento zákon nám umožňuje nalézt trajektorii hmotného bodu, pokud známe sílu, která na něj působí. V jistých situacích nám ale Newtonova mechanika a jeho rovnice nemusí stačit. Namísto vektorového popisu pohybu s konceptem síly se poté zavedla analytická mechanika se skalárními funkcemi.

Definujme Lagrangeovu funkci $L = T - U$, kde T je kinetická energie a U potenciální funkce. Předpokládejme, že vtištěné síly vystupující v Newtonově zákonu jdou vyjádřit pomocí potenciální funkce a systém, který popisujeme, obsahuje pouze holonomní ideální vazby, tj. vazby lze vyjádřit pouze funkcí polohy a času a nedochází kvůli nim k disipaci energie. Za těchto podmínek můžeme Newtonovy rovnice převést na Lagrangeovy

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0,$$

kde q_i, \dot{q}_i jsou obecné souřadnice polohy a rychlosti, $i = 1, 2, \dots, s$, s je počet stupňů volnosti. Lagrangeova funkce je obecně funkcí polohy, rychlosti a času a výraz $\frac{d}{dt}$ zde vystupuje jako operátor úplné časové derivace.

Pokud umíme zkonstruovat Lagrangeovu funkci, získali jsme popis bez konceptu sil. Ještě ale zbývá odvození Lagrangeových rovnic bez Newtonových zákonů. V analytické mechanice se místo nich zavádí diferenciální nebo integrální principy. My zde vyslovíme Hamiltonův integrální princip stacionární akce:

Skutečný pohyb mechanické soustavy s holonomními vazbami a potenciálními silami v časovém intervalu $\langle t_1, t_2 \rangle$ se děje po takové trajektorii, na níž akce

$$S[q_i(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i(t), \dot{q}_i(t), t) dt$$

nabývá stacionární hodnoty vzhledem k izochronním variacím s pevnými konci, při nichž $\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$.

Zapsáno matematicky, chceme, aby $\delta S = 0$. Veličina akce S zde vystupuje jako funkcionál. Metodami variačního počtu pro funkcionál definovaný přes integrál získáme Eulerovy rovnice. A ty jsou pro tento konkrétní případ totožné s Lagrangeovými, které jsme chtěli. Hamiltonův princip nám říká, že skutečná trajektorie se děje po křivce, která je extrémou funkcionálu, tj. v jistém smyslu minimální nebo maximální. Výhodou je jeho snadná formulace i v jiných oblastech fyziky.

Jelikož obecné souřadnice nemusí mít rozměr délky a Lagrangeovu funkci chceme využívat i mimo mechaniku, definujeme z Lagrangeovy funkce obecnou hybnost po složkách $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$, $i = 1, \dots, s$, a obecnou energii $E = \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L$. Dále můžeme pomocí Lagrangeovy funkce najít veličiny, které se v daném systému zachovávají, tzv. integrály pohybu. Veličina F je integrál pohybu, právě když $\frac{dF}{dt} = 0$. Z toho lze ukázat, že pokud Lagrangeova funkce nezávisí na čase t , zachovává se obecná energie, a v případě nezávislosti na i -té složce polohy q_i se naopak zachovává i -tá složka obecné hybnosti.

Lagrangeovou funkcí dokážeme popsat mnoho fyzikálních situací. Vyřešit Lagrangeovy diferenciální rovnice druhého řádu ale nemusí být vždy snadné a nemusí být snadno vidět ani symetrie popisovaného systému, které by vedly k jejich zjednodušení. K tomu nám pomůže Hamiltonova funkce. Hamilton ukázal, že obecnou hybnost můžeme používat jako rovnocennou proměnnou. Díky matematické Legendreovy duální transformace definujeme Hamiltonovou funkci $H(q_i, p_i, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i(q_j, p_j, t) - L(q_i, \dot{q}_i(q_j, p_j, t), t)$, kde rychlosti \dot{q}_i jsou funkcí polohy, hybnosti a času získané ze vztahů $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$. Fyzikálně představuje Hamiltonova funkce obecnou energii v jiných proměnných. Po derivování Hamiltonovy funkce se znalostí Lagrangeových rovnic dostaneme Hamiltonovy kanonické rovnice

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, s.$$

Po odvození z Lagrangeovy funkce má první sada kanonických rovnic nedynamický význam, vyjadřuje pouze vztah mezi hybností a rychlostí, zatímco druhá sada dynamický význam má a je ekvivalentní s Newtonovými pohybovými rovnicemi. Z s diferenciálních rovnic 2. řádu jsme dostali $2s$ obyčejných diferenciálních rovnic prvního řádu. Pro složitější problémy je snížení řádu důležitější než počet rovnic.

1.1 Lorentzova síla

Jedna z fundamentálních interakcí v našem světě je elektromagnetická. Uvažujme nabitou částici v elektromagnetickém poli, která má na něj zanedbatelný vliv. V takovém případě řekneme, že na částici s nábojem q v elektromagnetickém poli působí tzv. Lorentzova síla $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$, kde $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ je intenzita elektrického pole a $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$ je magnetická indukce. Během historie se zavedly potenciály, kterými tyto veličiny lze vyjadřovat. $\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$, $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, kde φ je skalární potenciál a \mathbf{A} vektorový. Pomocí nich můžeme definovat potenciální funkci pro částici v elektromagnetickém poli $U = q(\varphi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$. Zkusme najít pro tuto částici Lagrangeovy pohybové rovnice.

Nejdříve sestavíme Lagrangeovu funkci $L = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - q(\varphi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$. Lagrangeovy rovnice budeme počítat po složkách $i = 1, 2, 3$. První si spočítáme člen

$$\frac{\partial L}{\partial v_i} = mv_i + qA_i.$$

Na ten následně zapůsobíme operátorem úplné časové derivace

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v_i} \right) = ma_i + q \frac{\partial A_i}{\partial x_j} v_j + q \frac{\partial A_i}{\partial t}.$$

Druhý člen bude

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = -q \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} + q v_j \frac{\partial A_j}{\partial x_i}.$$

Dosazením dostáváme

$$\begin{aligned} ma_i + q \frac{\partial A_i}{\partial x_j} v_j + q \frac{\partial A_i}{\partial t} + q \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} - q v_j \frac{\partial A_j}{\partial x_i} &= 0, \\ ma_i &= q \left(-\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} v_j \right). \end{aligned}$$

Jelikož platí $E_i = -\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial t}$ a $(\mathbf{v} \times \mathbf{B})_i = v_j \frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} v_j$, dostáváme

$$ma_i = q(E_i + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})_i), \quad i = 1, 2, 3$$

nebo vektorově

$$m\mathbf{a} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).$$

Vypočítejme konkrétní příklad částice s nábojem q v homogenní magnetické pole ve směru z , $\mathbf{E} = \mathbf{0}$, $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Pohybové rovnice se zjednoduší na $m\dot{\mathbf{v}} = m\mathbf{a} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$. Vyjádřeno po složkách dostáváme následující diferenciální rovnice

$$\dot{v}_1 = \frac{q}{m} B v_2, \quad \dot{v}_2 = -\frac{q}{m} B v_1, \quad \dot{v}_3 = 0.$$

Z třetí rovnice vidíme, že rychlost ve směru z je konstantní, $v_3 = v_{03}$. Při zderivování první rovnice podle času a dosazení za \dot{v}_2 z druhé dostáváme

$$\ddot{v}_1 + \left(\frac{q}{m} B \right)^2 v_1 = 0.$$

Řešení takové rovnice má tvar $v_1(t) = A \cos\left(\frac{q}{m} B t + \varphi_0\right)$, a tedy $v_2(t) = -A \sin\left(\frac{q}{m} B t + \varphi_0\right)$. Zintegrováním rovnic pro složky rychlosti získáme trajektorii částice

$$\mathbf{x}(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{m}{qB} A \sin\left(\frac{q}{m} B t + \varphi_0\right) + x_{01} \\ \frac{m}{qB} A \cos\left(\frac{q}{m} B t + \varphi_0\right) + x_{02} \\ v_{03} t + x_{03} \end{pmatrix}.$$

$A, \varphi_0, v_{03}, x_{01}, x_{02}, x_{03}$ jsou integrační konstanty, které se získají z počátečních podmínek. Výraz $\frac{qB}{m}$ má rozměr frekvence a nazývá se cyklotronová frekvence. Závěr: Trajektorie nabitě částice v homogenním magnetickém poli má tvar křivky zvané šroubovice s osou, která je rovnoběžná s magnetickým polem, a její frekvence oběhu nezávisí na rychlosti.

V roce 1905 Albert Einstein vydal svou speciální teorii relativity, čímž změnil popis fyzikálních dějů. K definování Lagrangeovy funkce jsme použili kinetickou energii $T = \frac{1}{2} m v^2$ z nerelativistické mechaniky. Definujeme relativistickou Lagrangeovu funkci jako $L = -m_0 c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - U$, kde m_0 je klidová hmotnost. Opět si vezmeme potenciální funkci pro částici v elektromagnetickém poli

$U = q(\varphi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$. K sestavení Lagrangeových rovnic z $L = -m_0c^2\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - q(\varphi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$ použijeme stejný postup jako v nerelativistickém případě. Zapsáno vektorově dostáváme

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right) = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).$$

Vidíme, že výsledek je podobný jako v nerelativistickém případě, jen se nám změnila hmotnost na relativistickou $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$, která není konstantní a nelze ji vytáhnout před derivaci.

Pokud bychom se omezili na homogenní magnetické pole, $\mathbf{E} = \mathbf{0}$, $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, dostáváme

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right) = q(\mathbf{v} \times \mathbf{B}).$$

Využijeme Einsteinův vzorec $E = mc^2$ a máme

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{E \mathbf{v}}{c^2} \right) = q(\mathbf{v} \times \mathbf{B}).$$

Vidíme, že Lagrangeova funkce nezávisí na čase, a tedy energie je integrálem pohybu, tj. konstantní. Derivace na ni nepůsobí a po úpravě máme

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{qc^2}{E} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}).$$

Tuto sadu diferenciálních rovnic vyřešíme stejně jako předtím. Trajektorie relativistické částice pak bude

$$\mathbf{x}(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E}{qBc^2} A \sin \left(\frac{c^2 q}{E} Bt + \varphi_0 \right) + x_{01} \\ \frac{E}{qBc^2} A \cos \left(\frac{c^2 q}{E} Bt + \varphi_0 \right) + x_{02} \\ v_{03}t + x_{03} \end{pmatrix}.$$

Zdá se, že se tento výsledek o moc neliší od nerelativistického případu. Důležité je si ale všimnout opět cyklotronové frekvence $\omega_{cr} = \frac{c^2 q B}{E} = \frac{qB}{m} = \frac{qB}{m_0} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$. Zde už frekvence oběhu závisí na rychlosti částice. Čím je rychlost větší, tím je frekvence pomalejší.

1.2 Maxwellovy rovnice

Samotné elektromagnetické pole popisujeme pomocí dvou sérií Maxwellových–Lorentzových rovnic:

$$\begin{array}{ll} \text{I. série:} & \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}, & \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mu_0 \mathbf{j}, \\ \text{II. série:} & \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \end{array}$$

kde $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ je hustota elektrického náboje, $\mathbf{j} = \mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ proudová hustota, ε_0 permitivita vakua a μ_0 permeabilita vakua. Proudová hustota $\mathbf{j} = \mathbf{v}\rho$, kde \mathbf{v} je rozložení rychlosti nábojů.

Konstanty ε_0 a μ_0 jsou uměle zavedeny v soustavě jednotek SI. Permeabilita je definovaná jako $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Hm}^{-1}$, permitivita pak Weberovým vztahem $\varepsilon_0\mu_0 = \frac{1}{c^2}$, $[\varepsilon_0] = \text{Fm}^{-1}$.

Tyto rovnice popisují elektromagnetické pole buzené částicemi (popsané ρ a \mathbf{j}) ve vakuu nebo v látce na mikroskopické úrovni. Všimněme si, že pokud nemáme časově proměnlivá (nestacionární) pole, dostáváme nezávislé rovnice pro elektrické a magnetické pole. V nestacionárním případě už ale závislé jsou a popisujeme elektromagnetické pole.

Ve fyzice vždy hledáme veličiny, které se zachovávají, a jedna z nich je náboj. Zákon zachování náboje je vyjádřený v diferenciálním tvaru rovnicí kontinuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0.$$

Rovnici kontinuity lze odvodit i z I. série Maxwellových rovnic. Rovnici $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0\varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mu_0\mathbf{j}$ upravíme a na celou zapůsobíme operátorem divergence, poté využijeme identitu pro diferenciální operátory a rovnici $\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$.

$$0 = -\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{B} + \mu_0\varepsilon_0 \nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mu_0 \nabla \cdot \mathbf{j} = \mu_0 \left(\varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{E} + \nabla \cdot \mathbf{j} \right) = \mu_0 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} \right).$$

Dále můžeme z Maxwellových rovnic dostat i rovnice elektromagnetické vlny. Na rovnice s operátorem rotace zapůsobíme ještě jednou operátorem rotace a dostáváme

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{B} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E} + \mu_0\varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \mu_0 \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t}, \\ 0 &= \nabla \times \nabla \times \mathbf{B} - \mu_0\varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{E} - \mu_0 \nabla \times \mathbf{j} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}) - \Delta \mathbf{B} + \mu_0\varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} - \mu_0 \nabla \times \mathbf{j}. \end{aligned}$$

Po dosazení z ostatních dvou rovnic

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{E} - \mu_0\varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} &= \frac{1}{\varepsilon_0} \nabla \rho + \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t}, \\ \Delta \mathbf{B} - \mu_0\varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} &= -\mu_0 \nabla \times \mathbf{j}. \end{aligned}$$

Připomeňme Weberův vztah $\mu_0\varepsilon_0 = \frac{1}{c^2}$. Máme tedy nehomogenní vlnové rovnice pro elektromagnetické pole. Pro $\rho = \mathbf{j} = 0$ dostáváme homogenní vlnovou rovnici.

V předchozí části jsme rozepsali veličiny \mathbf{E} a \mathbf{B} pomocí skalárního a vektorového potenciálu. Jejich zavedení je spjato s II. sérií Maxwellových rovnic. Rovnici $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ můžeme splnit zavedením vektorového potenciálu

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}.$$

Dosazením toho potenciálu do první rovnice z II. série získáváme $\nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0$ a lze zavést skalární potenciál

$$\varphi = \varphi(\mathbf{r}, t), \quad -\nabla \varphi = \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t},$$

který ji splní. Dále přepíšeme I. sérii pomocí potenciálů:

$$\begin{aligned} \frac{\rho}{\varepsilon_0} &= \nabla \cdot \left(-\nabla \varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = -\Delta \varphi - \nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \left(\varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \right), \\ \mu_0\mathbf{j} &= \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} + \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \varphi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \Delta \mathbf{A} + \varepsilon_0\mu_0 \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2}, \end{aligned}$$

a upravíme na

$$\begin{aligned}\Delta \varphi - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} &= -\frac{\rho}{\varepsilon_0} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right), \\ \Delta \mathbf{A} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} &= -\mu_0 \mathbf{j} + \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right).\end{aligned}$$

Jelikož nejsou potenciály zavedené jednoznačně, lze vždy vybrat takové, které splňují Lorenzovu podmínku

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0.$$

Při zavedení d'Alembertova operátoru $\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t}$ mají rovnice tvar

$$\begin{aligned}\square \varphi &= -\frac{\rho}{\varepsilon_0}, \\ \square \mathbf{A} &= -\mu_0 \mathbf{j}.\end{aligned}$$

Řešení Maxwellových rovnic jsme tedy převedli na úlohu řešení nehomogenních vlnových rovnic pro potenciály splňující Lorenzovu podmínku.

Pole jako fyzikální objekt v Minkowského prostoročasu popisujeme pomocí hladkých funkcí $q_a(x^\mu)$, které závisí na souřadnicích

$$(x^\mu) = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

a kde a je blíže neurčený index jednotlivých funkcí. Při zavádění Hamiltonova principu v analytické mechanice jsme zmínili, že se dá formulovat i v jiných oblastech fyziky. Rádi bychom ho tedy využili pro odvození Maxwellových rovnic. Po aplikování na pole dostáváme následující znění:

Skutečný časový vývoj soustavy polí se děje s takovou závislostí q_a na x^μ , pro kterou akce

$$S[q_a(x^\mu)] = \frac{1}{c} \int_{V^*} \mathcal{L}(q_a, q_{a,\mu}, x^\mu) dV^*$$

nabývá stacionární hodnoty vzhledem k variacím $\delta q_a(x^\mu)$ splňující podmínku pevných konců, která požaduje nulovou variaci na hranici ∂V^ oblasti V^* , $\delta q_a(x^\mu)|_{\partial V^*} = 0$.*

Integrace probíhá přes oblast V^* čtyřprostoru, jehož element $dV^* = dx^0 dx^1 dx^2 dx^3 = c dt dV$. Pokud bychom integrovali přes oblast $V^* = \langle ct_1, ct_2 \rangle \times V$, můžeme napsat akci jako

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_V \mathcal{L} dV.$$

V porovnání s akcí v Hamiltonově principu vidíme $L = \int_V \mathcal{L} dV$. Funkce \mathcal{L} tedy představuje hustotu Lagrangeovy funkce a nazývá se lagrangián. Z Hamiltonova principu plynou Lagrangeovy rovnice pro pole v Minkowského prostoročase ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_{a,\mu}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_a} = 0.$$

K odvození Maxwellových rovnic si nejdříve definujeme čtyřrychlost $(u^\mu) = \frac{d(x^\mu)}{d\tau}$, kde τ je vlastní čas. Poté čtyřproud má tvar $(j^\mu) = \rho_0(u^\mu) = \begin{pmatrix} \rho c \\ \mathbf{j} \end{pmatrix}$, kde ρ_0 je klidová hustota náboje. Pomocí něho můžeme rovnici kontinuity přepsat do kovariantního tvaru

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = \frac{\partial c\rho}{\partial ct} + \frac{\partial j^i}{\partial x^i} = \frac{\partial j^\mu}{\partial x^\mu} = 0.$$

Při zavedení čtyřpotenciálu $(A^\mu) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}$ lze přepsat d'Albertovy rovnice pro potenciály na

$$\square A^\mu = -\mu_0 j^\mu.$$

Pomocí čtyřpotenciálu zavedeme tenzor elektromagnetického pole

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu}.$$

Po zvednutí indexů a dosazení intenzity elektrického pole a magnetické indukce za potenciály dostáváme

$$(F^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{E_1}{c} & -\frac{E_2}{c} & -\frac{E_3}{c} \\ \frac{E_1}{c} & 0 & -B_3 & B_2 \\ \frac{E_2}{c} & B_3 & 0 & -B_1 \\ \frac{E_3}{c} & -B_2 & B_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Duální tenzor $F_{\kappa\lambda}^* = \frac{1}{2}\varepsilon_{\kappa\lambda\mu\nu}F^{\mu\nu}$ má pak po zdvižení indexů tvar

$$(F^{*\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 0 & B_1 & B_2 & B_3 \\ -B_1 & 0 & -\frac{E_3}{c} & \frac{E_2}{c} \\ -B_2 & \frac{E_3}{c} & 0 & -\frac{E_1}{c} \\ -B_3 & -\frac{E_2}{c} & -\frac{E_1}{c} & 0 \end{pmatrix}.$$

Maxwellovy rovnice tak můžeme zapsat v kovariantním tvaru

$$\text{I. série: } \frac{\partial F^{\mu\nu}}{\partial x^\nu} = -\mu_0 j^\mu, \quad \text{II. série: } \frac{\partial F^{*\mu\nu}}{\partial x^\nu} = 0.$$

Pokud zavedeme lagrangián

$$\mathcal{L}(A_\mu, A_{\mu,\nu}, x^\nu) = \mathcal{L}_f + \mathcal{L}_{mf} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - j^\mu A_\mu,$$

kde \mathcal{L}_f je lagrangián pro elektromagnetické pole a \mathcal{L}_{mf} je interakční lagrangián, dostaneme pomocí Lagrangeových rovnic

$$\frac{\partial}{\partial x^\nu} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_{\mu,\nu}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\mu} = 0$$

I. sérii Maxwellových rovnic. II. série je automaticky splněna potenciály.

Kapitola 2

Magnetické pole v kvantové mechanice

Klasická fyzika dokázala vysvětlit mnoho přírodních jevů. Zdálo se, že jevy, které ještě vysvětleny nebyly, brzy budou a pátrání po fundamentálních přírodních zákonech skončí. Nakonec ale jejich vyřešení vedlo k jedné z největších revolucí ve fyzice. V mikrosvětě byly takovými jevy například záření absolutně černého tělesa, fotoelektrický jev, nebo stavba atomu. Z jejich řešení se rozvinula kvantová mechanika. Na rozdíl od Newtonových zákonů mechaniky nebo Einsteinovy obecné teorie relativity nebyla kvantová mechanika přednesena pouze jednou osobou. Její hlavní teoretický výzkum probíhal v první polovině dvacátého století a podíleli se na něm například Niels Bohr, Werner Heisenberg, nebo Erwin Schrödinger. Jelikož se mikrosvět neřídí stejnými zákony, které byly postupně objevovány pro náš svět v lidském měřítku, často jsou předpovědi kvantové mechaniky v rozporu s naší intuicí. Richard Feynman, jeden z největších fyziků všech dob, řekl: “Myslím, že můžu s jistotou říct, že kvantové mechanice nerozumí nikdo.” Některé její důsledky neumíme ani dodnes uspokojivě interpretovat. Experimenty nicméně mluví jasně a matematická teorie je dokáže celkem dobře popsat.

2.1 Kvantová mechanika

K přechodu z klasické fyziky na kvantovou mechaniku nám pomůže Hamiltonův formalismus. Pomocí něj popisujeme stav částice vektorem ve fázovém prostoru složený z polohy \mathbf{x} a hybnosti \mathbf{p} . Pozorovatelné (veličiny) pak popisujeme reálnou funkcí v proměnných \mathbf{x} a \mathbf{p} , jejíž hodnoty odpovídají výsledku měření dané veličiny. V kvantové mechanice je prostor všech možných stavů částice separabilní Hilbertův prostor \mathcal{H} . Stav kvantové částice popisujeme nenulovým vektorem $\psi \in \mathcal{H}$. Vektoru ψ popisující stav říkáme vlnová funkce a její fyzikální interpretace je statistická. Vlnová funkce je úměrná hustotě pravděpodobnosti nalezení částice v daném bodě. Pozorovatelné v kvantové mechanice popisujeme pomocí samosdružených operátorů na stavovém prostoru \mathcal{H} . Možné hodnoty výsledků měření pozorovatelných pak odpovídají spektru příslušných operátorů. Pro samosdružený operátor platí, že jeho spektrum je reálné. Definujme operátor pro kartézské složky polohy a hybnosti

$$\left(\hat{X}_j\psi\right)(\mathbf{x}) := x_j\psi(\mathbf{x}), \quad \left(\hat{P}_j\psi\right)(\mathbf{x}) := -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x_j}(\mathbf{x}).$$

Index j je určen rozměrem popisovaného fyzikálního systému a \hbar je redukovaná Planckova konstanta. Operátory ostatních pozorovatelných určíme z principu korespondence, tj. za proměnné

\mathbf{x} a \mathbf{p} dosadíme jejich operátory. Časový vývoj stavu částice je určen Schrödingerovou rovnicí

$$\hat{H}\psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t),$$

s počáteční podmínkou $\psi(\mathbf{x}, t_0) \equiv \psi(\mathbf{x})$, kde hamiltonián \hat{H} představuje operátor energie.

2.1.1 Částice v elektromagnetickém poli

Budeme uvažovat pouze případ nabitě částice, která neovlivňuje dané elektromagnetické pole, s klasickým potenciálem. Jako stavový prostor částice máme $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$. Pro elektromagnetický potenciál $U = q(\varphi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$ je hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} (\hat{\mathbf{P}} - q\hat{\mathbf{A}})^2 + q\hat{\varphi} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} - \frac{q}{M}\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{2M} (\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{A}}) + \frac{q^2\hat{\mathbf{A}}^2}{2M} + q\hat{\varphi}.$$

Pro jednoznačnost hamiltoniánu použijeme Coulombovu kalibraci

$$[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{A}}] = -i\hbar\nabla \cdot \mathbf{A} = 0.$$

Operátory $\hat{\mathbf{A}}$ a $\hat{\mathbf{P}}$ pak spolu komutují. Nechť

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{B}} \times \hat{\mathbf{X}}.$$

Potom je magnetické pole homogenní a pro slabé magnetické pole můžeme člen $\frac{q^2\hat{\mathbf{A}}^2}{2M}$ zanedbat. Dosazením do hamiltoniánu získáváme

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + q\hat{\varphi} - \frac{q}{2M}\hat{\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{H}_0 - \hat{\mathbf{B}} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_L,$$

kde $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{X}} \times \hat{\mathbf{P}}$ je operátor momentu hybnosti. Tento hamiltonián lze rozdělit na část

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + q\hat{\varphi},$$

která nezávisí na magnetickém poli, a na $\hat{\mathbf{B}} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_L$, kde

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_L = \frac{q}{2M}\hat{\mathbf{L}}$$

je operátor orbitálního magnetického momentu. Dále předpokládejme, že je skalární potenciál sféricky symetrický a magnetické pole míří ve směru z , tedy

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{qB}{2M}\hat{L}_3.$$

Poté hamiltonián \hat{H}_0 a operátor L_3 mají stejné vlastní funkce $\psi_{n,l,m}$. Pomocí nich pak dostaneme jejich vlastní čísla

$$\hat{H}_0\psi_{n,l,m} = E_{n,l}\psi_{n,l,m}, \quad \hat{L}_3\psi_{n,l,m} = m\hbar\psi_{n,l,m},$$

$n \in \mathbb{N}_0$ je radiální kvantové číslo, $l \in \mathbb{N}_0$ orbitální kvantové číslo a $m \in \mathbb{Z}$ magnetické kvantové číslo s podmínkou $|m| \leq l$. Energie $E_{n,l}$ zde nebudeme uvádět explicitně, ale stáčí nám vědět, že nezávisí na m . Pro celkový hamiltonián dostáváme

$$\hat{H}\psi_{n,l,m} = \left(E_{n,l} - \frac{qB}{2M}m\hbar \right) \psi_{n,l,m}.$$

Tímto způsobem bychom mohli s jistou nepřesností popsat atom vodíku, když bychom uvažovali proton jako nekonečně těžký vůči elektronu ($q = -e$), který by ho nedokázal ovlivnit a nacházel se tak v elektrostatickém potenciálu. Elektron pak může nabývat pouze jisté energetické hladiny (orbitaly), které nezávisí na m a má nenulový základní stav (stabilita hmoty). Pokud ale atom vložíme do homogenního magnetického pole, energetické hladiny se rozštěpí a závisí i na m ,

$$E_{n,l,m} = E_{n,l} + \frac{eB}{2M}m\hbar.$$

Toto bylo experimentálně pozorováno, jde o (normální) Zeemanův jev. Počet hladin ovšem experimentu neodpovídá.

K opravě musíme vzít v úvahu vlastní magnetický moment elektronu způsobený jeho vlastním momentem hybnosti - spinem. Spin elektronu popisujeme operátorem $\hat{\mathbf{S}}$ na stavovém prostoru $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$. Označíme $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e}$ (Bohrův magneton). Vlastní magnetický moment elektronu pak definujeme jako

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_S = -\frac{2\mu_0}{\hbar}\hat{\mathbf{S}}.$$

Složky operátoru $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3)$ jsou reprezentovány Pauliho maticemi

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

a vlastní čísla operátorů \hat{S}_j , $j = 1, 2, 3$ nabývají hodnot $\pm \frac{\hbar}{2}$.

Pauliho hamiltonián pro elektron v elektromagnetickém poli má poté tvar

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{P}} + e\hat{\mathbf{A}} \right)^2 - e\hat{\varphi} - \hat{\mathbf{B}} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_S,$$

kde m_e je hmotnost elektronu. Stavový prostor bude $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes \mathbb{C}^2$. Pomocí stejného postupu jako v předchozím případě sféricky dostáváme pro sféricky symetrický skalární potenciál a homogenní magnetické pole ve směru z

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 - \hat{\mathbf{B}} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_L - \hat{\mathbf{B}} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_S \\ &= \hat{H}_0 + \frac{\mu_0}{\hbar} B \left(\hat{L}_3 + 2\hat{S}_3 \right). \end{aligned}$$

S vlastními vektory $\psi_{n,l,m,\pm} = \psi_{n,l,m} \otimes \psi_{\pm}$ můžeme tedy psát

$$\hat{H}\psi_{n,l,m,\pm} = (E_{n,l} + \mu_0 B(m \pm 1)) \psi_{n,l,m,\pm}. \quad (2.2)$$

Stavy v $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes \mathbb{C}^2$ můžeme také zapsat jako dvoukomponentovou funkci

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

kde $\psi_1, \psi_2 \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$. Bezčasovou Pauliho rovnicí nazveme

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

a časovou

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}.$$

Po jistém výpočtu můžeme řešení časové Pauliho rovnice pro Pauliho hamiltonián zapsat ve tvaru

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}, t) \\ \psi_2(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu_0\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}t\right) \begin{pmatrix} \phi_1(\mathbf{x}, t) \\ \phi_2(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix},$$

kde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ a $\phi_1(\mathbf{x}, t), \phi_2(\mathbf{x}, t) \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ jsou řešení Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}_1\phi = i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad \text{pro} \quad H_1 = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{P}} + e\hat{\mathbf{A}} \right)^2 - e\hat{\phi}.$$

Pro náš speciální případ jsou vlastní funkce Pauliho hamiltoniánu

$$\psi_{n,l,m,+} = \begin{pmatrix} \psi_{n,l,m} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \psi_{n,l,m,-} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{n,l,m} \end{pmatrix},$$

kterým odpovídají vlastní čísla

$$E_{n,l,m,\pm} = (E_{n,l} + \mu_0 B(m \pm 1)).$$

A člen

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu_0\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}t\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu_0 B \cdot \sigma_3 t\right)$$

pak vyjadřuje precesi spinu kolem osy z , tedy směru magnetického pole.

2.2 Relativistická kvantová mechanika

Z předchozí kapitoly víme, že u velmi rychle se pohybujících objektů, jakými částice umí být, bychom měli vzít v potaz relativistické jevy. Chtěli bychom tedy propojit speciální teorii relativity s kvantovou mechanikou. Souřadnice ve speciální teorii relativity transformuje pomocí Lorentzovy transformace. Schrödingerova vlnová rovnice definovaná pro nerelativistický hamiltonián

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

ovšem není pod takovou transformací invariantní. Jelikož chceme popisovat stavy v Minkowského prostoročasu, řády u prostorové a časové derivace by měly být stejné.

Prvním pokusem splnit tyto požadavky bylo použití relativistického hamiltoniánu pro volnou částici

$$H = c\sqrt{p^2 + m^2c^2}.$$

Dosazením do Schrödingerovy rovnice a použití principu korespondence dostaneme tzv. odmocninu Kleinovy–Gordonovy rovnice

$$\sqrt{-c^2\hbar^2\Delta + m^2c^4}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Pokud bychom takový operátor aplikovali na stav po druhé, získáme Kleinovu–Gordonovu rovnici

$$(-c^2\hbar^2\Delta + m^2c^4)\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}.$$

Pomocí d'Alembertova operátoru ji můžeme převést do známého tvaru

$$\left(\square + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi = 0.$$

Taková rovnice už vůči Lorentzovy transformace invariantní je, ale má jiné nedostatky. Hlavní problém je druhá časová derivace. Pro získání časového vývoje stavu částice bychom potřebovali další počáteční podmínku. Rovnice by měla obsahovat pouze první časovou derivaci.

K vyřešení tohoto nedostatku rozepsal Dirac relativistickou energii

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}, \quad (2.3)$$

ze které je hamiltonián odvozený, do vztahu

$$E = c \sum_{i=1}^3 \alpha_i p_i + \beta mc^2 = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2, \quad (2.4)$$

kde $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ a β jsou zatím blíže neurčené koeficienty. Ty získáme následující úvahou. Vzhledem k tomu, že se vyskytují v rovnici 2.3 pouze kvadratické členy, $\boldsymbol{\alpha}$ a β by měly být antikomutativní. Přirozeně je tedy budeme reprezentovat čtvercovými maticemi. Po umocnění obou rovnic (2.3) a (2.4) na druhou a jejich porovnání dostáváme následující podmínky

$$\begin{aligned} \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i &= 2\delta_{ij}\mathbb{I}, \quad i, j = 1, 2, 3, \\ \alpha_i\beta + \beta\alpha_i &= \mathbb{O}, \quad i = 1, 2, 3, \\ \beta^2 &= \mathbb{I}, \end{aligned}$$

kde \mathbb{I} je jednotková matice a \mathbb{O} nulová. Z těchto podmínek a vlastností stopy matice platí

$$\text{tr } \alpha_i = \text{tr } \beta^2\alpha_i = -\text{tr } \beta\alpha_i\beta = -\text{tr } \alpha_i\beta\beta = -\text{tr } \alpha_i = 0.$$

Jelikož platí $\alpha_i^2 = \mathbb{I}$, její vlastní čísla jsou buď 1 nebo -1 . Z obou těchto argumentů plyne, že jsou dimenze matic sudé. Mimo to, matice α_i a β by měly být samosdružené, jelikož pomocí nich bychom chtěli reprezentovat pozorovatelnou - energii. Tyto podmínky splňují například čtyřrozměrné matice

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & -\mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \sigma_i \\ \sigma_i & \mathbb{O} \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, 3,$$

kde σ_i jsou Pauliho matice (2.1). Tato reprezentace byla navržena Diracem a po dosazení dostáváme Diracovu rovnici

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) = H_D\psi(\mathbf{x}, t),$$

kde

$$H_D = -i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 = \begin{pmatrix} mc^2\mathbb{I} & -i\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \\ -i\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla & -mc^2\mathbb{I} \end{pmatrix}$$

a

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}, t) \\ \psi_2(\mathbf{x}, t) \\ \psi_3(\mathbf{x}, t) \\ \psi_4(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^4.$$

Pokud označíme $\gamma^0 = \beta$, $\gamma^i = \beta\alpha_i$ a $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$, můžeme ji zapsat ve tvaru

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi = 0.$$

Diracova rovnice popisuje hmotné částice se spinem 1/2 jako jsou kvarky nebo elektron.

2.3 Kvazi-hermitovská kvantová mechanika

Během studia kvantové mechaniky se objevily i nestandardní teorie. V roce 1992 formulovali Scholtz, Geyer a Hahne pro účely jaderné fyziky návrh, že pozorovatelné můžeme reprezentovat i nesamosdruženými operátory. Řekneme, že operátor H je kvazi-hermitovský pokud splňuje

$$H^* = \Theta H \Theta^{-1}, \quad (2.5)$$

kde H^* je sdružený operátor a Θ je pozitivní omezený invertovatelný operátor, jehož inverze je také omezená. Operátor Θ nazýváme metrikou. Takový koncept je v souladu s klasickou kvantovou mechanikou, když skalární součin (\cdot, \cdot) v Hilbertově prostoru modifikujeme na $(\cdot, \Theta\cdot)$. Takový výraz je opět skalárním součinem. Později ukážeme, že H je kvazi-hermitovský, právě když je podobný samosdruženému operátoru. Kvazi-hermitovská kvantová mechanika tedy není rozšíření klasické kvantové mechaniky, ale nestandardní, potenciálně užitečná reprezentace. I když koncept operátorů splňujících vztah (2.5) zmínil už v roce 1961 ve svých pracích Dieudonné, nevyvolalo to ve vědecké komunitě žádný velký zájem. To se stalo až po přednesení jiné nestandardní teorie: \mathcal{PT} -symetrické kvantové mechanice. S \mathcal{PT} -symetrickou kvantovou mechanikou přišli v roce 1998 Bender a Boetcher. Ti si všimli, že velká třída operátorů s jistou symetrií má reálné spektrum, aniž by byly samosdružené. Symetrie pro daný operátor H spočívá v komutační relaci

$$[H, \mathcal{PT}] = 0,$$

kde

$$(\mathcal{P}\psi)(x) = \psi(-x)$$

je operátor prostorové inverze a

$$(\mathcal{T}\psi)(x) = \overline{\psi(x)}$$

je operátor časové inverze. \mathcal{PT} -symetrické operátory nacházejí uplatnění například v optice. Zanedlouho poté se objevily myšlenky, že takové operátory jsou fyzikálně relevantní, pouze pokud jsou kvazi-hermitovské.

Kapitola 3

Komplexní magnetické pole

3.1 Lee–Yang zeros

K popisu fázové přechodu se ve statistické fyzice využívají imaginární, resp. komplexní pole. V roce 1952 C. N. Yang a T. D. Lee publikovali svoji teorii ([11],[12]), ve které fázové přechody úzce souvisí s partiční sumou daného systému. Stavová rovnice a vlastnosti přechodu systému závisí na kořenech partiční sumy, tedy na bodech komplexní roviny, kde je nulová. Tyto kořeny se anglicky nazývají Lee–Yang zeros. Nechť máme fázový přechod systému popsany ferromagnetickým Isingovým modelem. V takovém případě je partiční suma polynomiální funkcí s proměnnou

$$z = \exp\left(-\frac{H}{kT}\right),$$

kde H je magnetické pole, k Boltzmannova konstanta a T teplota. Jelikož má kladné koeficienty, jsou její kořeny komplexní. Uvažovat komplexní magnetické pole má tedy význam v matematické teorii. Až dosud se ale předpokládalo, že projevy komplexních hodnot fyzikálních parametrů nelze zkoumat v reálném světě. V roce 2015 byl zveřejněn článek [14] skupiny vědců, kteří takové pozorování uskutečnili. Ve svém experimentu se zaměřili na kvantovou koherenci ve spinovém modelu Isingova typu. Navazovali tím na článek [13], kde bylo ukázáno, že Lee–Yang zeros komplexního magnetického pole jsou ekvivalentní s časy, kdy je taková koherence nulová. Toto pozorování má velký význam pro další studium statistické fyziky s komplexními parametry, přičemž právě kvantová koherence může hrát důležitou roli.

3.2 Stabilita černé díry

Černé díry se tradičně v obecné teorii relativity popisují v rámci celého prostoročasu. To má jisté nevýhody, a proto existují modely, které popisují černé díry pouze lokálně pomocí tzv. zachycených ploch (angl. trapped surfaces), [15]. V [16] byla navržena zajímavá analogie mezi popisem zdánlivého horizontu a nabitě kvantové částice. Zdánlivý horizont je plocha, která dělí prostoročas na části, kde jsou kvůli zakřivení světelné paprsky zachycené a kde ještě dokáží uniknout. Popisuje ho stabilní "marginally outer trapped surface"(MOTS). Nechť máme prostorupodobnou uzavřenou orientovatelnou plochu S kodimenze 2 vloženou do n -dimenzionálního prostoročasu (\mathcal{M}, g_{ab}) . Prostoročasovou Levi–Civitovu konexi značíme jako ∇_a a G_{ab} je Einsteinův tenzor. Na ploše S pak máme indukovanou metriku q_{ab} , Levi-Civitovu konexi D_a , Ricciho skalár R_S a míru η_S . Dále vezmeme světlupodobné vektory l^a (vnější) a k^a (vnitřní) mířící do

budoucnosti, jejichž lineární obal je normálový bundle $T^\perp\mathcal{S}$. Platí, že $l^a l_a = 0$, $k^a k_a = 0$ a jsou normalizované jako $l^a k_a = -1$. Definujme expanzi $\theta^{(l)}$ a torzi Ω_a

$$\theta^{(l)} \equiv q^{ab} \nabla_a l_b, \quad \Omega_a \equiv -k^c q^d{}_a \nabla_d l_c.$$

Plocha \mathcal{S} je MOTS, pokud $\theta^{(l)} = 0$. Řekneme, že MOTS \mathcal{S} je stabilní, pokud existuje funkce $\psi > 0$ taková, že $\delta_{\psi k} \theta^{(l)} < 0$, kde $\delta_{\psi k}$ je operátor deformace. To nám umožňuje pracovat s eliptickým operátorem $L_{\mathcal{S}}$ působící na prostoru $L^2(\mathcal{S}, \eta_{\mathcal{S}})$, který je definovaný jako

$$L_{\mathcal{S}} \psi \equiv \delta_{\psi(-k)} \theta^{(l)}$$

a kterého můžeme explicitně zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} L_{\mathcal{S}} &= -\Delta + 2\Omega^a D_a + D_a \Omega^a - |\Omega|^2 + \frac{1}{2} R_{\mathcal{S}} - G_{ab} k^a l^b \\ &= -(D - \Omega)^2 + \frac{1}{2} R_{\mathcal{S}} - G_{ab} k^a l^b. \end{aligned}$$

Pokud bychom substituovali

$$\Omega_a \leftrightarrow \frac{ie}{\hbar c} A_a, \quad R_{\mathcal{S}} \leftrightarrow \frac{4me}{\hbar^2} \phi, \quad G_{ab} k^a l^b \leftrightarrow -\frac{2m}{\hbar^2} V,$$

dostáváme

$$\frac{\hbar^2}{2m} L_{\mathcal{S}} \leftrightarrow \hat{H},$$

kde \hat{H} je hamiltonián

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{i\hbar e}{mc} A^a D_a + \frac{i\hbar e}{2mc} D_a A^a + \frac{e^2}{2mc^2} A_a A^a + e\phi + V \\ &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar D - \frac{e}{c} A \right)^2 + e\phi + V \end{aligned}$$

pro nerelativistickou částici s hmotností m a nábojem e pohybující se po \mathcal{S} ve skalárním potenciálu ϕ , vektorovém potenciálu A^a a dalším blíže neurčeném potenciálu V . Jelikož je torze Ω_a reálná, musí být magnetický potenciál A_a čistě imaginární. Takováto analogie by mohla přenést dobře prostudovanou teorii nabitě kvantové částice do bohaté, ale zatím tolik neprozkoumané problematiky MOTS.

Kapitola 4

Matematický aparát

Ve druhé kapitole jsme zmínili, že v kvantové mechanice popisujeme pozorovatelné pomocí samosdružených operátorů na stavovém Hilbertově prostoru. V kvantové mechanice tedy využijeme teorii funkcionální analýzy. V této kapitole si vyjasníme nejen tyto pojmy. Obsah je čerpám zejména z [18], [19], [9], [20] a v poslední části pak z [21], [8].

4.1 Základní pojmy

Hilbertovým prostorem nazveme vektorový prostor se skalárním součinem, který je úplný v metrice indukované skalárním součinem. Obecně ho bereme jako nekonečně dimenzionální. Skalární součin značíme (\cdot, \cdot) a držíme se fyzikální konvence, tedy linearity v druhém argumentu a antilinearitu v prvním.

Řekneme, že lineární operátor $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ je hustě definovaný, pokud pro jeho definiční obor platí $\overline{D(A)} = \mathcal{H}$. Množinu všech takových operátorů značíme symbolem $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. Sdruženým operátorem k operátoru $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ nazýváme operátor A^* s definičním oborem

$$D(A^*) := \{\phi \in \mathcal{H} : \exists \eta \in \mathcal{H}, \forall \psi \in D(A), (\phi, A\psi) = (\eta, \psi)\}.$$

Platí, že pro každé ϕ existuje právě jedna η . Proto jsme mohli zavést pro sdružený operátor speciální označení A^* a $A^*\phi := \eta$.

Řekneme, že operátor $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ je symetrický, pokud

$$(\phi, A\psi) = (A\phi, \psi), \quad \forall \phi, \psi \in D(A).$$

Vidíme, že se pro vektory z $D(A)$ chová jako sdružený operátor A^* . $D(A^*)$ ale obecně není stejný jako $D(A)$, je jeho nadmnožinou. Takovou skutečnost znázorňujeme $A \subset A^*$. Operátor splňující

$$A = A^*$$

se nazývá samosdružený. Pro úplnost zde uveďme, že operátor A je normální, pokud

$$AA^* = A^*A.$$

Každý samosdružený operátor je také normální. Pokud bychom měli symetrický operátor A a dokázali udělat jeho symetrické rozšíření A' , platí

$$A \subset A' \subset A'^* \subset A^*.$$

Z tohoto vztahu vidíme, že se můžeme pokusit rozšířením symetrického operátoru získat samosdružený. Samosdružený operátor je automaticky maximální symetrický operátor, tedy nemá žádné další vlastní symetrické rozšíření. Existují ovšem i maximální symetrické operátory, které nejsou samosdružené.

U operátorů bychom rádi zachovali vlastnost převod konvergentních posloupností na opět konvergentní, tedy pokud $x_n \rightarrow x$, pak $Ax_n \rightarrow Ax$. Přirozeně to můžeme docílit spojitými operátory, ale ty jsou zároveň omezené a my chceme pracovat i s neomezenými. K tomu nám pomůžou uzavřené operátory. Poznamenejme, že úplný normovaný vektorový prostor nazýváme Banachův a Hilbertův prostor je také Banachův.

Nechť \mathcal{X}, \mathcal{Y} jsou Banachovy prostory a zobrazení $A : D(A) \subset \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$. Množinu

$$\Gamma(A) = \{[x, Ax] \in \mathcal{X} \oplus \mathcal{Y} : x \in D(A)\}$$

nazveme grafem operátoru A . Operátor A je uzavřený, pokud jeho graf je uzavřená množina v Banachově prostoru $\mathcal{X} \oplus \mathcal{Y}$. Pak lze vyslovit tvrzení, že platí

$$(\forall (x_n)_{n=1}^{\infty} \subset D(A), x_n \rightarrow x \text{ v } \mathcal{X} \text{ a } Ax_n \rightarrow y \text{ v } \mathcal{Y} \Rightarrow x \in D(A) \text{ a } Ax = y)$$

právě tehdy, když je A uzavřený. U jistých operátorů můžeme dostat rozšířením jejich uzávěr, který bude pro nás právě analogií spojitého rozšíření.

Z definice sdružených operátorů lze limitními přechody ukázat, že jsou uzavřené. Pokud má operátor uzavřené rozšíření operátoru, existuje i nejmenší takové, nazýváme ho uzávěr operátoru. Z těchto bodů plyne, že pro symetrické operátory existuje uzávěr a platí

$$A \subset \bar{A} \subset A^*.$$

Přes limitní přechod jde ukázat, že jejich uzávěr je opět symetrický. Speciálně samosdružené operátory jsou uzavřené. Pro uzavřený normální operátor A platí

$$\|A\psi\| = \|A^*\psi\|, \quad \forall \psi \in D(A) = D(A^*). \quad (4.1)$$

Pokud $A^* \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, pak z definice sdruženého operátoru plyne pro každé $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$,

$$A \subset A^{**}.$$

Opačná inkluze neplatí obecně, jak nám říká následující tvrzení. Jestliže $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, pak \bar{A} existuje právě tehdy, když $A^* \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Jsou-li tyto podmínky splněny, platí

$$A^{**} = \bar{A} \text{ a } (\bar{A})^* = A^*.$$

Dojdeme, že operátor $A \in \mathcal{L}(\mathcal{X})$, kde \mathcal{X} je normovaný prostor, nazveme omezeným, jestliže

$$\exists c \geq 0, \forall x \in \mathcal{X}, \|Ax\| \leq c\|x\|,$$

a operátor A definovaný na celém prostoru \mathcal{X} kompaktním, pokud zobrazuje libovolnou omezenou množinu v \mathcal{X} na prekompaktní.

Spektrum

Pro operátory na konečně dimenzionálním prostoru se zavádí spektrum jako množina vlastních čísel. Pokud existuje $\lambda \in \mathbb{C}$ a nenulové $x \in \mathcal{X}$ takové, že

$$Ax = \lambda x,$$

nazýváme dané λ vlastní číslo operátoru A a x vlastním vektorem A (pro vlastní hodnotu λ). To nastává pokud není operátor $A - \lambda I$ injektivní, tedy

$$\text{Ker}(A - \lambda I) \neq \{0\}.$$

Na nekonečných dimenzích má ale smysl pojem spektra rozšířit. Řekneme, že λ leží ve spektru, pokud operátor $A - \lambda I$ není bijekcí. To může nastat, i pokud je operátor $A - \lambda I$ injektivní, ale není surjektivní. Na konečné dimenzi platí, není-li operátor injektivní, není ani surjektivní a naopak. Zobecněná definice spektra na konečné dimenzi pak automaticky přechází do definice základní.

Nechť A je uzavřený operátor a \mathcal{X} je Banachův prostor. Rezolventní množinou operátoru A nazveme $\rho(A) \subset \mathbb{C}$ takové, že

$$\forall \lambda \in \mathbb{C}, \lambda \in \rho(A) \iff \text{Ker}(A - \lambda I) = \{0\} \wedge \text{Ran}(A - \lambda I) = \mathcal{X}.$$

Spektrum operátoru A je poté množina

$$\sigma(A) := \mathbb{C} \setminus \rho(A).$$

Rezolventou operátoru A nazveme $R_\lambda(A) = (A - \lambda I)^{-1}$. Platí, že $\lambda \in \rho(A) \iff (A - \lambda I)^{-1}$ je omezený operátor na celém prostoru. Snadno lze dokázat, že potom A je uzavřený operátor. Tedy pro neuzavřené operátory dostáváme triviálně $\sigma(A) = \mathbb{C}$. Spektrum dále rozdělujeme do tří disjunkt-ních množin. Množina vlastních čísel tvoří bodové spektrum $\sigma_p(A)$. Jestliže pro $\lambda \in \sigma(A)$ platí $\text{Ker}(A - \lambda I) = \{0\}$, pak nutně $\text{Ran}(A - \lambda I) \neq \mathcal{X}$. Pokud $\text{Ran}(A - \lambda I) \neq \mathcal{X}$, ale $\overline{\text{Ran}(A - \lambda I)} = \mathcal{X}$, pak λ leží ve spojitém spektru $\sigma_c(A)$. Zbývající λ , pro která ani $\overline{\text{Ran}(A - \lambda I)} = \mathcal{X}$, patří do reziduálního spektra $\sigma_r(A)$. Platí tvrzení, že pokud existuje posloupnost $\{x_n\}_{n=1}^\infty \subset D(A)$, taková, že $\|x_n\| = 1$ a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|Ax_n - \lambda x_n\| = 0,$$

pak λ leží ve spektru operátoru A .

Definici reziduálního spektra můžeme přepsat

$$\sigma_r(A) = \{\lambda \notin \sigma_p(A) : \overline{\text{Ran}(A - \lambda I)} \neq \mathcal{X}\}.$$

Pro Hilbertův prostor platí

$$\left(\overline{\text{Ran}(A - \lambda I)}\right)^\perp = (\text{Ran}(A - \lambda I))^\perp = \text{Ker}(A^* - \bar{\lambda}I).$$

Z toho plyne

$$\forall \lambda \in \mathbb{C}, \lambda \in \sigma(A) \iff \bar{\lambda} \in \sigma(A^*).$$

Pro jednotlivé podmnožiny spektra platí následující vztahy

$$\begin{aligned}\lambda \in \sigma_p(A) &\implies \bar{\lambda} \in \sigma_p(A^*) \cup \sigma_r(A^*), \\ \lambda \in \sigma_r(A) &\implies \bar{\lambda} \in \sigma_p(A^*), \\ \lambda \in \sigma_c(A) &\iff \bar{\lambda} \in \sigma_c(A^*).\end{aligned}$$

Speciálně pak můžeme psát

$$\sigma_r(A) = \{\lambda \notin \sigma_p(A) : \bar{\lambda} \in \sigma_p(A^*)\}. \quad (4.2)$$

První a druhou implikaci dokážeme následovně. Nechť $\lambda \in \sigma_p(A)$ a ϕ je vlastní vektor A pro vlastní hodnotu λ . Pak $\forall \psi \in D(A^*)$, $((A^* - \bar{\lambda}I)\psi, \phi) = (\psi, (A - \lambda I)\phi) = 0$. Z toho plyne $(\text{Ran}(A^* - \bar{\lambda}I))^\perp \neq \{0\}$, a tedy $\bar{\lambda} \notin \sigma_c(A^*)$. Nechť $\lambda \in \sigma_r(A)$, pak $\text{Ker}(A - \lambda I) = \text{Ran}(A^* - \bar{\lambda}I) \neq \{0\}$. Ostatní vztahy plynou z předchozích tvrzení.

Pro normální operátor A platí, že $\lambda \in \rho(A)$, právě když existuje $c(\lambda) > 0$ takové, že pro všechna $\psi \in D(A)$

$$\|(A - \lambda I)\psi\| \geq c(\lambda)\|\psi\|.$$

Jako důsledek dostáváme, že $\lambda \in \sigma(A)$, pokud existuje posloupnost $\{\psi_n\}_{n=1}^\infty \subset D(A)$, taková, že $\|\psi_n\| = 1$ a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|A\psi_n - \lambda\psi_n\| = 0.$$

To dokonce platí pro každý uzavřený operátor. Pro samosdružený operátor A pak platí $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$, protože

$$\|(A - \lambda I)\psi\| \geq |\Im \lambda| \|\psi\|$$

a navíc (obecně pro uzavřený normální operátor) $\sigma_r(A) = \emptyset$, jelikož ze vztahu (4.1) plyne

$$\lambda \in \sigma_p(A) \iff \bar{\lambda} \in \sigma_p(A^*).$$

Dodejme, že bodové a spojitě spektrum symetrického operátoru je reálné. Pro bodové spektrum je toto tvrzení triviální, a jelikož platí pro každé λ s nenulovou imaginární částí, že je $\text{Ran}(A - \lambda I)$ uzavřený, dostáváme i reálné spojitě spektrum.

Pokud by byl uzavřený operátor B podobný operátoru A , tedy existoval by omezený injektivní operátor U , jehož inverze má stejné vlastnosti, že

$$A = UBU^{-1},$$

pak operátor A je také uzavřený a jejich spektra jsou stejná. Dokonce to platí i pro jednotlivé podmnožiny. Jelikož jsou operátory U, U^{-1} omezené, jsou bijekcemi a z podobnosti pro $\lambda \in \mathbb{C}$ platí

$$D(A - \lambda I) = U D(B - \lambda I), \quad \text{Ran}(A - \lambda I) = U \text{Ran}(B - \lambda I), \quad \text{Ker}(A - \lambda I) = U \text{Ker}(B - \lambda I).$$

Uzavřenost operátoru A lze získat pro $\lambda = 0$.

Spektrum lze rozdělit ještě jiným způsobem. Množinu, která obsahuje všechna $\lambda \in \mathbb{C}$, pro která existuje posloupnost $\{\psi_n\}_{n=1}^\infty \subset D(A)$, ze které nelze vybrat konvergentní podposloupnost a přitom $(A - \lambda I)\psi_n \rightarrow 0$, nazveme esenciálním spektrem $\sigma_{\text{ess}}(A)$. Lze ukázat, že $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$,

právě když je hromadný bod spektra nebo vlastní hodnota nekonečné násobnosti. Množinu $\sigma_d(A) := \sigma(A) \setminus \sigma_{\text{ess}}(A)$ nazveme diskretním spektrem. Diskretní spektrum obsahuje pouze izolované vlastní hodnoty s konečnou násobností. Jestliže $\sigma_{\text{ess}}(A) = \emptyset$, pak říkáme, že operátor A má čistě diskretní spektrum. Platí, že operátory mají čistě diskretní spektrum, právě když mají kompaktní rezolventu. Nespecifikujeme zde, pro které $\lambda \in \rho(A)$ je rezolventa kompaktní operátor. Lze totiž snadno dokázat, že pokud je kompaktní pro nějaké $\lambda_0 \in \rho(A)$, pak je kompaktní pro všechna $\lambda \in \rho(A)$.

Spektrální teorém

Dále už budeme vždy uvažovat hustě definované operátory a separabilní Hilbertův prostor. Máme tvrzení, že Hilbertův prostor je separabilní, právě když v něm existuje nejvýše spočetná ortonormální báze. Nejdůležitější nástroj spektrální teorie je spektrální teorém. My se zde omezíme pouze pro operátory s kompaktní rezolventou. Platí, že vnoření definičního oboru takových operátorů do Hilbertova prostoru je kompaktní. Díky spektrálnímu teorému můžeme operátor jednoznačně rozepsat pomocí jeho spektra a vlastních vektorů.

Věta 4.1.1. *Nechť A je samosdružený operátor a $\sigma_{\text{ess}}(A) = \emptyset$. Potom vlastní vektory operátoru A tvoří ortonormální bázi.*

Důsledkem pak za stejných předpokladů platí

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \psi_n(\psi_n, \cdot) = s - \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^m \lambda_n \psi_n(\psi_n, \cdot),$$

kde $\{\lambda_n\}_{n=1}^{\infty}$ jsou vlastní čísla operátoru A a $\{\psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ jsou k nim příslušné vlastní vektory. Pokud totiž vlastní vektory tvoří ortonormální bázi, pak

$$\forall \psi \in \mathcal{H}, \quad \psi = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(\psi_n, \psi) = s - \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^m \psi_n(\psi_n, \psi).$$

Pro všechna $\psi, \phi \in D(A)$ tedy platí

$$(\phi, A\psi) = (A\phi, \psi) = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(A\phi, \sum_{n=1}^m \psi_n(\psi_n, \psi) \right) = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(\phi, \sum_{n=1}^m \lambda_n \psi_n(\psi_n, \psi) \right).$$

Jelikož je operátor A hustě definovaný, platí rovnost pro všechna $\phi \in \mathcal{H}$.

Také lze nalézt velice užitečný vztah pro určování vlastních čísel, zejména pomocí numerických výpočtů.

Věta 4.1.2. *Nechť A je samosdružený operátor, jehož spektrum je omezená ze zdola a je čistě diskretní. Dále spektrum seřadíme do neklesající posloupnosti $\{\lambda_n : \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots\}_{n=1}^{\infty}$, kde se každé vlastní číslo opakuje podle jeho násobnosti. Potom pro všechna $n \in \mathbb{N}$ platí*

$$\lambda_n = \inf_{\mathcal{L}_n \subset D(A)} \sup_{0 \neq \psi \in \mathcal{L}_n} \frac{(\psi, A\psi)}{\|\psi\|^2},$$

kde $\dim \mathcal{L}_n = n$.

Jako důsledek z toho plyne

$$\inf \sigma(A) = \lambda_1 = \inf_{0 \neq \psi \in D(A)} \frac{(\psi, A\psi)}{\|\psi\|^2}. \quad (4.3)$$

Toto dokonce platí i pro případ, pokud je esenciální spektrum neprázdné.

Relativní omezenost

V jistých případech se vyskytují součty dvou operátorů. Chtěli bychom zajistit, že pokud přičítáme k jinému operátoru malou poruchu, tak nám nezmění vlastnosti původního operátoru. Nechť A a B jsou operátory na prostoru \mathcal{H} s definičními obory $D(A) \subset D(B) \subset \mathcal{H}$. Řekneme, že operátor B je relativně omezený vůči A (nebo A -omezený), pokud pro nějaké nezáporné konstanty a, b platí

$$\|B\psi\| \leq a\|\psi\| + b\|A\psi\|, \quad \psi \in D(A).$$

Infimum z množiny konstant b , pro které platí nerovnost, nazveme A -mezí operátoru B . Pak můžeme formulovat následující větu.

Věta 4.1.3. *Nechť jsou A a B operátory na prostoru \mathcal{H} a B je A -omezený s A -mezí menší než jedna. Potom existuje uzávěr operátoru $A + B$, právě když existuje uzávěr operátoru A . Také platí, že uzávěry operátorů A a $A + B$ mají stejný definiční obor. Speciálně $A + B$ je uzavřený právě tehdy, když A je uzavřený.*

Podobná věta (Kato–Rellich) platí i pro stabilitu samosdruženosti a vůči symetrickým poruchám.

Věta 4.1.4. *Nechť A je samosdružený operátor. Pokud je B symetrický a A -omezený s A -mezí menší než jedna, pak $A + B$ je také samosdružený. Speciálně $A + B$ je samosdružený, pokud je B omezený a symetrický s $D(B) \supset D(A)$.*

Někdy je pro nás výhodnější pracovat s kvadráty norem. Samotná nerovnost pro nezáporná α, β

$$\|B\psi\|^2 \leq \alpha^2\|\psi\|^2 + \beta^2\|A\psi\|^2$$

nám zaručuje, že je operátor B A -omezený, jelikož pro $\alpha = a$, $\beta = b$

$$a^2\|\psi\|^2 + b^2\|A\psi\|^2 \leq (a\|\psi\| + b\|A\psi\|)^2.$$

Taktéž lze ukázat, že infimum množiny všech možných β je A -mezí.

Odmocnina operátoru

Nejen pro naše účely by bylo dobré umět dokázat, jestli pro operátor A existuje nějaký operátor B , který by splňoval

$$B^2 = A.$$

Existence takového operátoru není pro každý operátor zaručena, ten musí splňovat jisté předpoklady. Přírozenou podmínkou je, aby byl operátor A samosdružený a pozitivní, tedy $\forall \psi \in D(A)$, $(\psi, A\psi) \geq 0$. Pak existuje právě jeden samosdružený pozitivní operátor B splňující

$B^2 = A$. Takový operátor B nazveme odmocninou operátoru A a značíme \sqrt{A} nebo $A^{\frac{1}{2}}$. Existence odmocniny lze ale ukázat i pro další třídy operátorů. Množinu

$$\Theta(A) := \{(\psi, A\psi) : \psi \in D(A), \|\psi\| = 1\}$$

nazveme číselný obor operátoru A a

$$S_{\gamma, \vartheta} := \{\lambda \in \mathbb{C} : |\arg(\lambda - \gamma)| \leq \vartheta\}$$

sektorem, kde $\gamma \in \mathbb{R}$ je vrchol a $0 \leq \vartheta \leq \pi/2$ je poloviční úhel celého sektoru. Operátory pak můžeme rozlišovat podle toho, pro která γ, ϑ platí

$$\Theta(A) \subset S_{\gamma, \vartheta}. \quad (4.4)$$

Operátor A nazveme

sektoriální,	pokud platí (4.4) pro	$\gamma \in \mathbb{R}$	a	$0 \leq \vartheta < \pi/2$,
akretivní,	pokud platí (4.4) pro	$\gamma = 0$	a	$0 \leq \vartheta \leq \pi/2$,
kvazi-akretivní,	pokud platí (4.4) pro	$\gamma \in \mathbb{R}$	a	$0 \leq \vartheta \leq \pi/2$.

Poznamenejme, že operátor může patřit do více skupin najednou. Dále operátor A nazveme m -sektoriální, pokud je sektoriální a platí

$$\rho(A) \cap (\mathbb{C} \setminus \overline{S_{\gamma, \vartheta}}) \neq \emptyset.$$

Obdobně definujeme (kvazi-)m-akretivní operátor. Všimněme si, že operátor A je kvazi-akretivní, pokud je pro nějakou γ operátor $A + \gamma I$ akretivní, a m -sektoriální, pokud je sektoriální a kvazi- m -akretivní. Operátor (kvazi-)m-akretivní, resp. m -sektoriální je maximální (kvazi-)akretivní, resp. sektoriální ve smyslu rozšíření. Z toho plyne, že samosdružený, pozitivní operátor je m -akretivní. Platí, že operátor A je m -akretivní, právě když jsou splněny podmínky

$$\begin{aligned} \{\lambda \in \mathbb{C} : \Re \lambda < 0\} &\subset \rho(A), \\ \forall \lambda \in \mathbb{C}, \Re \lambda < 0, \quad \|(A - \lambda I)^{-1}\| &\leq \frac{1}{|\Re \lambda|}. \end{aligned}$$

K existenci a vlastnostem odmocniny operátoru nám vše podstatné říká následující věta.

Věta 4.1.5. *Nechť A je m -akretivní. Potom existuje právě jeden m -akretivní operátor $A^{\frac{1}{2}}$ splňující $(A^{\frac{1}{2}})^2 = A$. Dále platí, že $A^{\frac{1}{2}}$ je m -sektoriální s $\vartheta \leq \pi/4$, a pokud je A navíc samosdružený a pozitivní, pak $A^{\frac{1}{2}}$ je také samosdružený a pozitivní.*

Další užitečné tvrzení je, že pokud je operátor A m -akretivní, pak má kompaktní rezolventu, právě když $A^{\frac{1}{2}}$ má kompaktní rezolventu.

Sobolevovy prostory

V kvantové mechanice se často používá jako Hilbertův prostor Lebesgueův prostor kvadraticky integrovatelných funkcí L^2 . Neomezené operátory ovšem nemůžou být z jistých důvodů

dodefinované standardně na celém prostoru \mathcal{H} . Přírozené množiny pro definiční obor diferenciálních operátorů jsou tzv. Sobolevovy prostory. Nechť $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ je otevřená neprázdná množina. Zavádíme multiindex $\alpha := (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}_0^n$, který je uspořádanou n -ticí nezáporných čísel, a označíme $|\alpha| = \sum_{j=1}^n \alpha_j$. Dále

$$D^\alpha = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}.$$

Poté Sobolevovy prostory jsou definovány pro $k \in \mathbb{N}$ a $p \in [1, \infty]$ jako

$$W^{k,p}(\Omega) := \{\psi : \Omega \rightarrow \mathbb{C}; \psi, D^\alpha \psi \in L^p(\Omega); |\alpha| \leq k\},$$

kde derivace $D^\alpha \psi$ je brána jako slabá, respektive temperovaná distribuce. Na těchto prostorech zavádíme normu

$$\|\psi\|_{k,p} := \begin{cases} \left(\sum_{0 \leq |\alpha| \leq k} \|D^\alpha \psi\|_p^p \right)^{\frac{1}{p}}, & \text{pro } 1 \leq p < \infty, \\ \sum_{0 \leq |\alpha| \leq k} \|D^\alpha \psi\|_\infty, & \text{pro } p = \infty, \end{cases}$$

kde $\|\cdot\|_p$ značí standardní normu na L^p prostorech. Platí $\overline{W^{k,p}(\Omega)} = L^p(\Omega)$. Definujme vektorové prostory $H^{k,p}(\Omega)$ jako zúplnění množin $\{\psi \in C^k(\Omega) : \|\psi\|_{k,p} < \infty\}$ vzhledem k normě $\|\cdot\|_{k,p}$. Meyer a Serrin dokázali, že $H^{k,p}(\Omega) = W^{k,p}(\Omega)$. Pro nás budou důležité prostory $W^{k,2}(\Omega) \subset L^2(\Omega)$. Dále budeme používat značení $H^k(\Omega) \equiv H^{k,2}(\Omega) = W^{k,2}(\Omega)$ a $\|\cdot\|_{H^k} \equiv \|\cdot\|_{k,2}$.

Okrajové podmínky

U vlastnostech operátoru hrají důležitou roli okrajové podmínky. Okrajové podmínky na hranici $\partial\Omega$ zapisujeme pomocí vztahu

$$\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} + \alpha \psi = 0,$$

kde \mathbf{n} je jednotkový vektor vnější normály hranice a $\alpha : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{C}$ je funkcí. Takto obecně zapsanou podmínku nazýváme Robinovou okrajovou podmínkou. Speciálně podmínku $\psi = 0$ (pro $\alpha = \infty$) na $\partial\Omega$ nazýváme Dirichletovou a $\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0$ (pro $\alpha = 0$) Neumannovou. Například pro strunu si můžeme Dirichletovu podmínku představit jako její pevný konec a Neumannovu jako volný.

4.2 Báze a kvazi-hermitovské operátory

Posloupnost vektorů $\{x_j\}_{j=1}^\infty \subset \mathcal{X}$ v komplexním Banachově prostoru \mathcal{X} nazveme bází, pokud $\forall x \in \mathcal{X}, \exists_1 \{c_j\}_{j=1}^\infty \subset \mathbb{C}, x = \sum_{j=1}^\infty c_j x_j$. Pro Hilbertův prostor \mathcal{H} a ortonormální bázi $\{\phi_j\}_{j=1}^\infty \subset \mathcal{H}$ platí $\forall \psi \in \mathcal{H}, \psi = \sum_{j=1}^\infty (\phi_j, \psi) \phi_j$. Posloupnosti $\{\phi_j\}_{j=1}^\infty, \{\psi_k\}_{k=1}^\infty \subset \mathcal{H}$ nazveme biortonormální, když splňují $(\phi_j, \psi_k) = \delta_{jk}$. Jestliže jsou obě posloupnosti bázemi, pak řekneme, že jsou biortonormální báze. Pro biortonormální báze $\{\phi_j\}_{j=1}^\infty, \{\psi_k\}_{k=1}^\infty \subset \mathcal{H}$ platí

$$\psi = \sum_{j=1}^\infty (\phi_j, \psi) \psi_j = \sum_{j=1}^\infty (\psi_j, \psi) \phi_j, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}.$$

Lze dokázat, že pokud jsou posloupnost $\{\phi_j\}_{j=1}^\infty$ a báze $\{\psi_j\}_{j=1}^\infty$ biortonormální, pak je $\{\phi_j\}_{j=1}^\infty$ také bází.

Nechť je $\{\phi_j\}_{j=1}^{\infty}$ ortonormální báze Hilbertova prostoru \mathcal{H} a A je omezený operátor s omezenou inverzí. Pro každý vektor $\psi \in \mathcal{H}$ pak můžeme psát

$$A^{-1}\psi = \sum_{j=1}^{\infty} (\phi_j, A^{-1}\psi) \phi_j = \sum_{j=1}^{\infty} (A^{*-1}\phi_j, \psi) \phi_j.$$

Dále dostáváme

$$\psi = \sum_{j=1}^{\infty} (\chi_j, \psi) \psi_j,$$

kde

$$\chi_j = A^{*-1}\phi_j, \quad \psi_j = A\phi_j, \quad \text{pro } j = 1, 2, \dots$$

Jelikož $(\chi_j, \psi_k) = \delta_{jk}$ a $c_j = (\chi_j, \psi)$, platí, že je rozklad vektoru ψ jednoznačný, tedy každý omezený invertovatelný operátor převádí ortonormální bázi na jinou bázi. Báze $\{\psi_j\}_{j=1}^{\infty}$ získaná vztahem $\psi_j = A\phi_j$ ($j = 1, 2, \dots$) se nazývá Rieszova báze. Vidíme, že pomocí biortonormálních Rieszových bází lze rozepsat každé $\psi \in \mathcal{H}$. Snadno také nahlédneme, že báze, která je biortonormální s nějakou Rieszovou bází, je sama Rieszovou bází. Dále pro Rieszovu bázi $\{\psi_j\}_{j=1}^{\infty}$ a libovolné $\psi \in \mathcal{H}$ platí

$$\sum_{j=1}^{\infty} |(\psi_j, \psi)|^2 < \infty.$$

Řekneme, že posloupnosti $\{\psi_j\}_{j=1}^{\infty}$, $\{\phi_j\}_{j=1}^{\infty}$ jsou kvadraticky blízké, pokud

$$\sum_{j=1}^{\infty} \|\phi_j - \psi_j\|^2 < \infty.$$

Věta 4.2.1. *Pokud je báze $\{\psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ kvadraticky blízká nějaké ortonormální bázi $\{\phi_n\}_{n=1}^{\infty}$, pak báze $\{\chi_n\}_{n=1}^{\infty}$, která je biortonormální s bází $\{\psi_n\}_{n=1}^{\infty}$, je také kvadraticky blízká ortonormální bázi $\{\phi_n\}_{n=1}^{\infty}$. A tedy i báze $\{\psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ a $\{\chi_n\}_{n=1}^{\infty}$ jsou kvadraticky blízké.*

Posloupnost $\{\phi_j\}_{j=1}^{\infty}$ nazveme ω -lineárně nezávislou, jestliže rovnost

$$\sum_{j=1}^{\infty} c_j \phi_j = 0$$

pro libovolnou posloupnost $\{c_j\}_{j=1}^{\infty} \subset \mathbb{C}$ vylučuje výrok

$$0 < \sum_{j=1}^{\infty} |c_j|^2 \|\phi_j\|^2 < \infty.$$

Pro ω -lineárně nezávislou posloupnost, která je kvadraticky blízko Rieszovy báze, platí, že je také Rieszova báze. Pokud je ω -lineárně nezávislá posloupnost kvadraticky blízko ortonormální bázi, je také bází a říkáme jí Barina báze. Doplňme, že $\{\psi_j\}_{j=1}^{\infty}$ je úplný systém, pokud platí

$$(\{\psi_j\}_{j=1}^{\infty})^{\perp} = \{\mathbf{0}\}.$$

Z daných vlastností dostáváme následující inkluze

$$\text{ortonormální báze} \subset \text{Bariny báze} \subset \text{Rieszovy báze} \subset \text{báze} \subset \text{úplné systémy}.$$

V předchozí kapitole jsme již zmínili některé pojmy z teorie kvazi-hermitovských operátorů. Zopakujme, že pokud platí pro operátor A

$$A^* = \Theta A \Theta^{-1},$$

kde Θ je pozitivní omezený invertovatelný operátor, jehož inverze je také omezená, pak operátor A nazveme kvazi-hermitovský a Θ metrikou operátoru A . Také jsme zmínili, že výraz $(\cdot, \Theta \cdot)$ je opět skalárním součinem. Z toho plyne, že je operátor A samosdružený v topologicky ekvivalentním Hilbertově prostoru $\mathcal{H}_\Theta = (\mathcal{H}, (\cdot, \Theta \cdot))$. Operátor A je ovšem podobný samosdruženému operátoru již v původním Hilbertově prostoru. Pro omezený pozitivní operátor Θ platí, že existuje právě jeden omezený pozitivní operátor Ω , který splňuje $\Omega^2 = \Theta$. Takový operátor má opět omezenou inverzi. Jelikož je samosdružený, splňuje také $\Omega^* \Omega = \Theta$. Definujme $\tilde{A} := \Omega A \Omega^{-1}$. Potom

$$\tilde{A} = \Omega A \Omega^{-1} = \Omega \Theta^{-1} A^* \Theta \Omega^{-1} = (\Omega^{-1})^* A^* \Omega^* = (\Omega A \Omega^{-1})^* = \tilde{A}^*.$$

Kvazi-hermitovský operátor A je tedy podobný k samosdruženému operátoru \tilde{A} .

Nechť A je kvazi-hermitovský operátor a $\sigma_{\text{ess}}(A) = \emptyset$. Potom vlastní vektory $\{\psi_j\}_{j=1}^\infty$ operátoru A a $\{\phi_j\}_{j=1}^\infty$ operátoru A^* tvoří biortonormální Rieszovy báze a platí

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \psi_n(\phi_n, \cdot), \quad A^* = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \phi_n(\psi_n, \cdot).$$

Jelikož je operátor A kvazi-hermitovský, vezměme si danou metriku $\Theta = \Omega^* \Omega$ a definujme $e_n := \Omega \psi_n$. Kvůli podobnosti operátorů A a \tilde{A} jsou jejich spektra stejná, a tedy $\{e_n\}_{n=1}^\infty$ jsou vlastní vektory \tilde{A} . Podle 4.1.1 tvoří ortonormální bázi, z čehož plyne, že $\{\psi_n\}_{n=1}^\infty$ je Rieszova báze. To samé platí pro sdružený operátor A^* , protože je také kvazi-hermitovský. Jelikož $e_n = \Omega \psi_n = (\Omega^{-1})^* \phi_n$, což lze například ukázat ze vztahu $A^* = \Omega^* \tilde{A} (\Omega^{-1})^*$, jsou báze biortonormální. Nakonec $\forall \psi, \phi \in \text{D}(A)$ platí

$$(\phi, A\psi) = (A^*\phi, \psi) = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(A^*\phi, \sum_{n=1}^m \psi_n(\phi_n, \psi) \right) = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(\phi, \sum_{n=1}^m \lambda_n \psi_n(\phi_n, \psi) \right).$$

Operátor A i A^* je hustě definovaný, a proto platí rovnost pro všechna $\phi \in \mathcal{H}$. Obdobně se ukáže druhá rovnost, jelikož je A^* také kvazi-hermitovský.

Kapitola 5

Spektrální analýza

V předchozích kapitolách jsme se seznámili se základy kvantové mechaniky a matematickou teorií, na které je vybudována. Se všemi těmito znalostmi vyšetříme následující model. Necht' máme částici na kružnici s magnetickým polem, jejíž energie je popsána Hamiltonovou funkcí

$$H_a = c\sqrt{(p - qA)^2 + m^2c^2}.$$

Pro přehlednější zápis položíme $c = \hbar = q = 1$. Tímto se nám nijak nezmění charakter výsledků. Po umocnění a použití principu korespondence dostaneme operátor

$$H_a^2 = (P - A)^2 + m^2I.$$

Budeme chtít najít operátor H_a jako odmocninu $(P - A)^2 + m^2I$ a vyšetřit jeho vlastnosti, přičemž vezmeme v úvahu komplexní magnetické pole.

5.1 Operátor hybnosti

Začneme s vyšetřením operátoru

$$P := -i\frac{d}{dx}$$

na různých definičních oborech. Snadno lze ukázat, že je neomezený. Nejdříve vezměme Hilbertův prostor $\mathcal{H} := L^2((0, L))$. Chtěli bychom na něm najít takové definiční obory, pro které by byl operátor P uzavřený a symetrický, nejlépe samosdružený, a určit jeho spektrum. Je přirozené k jejich hledání využít metodu per partes. Aby měl výraz

$$(\phi, -i\psi') = -i[\overline{\phi\psi}]_0^L + (-i\phi', \psi) \tag{5.1}$$

smysl, musí $\psi, \phi \in H^1((0, L)) \subset \mathcal{H}$. Pro symetrický operátor chceme $[\overline{\phi\psi}]_0^L = 0$. S tímto definičním oborem nám ale tento člen obecně nevymizí. Vezměme tedy definiční obor s Dirichletovou okrajovou podmínkou

$$D(P) := H_0^1((0, L)) = \{\psi \in H^1((0, L)) : \psi(0) = \psi(L) = 0\}.$$

Pak

$$\forall \psi, \phi \in D(P), (\phi, P\psi) = (P\phi, \psi)$$

a P je symetrický. Hraniční podmínky jsou dobře definované, jelikož jsou funkce $\psi \in H^1((0, L))$ spojité. Spojitost $\psi \in H^1((0, L))$ nám plyne z následující nerovnosti

$$|\psi(x) - \psi(y)| = \left| \int_y^x \psi' \cdot 1 \right| \leq \|\psi'\|_2 |x - y|^{\frac{1}{2}}, \quad \forall x, y \in (0, L),$$

kde jsme využili Cauchy–Schwarzovu nerovnost. Dále najdeme jeho sdružený operátor. Chceme

$$\mathbf{D}(P^*) := \{\phi \in \mathcal{H} : \exists \eta \in \mathcal{H}, \forall \psi \in \mathbf{D}(P), (\phi, P\psi) = (\eta, \psi)\}$$

s tím, že $\eta = P^*\phi$. Když budeme brát $\psi \in C_0^\infty(0, L) \subset H_0^1((0, L))$, výraz $(\phi, -i\psi') = (\eta, \psi)$, který upravíme na $-(\phi, \psi') = (i\eta, \psi)$, pak můžeme chápat jako derivaci v zobecněném smyslu a píšeme $i\eta = \phi'$. Sdružený operátor působící takto

$$P^*\phi = -i\phi'$$

má tedy stejný tvar jako P . Souhrnně dostáváme, že operátory P a P^* působí jako slabé, resp. distributivní derivace. Distributivní derivace existuje pro každou funkci z \mathcal{H} , ale my musíme brát takové, aby $\eta \in \mathcal{H}$, tedy $\phi \in H^1((0, L))$. Z toho plyne $\mathbf{D}(P^*) \subset H^1((0, L))$. Obrácenou implikaci dostaneme z následujícího vztahu. $\forall \psi \in H_0^1(0, L), \forall \phi \in H^1(0, L)$ platí

$$(\phi, -i\psi') = (-i\phi', \psi) - i[\overline{\phi\psi}]_0^L = (-i\phi', \psi).$$

Dostáváme tedy $H^1(0, L) = \mathbf{D}(P^*)$. Z toho plyne, že operátor P není samosdružený, jelikož $\mathbf{D}(P) \neq \mathbf{D}(P^*)$. Uzavřenost dokážeme tím, že ukážeme $\mathbf{D}(P^{**}) \subset \mathbf{D}(P)$. Z předchozí kapitoly víme, že obrácená inkluze platí z definice. Hledáme tedy takové $\phi \in \mathcal{H}$, aby $(\phi, P^*\psi) = (P^{**}\phi, \psi), \forall \psi \in \mathbf{D}(P^*)$. Víme, že operátor P je symetrický a operátor P^* uzavřený. Tedy $P^{**} \subset P^*$. Lze tedy psát, že hledáme takové $\phi \in \mathcal{H}$, aby $(\phi, P^*\psi) = (P^*\phi, \psi)$. Z rovnosti (5.1) plyne, že $\phi \in H_0^1((0, L)) = \mathbf{D}(P)$.

Zkusme najít symetrické rozšíření, které samosdružené bude. Ze vztahu

$$(\phi, P\psi) = (P^*\phi, \psi) - i(\overline{\phi(L)}\psi(L) - \overline{\phi(0)}\psi(0))$$

vidíme, že pro splnění podmínky $(\phi, P\psi) = (P^*\phi, \psi)$ chceme ψ, ϕ z takové množiny, aby

$$\overline{\phi(L)}\psi(L) = \overline{\phi(0)}\psi(0).$$

Hledanou množinou je

$$\mathbf{D}(P_\alpha) = \{\psi \in H^1((0, L)) : \psi(L) = \alpha\psi(0), |\alpha| = 1\}.$$

Operátor P_α na prostoru $\mathcal{H} = L^2((0, L))$ s takto definovaným definičním operátorem je samosdružený a můžeme ho považovat za pozorovatelnou - hybnost.

Vyšetřme spektrum těchto operátorů. Vezměme si nejdřív operátor P s $\mathbf{D}(P) = H_0^1((0, L))$. Pro vlastní čísla z bodového spektra řešíme diferenciální rovnici

$$-i\psi' = \lambda\psi. \tag{5.2}$$

Její obecné řešení má tvar

$$\psi(x) = ce^{i\lambda x}, \quad c \in \mathbb{C}.$$

Vidíme, že pro žádné λ nemůžeme splnit okrajové podmínky $\psi(0) = \psi(L) = 0$, aby ψ byl nenulový vlastní stav. Dostáváme $\sigma_p(P) = \emptyset$. K nalezení ostatních vlastních čísel nám pomůže k němu sdružený operátor. Pro P^* s $D(P^*) = H^1((0, L))$ máme stejnou diferenciální rovnici, ale snadno vidíme, že řešení $\psi(x) = Ae^{i\lambda x} \in H^1((0, L))$ pro všechna λ , a tedy $\sigma_p(P^*) = \mathbb{C}$. Z toho vidíme, že $\sigma_c(P^*) = \sigma_r(P^*) = \emptyset$. Z předchozí kapitoly víme, že

$$\sigma_r(P) = \{\lambda \notin \sigma_p(P) : \bar{\lambda} \in \sigma_p(P^*)\}. \quad (5.3)$$

Dostáváme tedy $\sigma_r(P) = \mathbb{C}$ a $\sigma_c(P) = \emptyset$.

Operátor P_α s $D(P_\alpha) = \{\psi \in H^1((0, L)) : \psi(L) = \alpha\psi(0), |\alpha| = 1\}$ je samosdružený, tedy $\sigma(P_\alpha) \subset \mathbb{R}$ a $\sigma_r(P_\alpha) = \emptyset$. Pro splnění okrajových podmínek řešíme

$$\begin{aligned} \psi(L) &= \alpha\psi(0), \\ ce^{i\lambda L} &= \alpha c, \end{aligned} \quad (5.4)$$

pro $\lambda \in \mathbb{R}$. Jelikož $|\alpha| = 1$, existuje $\varphi \in [0, 2\pi)$ takové, že $\alpha = e^{i\varphi}$. Dosazením do rovnice (5.4) dostáváme

$$\lambda_n = \frac{\varphi + 2\pi n}{L}, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Ukažme, že je spojité spektrum prázdné. Chceme, aby pro všechna $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \sigma_p(P_\alpha)$ a $\phi \in \mathcal{H}$ existovalo $\psi \in D(P_\alpha)$, pro které platí

$$-i\psi' - \lambda\psi = \phi.$$

Z rovnice dostáváme obecné řešení

$$\psi(x) = ce^{i\lambda x} + e^{i\lambda x} \int_0^x e^{-i\lambda\xi} \phi(\xi) d\xi,$$

kde $c \in \mathbb{C}$. Jelikož je $\phi \in L^2((0, L))$, integrál je konečný a funkce je dobře definovaná. Dále pro všechna $x \in (0, L)$

$$|\psi(x)| \leq |c| + \left| \int_0^x e^{-i\lambda\xi} \phi(\xi) d\xi \right| \leq |c| + \sqrt{\int_0^x 1 d\xi} \sqrt{\int_0^x |\phi(\xi)|^2 d\xi} \leq |c| + \sqrt{L} \|\phi\|_2.$$

Funkce ψ je tedy kvadraticky integrabilní. Pro její derivaci dostáváme, že je také kvadraticky integrabilní, jelikož platí

$$\|\psi'\|_2 = \|\lambda\psi + \phi\|_2 \leq |\lambda| \|\psi\|_2 + \|\phi\|_2.$$

Nakonec splníme podmínku $\psi(L) = \alpha\psi(0)$. Chceme

$$ce^{i\lambda L} + e^{i\lambda L} \int_0^L e^{-i\lambda\xi} \phi(\xi) d\xi = \alpha c = ce^{i\varphi}.$$

Podmínku splníme při volbě konstanty

$$c = \frac{e^{i\lambda L} \int_0^L e^{-i\lambda\xi} \phi(\xi) d\xi}{e^{i\varphi} - e^{i\lambda L}}.$$

Celkem dostáváme, že pro všechna $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \sigma_p(P_\alpha)$ a $\phi \in \mathcal{H}$ existuje $\psi \in D(P_\alpha)$, pro které platí $-i\psi' - \lambda\psi = \phi$, a tedy $\text{Ran}(P_\alpha - \lambda I) = \mathcal{H}$. Jelikož je spektrum diskrétní, vlastní vektory

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\lambda_n x}$$

tvorí podle věty 4.1.1 ortonormální bázi prostoru $L^2((0, L))$.

Pro náš případ částice na kružnici, který chceme vyšetřit, ztotožníme kružnici s konečným intervalem, u kterého spojíme krajní body. To znamená, že pro operátor P_α položíme $\alpha = 1$. Máme tedy operátor P_1 s definičním oborem $D(P_1) = \{\psi \in H^1((0, L)) : \psi(L) = \psi(0)\}$. Operátor je samosdružený a jeho spektrum tvoří vlastní čísla

$$\lambda_n = \frac{2\pi n}{L}, \quad n \in \mathbb{Z}$$

s vlastními vektory

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\lambda_n x}.$$

Za další vezměme interval $(0, \infty)$. V tomto případě definujme operátor P s

$$D(P) := H_0^1((0, \infty)) = \{\psi \in H^1((0, \infty)) : \psi(0) = 0\}$$

na $\mathcal{H} := L^2((0, \infty))$, který splní rovnost (5.1) a je tím pádem symetrický. Stejným postupem jako u konečného intervalu, zjistíme, že $D(P^*) = H^1((0, \infty))$, a tedy $P \neq P^*$. Opět tedy není takto definovaný operátor samosdružený. Taktéž uzavřenost bychom získali postupem jako pro konečný interval. V tomto případě ovšem nedokážeme najít žádné symetrické rozšíření, které by splňovalo podmínku $\overline{\phi(0)}\psi(0) = 0$. Operátor P s $D(P) := H_0^1((0, \infty))$ je tedy příklad maximálního uzavřeného symetrického operátoru, který není samosdružený.

Dále najděme jejich spektra. Pro vlastní čísla dostáváme stejnou rovnici (5.2). Pro žádné $\lambda \in \mathbb{C}$ nelze splnit podmínku $\psi(0) = 0$, aby byl vlastní vektor nenulový. Opět je tedy $\sigma_p = \emptyset$ a pro další části nám pomůže sdružený operátor. K nalezení $\lambda \in \sigma_p(P^*)$ už nemusíme splnit okrajovou podmínku, nicméně stále chceme, aby vlastní vektor $\psi \in H^1((0, \infty))$. Jelikož

$$\psi(x) = ce^{i\lambda x} \quad \text{a} \quad \overline{\psi(x)} = \bar{c}e^{-i\bar{\lambda}x},$$

ze vztahu

$$|\psi(x)|^2 = |c|^2 e^{i(\lambda - \bar{\lambda})x} = |c|^2 e^{-2\Im\lambda x}$$

lze snadno ukázat, že $\psi \in H^1((0, \infty))$, pokud $\Im\lambda > 0$. Dostáváme tedy $\sigma_p(P^*) = \mathbb{C}^+ = \{\lambda \in \mathbb{C} : \Im\lambda > 0\}$ a díky (5.3) $\sigma_r(P) = \mathbb{C}^-$. Jelikož je operátor P uzavřený, víme, že $P^{**} = P$, a proto $\sigma_r(P^*) = \emptyset$. Pro vyřešení spojitého spektra využijeme posloupnosti. Z předchozí kapitoly víme, že symetrický operátor má spojitě spektrum reálné. Pro libovolné $\lambda \in \mathbb{R}$ si vezměme posloupnost

$$\psi_n(x) = e^{i\lambda x} \varphi_n(x), \quad \text{kde} \quad \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} \varphi\left(\frac{x}{n}\right), \quad \varphi \in C_0^\infty((0, \infty)).$$

Norma

$$\|\varphi_n\|_2^2 = \frac{1}{n} \int_0^\infty \left| \varphi\left(\frac{x}{n}\right) \right|^2 dx = 1$$

při využití substituce $y = \frac{x}{n}$, tedy $\|\psi_n\|_2 = 1$. Vypočtěme ještě

$$\|\varphi'_n\|_2^2 = \frac{1}{n} \int_0^\infty \left| \frac{1}{n} \varphi' \left(\frac{x}{n} \right) \right|^2 dx = \frac{1}{n^2} \|\varphi'\|_2^2.$$

Pak snadno vidíme, že $\forall n \in \mathbb{N}$, $\psi_n \in \mathcal{D}(P)$. Dále

$$(P - \lambda I)\psi_n = -ie^{i\lambda x} \varphi'_n,$$

a pro normu máme

$$\|(P - \lambda I)\psi_n\|_2 = \|\varphi'_n\|_2,$$

tedy

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(P - \lambda I)\psi_n\|_2 = 0.$$

To platí pro všechna $\lambda \in \mathbb{R}$, a proto dostáváme $\sigma_c(P) = \mathbb{R}$. Opět z tvrzení, které jsme vyřkli v minulé kapitole, plyne $\sigma_c(P^*) = \mathbb{R}$.

Nakonec vyšetřeme operátor P s $\mathcal{D}(P) := H^1(\mathbb{R})$ na $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R})$. Přes rovnost (5.1) dostaneme sdružený operátor P^* s $\mathcal{D}(P^*) = H^1(\mathbb{R})$. V tomto případě je tedy operátor P samosdružený. Z poznámek v úvodu víme, že $\sigma(P) \subset \mathbb{R}$ a $\sigma_r(P) = \emptyset$. Opět pro funkci $\psi = ce^{i\lambda x}$ s $\lambda \in \mathbb{R}$ nelze najít takové c aby $\psi \in H^1(\mathbb{R})$, tedy $\sigma_p(P) = \emptyset$. Při použití posloupností stejného typu jako v předchozím příkladu dostáváme $\sigma_c(P) = \mathbb{R}$.

Jelikož je operátor P samosdružený, reprezentuje nám pozorovatelnou - hybnost částice na reálné přímce. Když jsme vyšetřovali hybnost P_1 na konečném intervalu, dostali jsme pouze bodové spektrum. V praxi to znamená, že u částice popsanou stavem $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\lambda_n x}$ (vlastním vektorem) naměříme hodnotu $\lambda_n = \frac{2\pi n}{L}$ (vlastní číslo). V případě hybnosti na reálné přímce je bodové spektrum prázdné. Hodnoty, které lze měřit, nám ale určuje spektrum jako celek, tedy v tomto případě prvky ze spojitého spektra $\sigma_c(P) = \mathbb{R}$. Těmto hodnotám bychom také rádi přiřadili stavy. Opět k tomu využijeme funkci

$$\psi(x) = ce^{i\lambda x}, \quad c \in \mathbb{C}$$

z rovnice pro vlastní čísla, ale v jiném smyslu. Již víme, že taková to funkce $\psi \notin H^1(\mathbb{R})$ ani $\psi \notin L^2(\mathbb{R}, dx)$. Nicméně pro jistá ϕ má výraz (ψ, ϕ) smysl. $\psi \in L^1_{loc}$ a lze ji přiřadit temperovanou distribuci z prostoru $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$. Ta působí na funkce ze Schwartzova prostoru $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ a z jejich vlastností plyne, že $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \subset H^1(\mathbb{R})$. Pak $\forall \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ platí

$$(\psi, P\phi) = \int_{\mathbb{R}} \bar{\psi}(-i\phi') = -i [\bar{\psi}\phi]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{\mathbb{R}} -i\bar{\psi}'\phi = \int_{\mathbb{R}} \lambda \bar{\psi}\phi = \lambda(\psi, \phi),$$

jelikož $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \bar{\psi}\phi = 0$. Funkce ψ nazýváme zobecněnými vlastními vektory a existují pro všechna $\lambda \in \sigma_c(P)$. Kvůli Fourierově transformaci volíme $c = 1/\sqrt{2\pi}$, přičemž píšeme $p \equiv \lambda$.

5.2 Magnetický potenciál

Od této chvíle se už zaměříme na kružnici ztotožněnou s otevřeným intervalem $(0, L)$, u kterého spojíme krajní body. Máme tedy Hilbertův prostor $\mathcal{H} = L^2(0, L)$ a z předchozí části použijeme operátor hybnosti P_1 s $\mathcal{D}(P_1) = \{\psi \in H^1((0, L)) : \psi(L) = \psi(0)\}$, dále ho budeme

značit $P \equiv P_1$. K tomuto operátoru přidáme operátor magnetického vektorového potenciálu A . Budeme uvažovat takový, který se nemění v čase. Operátor A definujeme jako operátor násobení

$$(A\psi)(x) := a(x)\psi(x),$$

kde $a(x) \in L^2((0, L))$ je klasický vektorový potenciál. Jelikož chceme vyšetřit operátor $P_a \equiv P - A$, definujme definiční obor $D(A) := D(P) = \{\psi \in H^1((0, L)) : \psi(L) = \psi(0)\}$. Ukažme, že pak platí

$$a(x)\psi(x) \in L^2((0, L)).$$

Chceme

$$\int_0^L |a(x)\psi(x)|^2 dx < \infty.$$

K tomu nám pomůže nerovnost

$$\|\psi\|_\infty^2 \leq C\|\psi\|_{H^1}^2, \quad C > 0, \quad \forall \psi \in D(P).$$

Důkaz nejprve uděláme pro $\psi \in H_0^1((0, L))$. $\forall x \in [0, L]$ platí

$$\begin{aligned} |\psi(x)|^2 &= \int_0^x (|\psi|^2)' = \int_0^x (\bar{\psi}'\psi + \psi'\bar{\psi}) = 2\Re \int_0^x \bar{\psi}\psi' \\ &\leq 2 \left| \int_0^x \bar{\psi}\psi' \right| \leq 2 \int_0^x |\psi||\psi'| \leq \int_0^x (|\psi|^2 + |\psi'|^2) \\ &\leq \int_0^L (|\psi|^2 + |\psi'|^2) = \|\psi\|_{H^1}^2. \end{aligned}$$

Ve druhém řádku jsme použili Youngovu nerovnost. Dostáváme tedy, že

$$\|\psi\|_\infty^2 = \operatorname{ess\,sup}_{x \in [0, L]} |\psi(x)|^2 \leq \|\psi\|_{H^1}^2 < \infty.$$

To samé ukážeme pro $\psi \in H^1((0, L))$. Definujme funkci

$$\eta(x) = \begin{cases} \frac{2}{L}x, & \text{pro } 0 \leq x \leq \frac{L}{2}, \\ 1, & \text{pro } \frac{L}{2} < x \leq L. \end{cases}$$

Pak $\forall x \in [\frac{L}{2}, L]$ platí

$$\begin{aligned} |\psi(x)|^2 &= |\eta(x)\psi(x)|^2 = \int_0^x (|\eta\psi|^2)' = 2 \int_0^x \eta \eta' |\psi|^2 + \int_0^x \eta^2 (\bar{\psi}'\psi + \psi'\bar{\psi}) \\ &\leq 2 \int_0^{\frac{L}{2}} 1 \cdot \frac{2}{L} \cdot |\psi|^2 + \int_0^x \eta^2 \cdot 2|\psi'| |\psi| \leq \frac{4}{L} \|\psi\|_2^2 + \int_0^x 2|\psi'| |\psi| \\ &\leq \left(\frac{4}{L} + 1 \right) \|\psi\|_{H^1}^2. \end{aligned}$$

Mimo jiné jsme zde využili fakt $0 \leq \eta(x) \leq 1$, $\forall x \in [0, L]$ a $\|\psi\|_2^2 \leq \|\psi\|_{H^1}^2$. Podobně definujme

$$\eta(x) = \begin{cases} 1, & \text{pro } 0 \leq x \leq \frac{L}{2}, \\ -\frac{2}{L}x + 2, & \text{pro } \frac{L}{2} < x \leq L. \end{cases}$$

Potom $\forall x \in [0, \frac{L}{2}]$ platí

$$\begin{aligned}
|\psi(x)|^2 &= |\eta(x)\psi(x)|^2 = \int_L^x (|\eta\psi|^2)' = \left| \int_x^L (|\eta\psi|^2)' \right| \\
&= \left| 2 \int_x^L \eta \eta' |\psi|^2 + \int_x^L \eta^2 (\bar{\psi}'\psi + \psi'\bar{\psi}) \right| \\
&\leq \left| 2 \int_{\frac{L}{2}}^L \eta \cdot \left(-\frac{2}{L}\right) |\psi|^2 \right| + \left| \int_x^L \eta^2 (\bar{\psi}'\psi + \psi'\bar{\psi}) \right| \\
&\leq \frac{4}{L} \int_{\frac{L}{2}}^L |\psi|^2 + \|\psi\|_{H^1}^2 \leq \left(\frac{4}{L} + 1\right) \|\psi\|_{H^1}^2.
\end{aligned}$$

Celkově máme $\|\psi\|_\infty^2 < \infty$, $\forall \psi \in \mathbf{D}(P) \subset H^1((0, L))$. Poté můžeme udělat odhad

$$\|A\psi\|_2^2 = \int_0^L |a(x)\psi(x)|^2 dx \leq \int_0^L \|\psi\|_\infty^2 |a(x)|^2 dx = \|\psi\|_\infty^2 \|a(x)\|_2^2 < \infty,$$

tedy $a(x)\psi(x) \in L^2((0, L))$.

Pro reálný potenciál $a : (0, L) \rightarrow \mathbb{R}$ je operátor A symetrický. Platí totiž, že $\forall \psi, \phi \in \mathbf{D}(P)$

$$(\phi, A\psi) = \int_0^L \overline{\phi(x)} a(x)\psi(x) dx = \int_0^L \overline{a(x)\phi(x)}\psi(x) dx = (A\phi, \psi). \quad (5.5)$$

Operátor A není obecně omezený. Nicméně dokážeme, že je P -omezený s P -mezi menší než jedna, a budeme tedy i tak moci použít větu 4.1.4. Opět to nejdříve ukážeme pro $\psi \in H_0^1((0, L))$. $\forall x \in [0, L]$ platí

$$\begin{aligned}
|\psi(x)|^2 &= \int_0^x (|\psi|^2)' dx = 2\Re \int_0^x \bar{\psi}\psi' \leq 2 \left| \int_0^x \bar{\psi}\psi' \right| \\
&\leq 2\sqrt{\int_0^x |\psi|^2} \sqrt{\int_0^x |\psi'|^2} \leq 2\sqrt{\int_0^L |\psi|^2} \sqrt{\int_0^L |\psi'|^2} \\
&= 2\|\psi\|_2 \|\psi'\|_2 \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\varepsilon}} \leq \varepsilon \|\psi'\|_2^2 + \frac{1}{\varepsilon} \|\psi\|_2^2,
\end{aligned}$$

kde $\varepsilon > 0$. V postupu jsme použili Cauchy–Schwarzovu a Youngovu nerovnost. Dostáváme tedy, že

$$\|A\psi\|_2^2 \leq \|a(x)\|_2^2 \|\psi\|_\infty^2 \leq \varepsilon \|a(x)\|_2^2 \|\psi'\|_2^2 + \frac{1}{\varepsilon} \|a(x)\|_2^2 \|\psi\|_2^2. \quad (5.6)$$

Z toho plyne, že operátor A je na množině $H_0^1((0, L))$ P -omezený. Jelikož můžeme vzít ε libovolně malé, je P -mez nula, což je menší než jedna.

Pro $\psi \in H^1((0, L))$ vezměme

$$\eta(x) = \begin{cases} \frac{2}{L}x, & \text{pro } 0 \leq x \leq \frac{L}{2}, \\ 1, & \text{pro } \frac{L}{2} < x \leq L. \end{cases}$$

Pak $\forall x \in [\frac{L}{2}, L]$ platí

$$\begin{aligned} |\psi(x)|^2 &= |\eta(x)\psi(x)|^2 = \int_0^x (|\eta\psi|^2)' = 2 \int_0^x \eta \eta' |\psi|^2 + \int_0^x \eta^2 (\bar{\psi}'\psi + \psi'\bar{\psi}) \\ &\leq \frac{4}{L} \int_0^{\frac{L}{2}} |\psi|^2 + 2\Re \int_0^x \eta^2 \bar{\psi}'\psi \leq \frac{4}{L} \|\psi\|_2^2 + 2 \left| \int_0^x \eta^2 \bar{\psi}'\psi \right| \\ &\leq \frac{4}{L} \|\psi\|_2^2 + 2\sqrt{\int_0^x |\psi|^2} \sqrt{\int_0^x |\psi'|^2} \leq \varepsilon \|\psi'\|_2^2 + \left(\frac{1}{\varepsilon} + \frac{4}{L}\right) \|\psi\|_2^2. \end{aligned}$$

Pro důkaz v druhé části intervalu vezměme opět

$$\eta(x) = \begin{cases} 1, & \text{pro } 0 \leq x \leq \frac{L}{2}, \\ -\frac{2}{L}x + 2, & \text{pro } \frac{L}{2} < x \leq L. \end{cases}$$

Potom $\forall x \in [0, \frac{L}{2}]$ platí

$$\begin{aligned} |\psi(x)|^2 &= |\eta(x)\psi(x)|^2 = \left| \int_x^L (|\eta\psi|^2)' \right| \leq \frac{4}{L} \int_{\frac{L}{2}}^L |\psi|^2 + \left| \int_x^L \eta^2 (\bar{\psi}'\psi + \psi'\bar{\psi}) \right| \\ &\leq \frac{4}{L} \|\psi\|_2^2 + \left| 2\Re \int_x^L \eta^2 \bar{\psi}'\psi \right| \leq \frac{4}{L} \|\psi\|_2^2 + 2 \left| \int_x^L \bar{\psi}'\psi \right| \\ &\leq \frac{4}{L} \|\psi\|_2^2 + 2\sqrt{\int_x^L |\psi|^2} \sqrt{\int_x^L |\psi'|^2} \leq \varepsilon \|\psi'\|_2^2 + \left(\frac{1}{\varepsilon} + \frac{4}{L}\right) \|\psi\|_2^2. \end{aligned}$$

Celkově dostáváme, že je operátor A P -omezený pro všechna $\psi \in \mathbf{D}(P)$ a P -mez je menší než jedna. Můžeme tedy aplikovat větu 4.1.4 a víme, že i operátor P_a s $\mathbf{D}(P)$ je samosdružený.

Vyšetřeme jeho spektrum. Víme, že je reálné, a pro vlastní čísla máme rovnici

$$-i\psi'(x) - a(x)\psi(x) = \lambda\psi(x), \quad \psi \in \mathbf{D}(P). \quad (5.7)$$

Po separaci proměnných a zintegrování dostáváme obecné řešení

$$\psi(x) = c \exp\left(i\lambda x + i \int_0^x a(\xi) d\xi\right), \quad c \in \mathbb{C}.$$

Z podmínky $\psi(0) = \psi(L)$ vyplývá

$$\sigma_p(P_a) = \left\{ \frac{2\pi n}{L} - \langle a \rangle \right\}_{n \in \mathbb{Z}}, \quad \text{kde } \langle a \rangle \equiv \frac{1}{L} \int_0^L a(x) dx.$$

V následujících odstavcích dokážeme, že spojitě i reziduální spektrum je prázdné, a proto jeho vlastní vektory

$$e_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(i \left(\frac{2\pi n}{L} - \langle a \rangle\right) x + i \int_0^x a(\xi) d\xi\right), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (5.8)$$

tvoří ortonormální bázi.

Přejdeme ke komplexnímu potenciálu $a : (0, L) \rightarrow \mathbb{C}$, [17]. Je zřejmé, že nesplňuje rovnost (5.5). Operátor A tedy není symetrický. Přesto platí, že je relativně omezený, protože jsme nikde v postupu pro důkaz (5.6) nepoužili předpoklad, že je potenciál reálný. Podle věty 4.1.3, pak můžeme alespoň říct, že je operátor P_a pro komplexní magnetický potenciál uzavřený. Pro sdružený operátor P_a^* platí $D(P_a^*) = D(P)$ a má tvar

$$P_a^* \psi = P_{\bar{a}} \psi = -i\psi'(x) - \overline{a(x)}\psi(x), \quad \psi \in D(P).$$

Pokud definujeme

$$(\Omega_a \psi)(x) := \exp\left(i\langle a \rangle x - i \int_0^x a(\xi) d\xi\right) \psi(x), \quad (5.9)$$

pak máme podobnostní transformaci

$$\Omega_a P_a \Omega_a^{-1} = P_{\langle a \rangle}. \quad (5.10)$$

Zkontrolujme, že nám operátor Ω_a zachová definiční obor $D(P)$. Z definice operátoru Ω_a vidíme, že je generovaný nenulovou omezenou diferencovatelnou funkcí. S pomocí vztahu (5.6) lze snadno ukázat, že pokud $\psi \in H^1$, pak i $\Omega_a \psi \in H^1$. Dále

$$(\Omega_a \psi)(0) = \psi(0) \quad \text{a} \quad (\Omega_a \psi)(L) = \psi(L).$$

Dostáváme tedy

$$\psi \in D(P) \quad \implies \quad \Omega_a \psi \in D(P).$$

Obdobně to platí pro Ω_a^{-1} .

K vyšetření vlastních čísel operátoru P_a dostáváme stejnou rovnici (5.7) jako pro reálný případ. Máme tedy

$$\sigma_p(P_a) = \left\{ \frac{2\pi n}{L} - \langle a \rangle \right\}_{n \in \mathbb{Z}}.$$

K získání vlastních čísel jsme také mohli využít podobnostní vztah (5.10), jelikož z předchozí části víme, že operátor $P_{\langle a \rangle}$ má tím pádem stejné spektrum. Ten ovšem použijeme k ukázání $\text{Ran}(P_a - \lambda I) = \mathcal{H}$ pro všechna $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \sigma_p(P_a)$. Budeme postupovat stejně jako v případě hybnosti na konečném intervalu. Z rovnice

$$-i\psi' - (\langle a \rangle + \lambda)\psi = \phi \in \mathcal{H}$$

dostáváme obecné řešení

$$\psi(x) = c e^{i(\langle a \rangle + \lambda)x} + e^{i(\langle a \rangle + \lambda)x} \int_0^x e^{-i(\langle a \rangle + \lambda)\xi} \phi(\xi) d\xi,$$

kde $c \in \mathbb{C}$. Pro všechna $x \in (0, L)$

$$|\psi(x)| \leq |c| e^{i(\langle a \rangle + \lambda)x} + |e^{i(\langle a \rangle + \lambda)x}| \|e^{-i(\langle a \rangle + \lambda)\xi}\|_2 \|\phi\|_2.$$

Z této nerovnosti lze snadno dokázat, že je funkce ψ kvadraticky integrabilní. Pro její derivaci dostáváme, že je také kvadraticky integrabilní, jelikož platí

$$\|\psi'\|_2 = \|(\langle a \rangle + \lambda)\psi + \phi\|_2 \leq |\langle a \rangle + \lambda| \|\psi\|_2 + \|\phi\|_2.$$

Nakonec podmínku $\psi(L) = \psi(0)$ splníme při volbě konstanty

$$c = \frac{e^{i(\langle a \rangle + \lambda)L} \int_0^L e^{-i(\langle a \rangle + \lambda)\xi} \phi(\xi) d\xi}{1 - e^{i(\langle a \rangle + \lambda)L}}.$$

Celkem dostáváme $\text{Ran}(P_{\langle a \rangle} - \lambda I) = \mathcal{H} = \text{Ran}(P_a - \lambda I)$ a operátor P_a má tedy prázdné spojité i reziduální spektrum.

Dále vyslovme tvrzení, že operátor P_a je kvazi-hermitovský, právě když

$$\langle \Im a \rangle = 0. \quad (5.11)$$

V takovém případě splňuje

$$\Theta_a P_a \Theta_a^{-1} = P_a^*, \quad (5.12)$$

kde metriku definujeme jako

$$(\Theta_a \psi)(x) := \exp\left(2 \int_0^x \Im a(\xi) d\xi\right) \psi(x). \quad (5.13)$$

K důkazu využijeme spektrum operátoru P_a . Nechť platí podmínka (5.11). Pak je operátor $P_{\langle a \rangle}$ samosdružený, a tedy P_a je kvazi-hermitovský. Vztah (5.12) splňuje s metrikou $\Theta_a = \Omega_a^* \Omega_a$.

Naopak pokud platí pro nějakou metriku Θ vztah

$$\Theta P_a \Theta^{-1} = P_a^*,$$

pak je P_a podobný k nějakému samosdruženému operátoru

$$\Theta^{\frac{1}{2}} P_a \Theta^{-\frac{1}{2}}.$$

Z toho plyne, že spektrum P_a je reálné a musí platit (5.11). Tím je tvrzení dokázané. Všimněme si, že P_a je samosdružený, právě když je $\Im a = 0$, zatímco podmínka (5.11) může být splněna i v obecnějších případech.

Do konce této části už ovšem nemusíme předpokládat, že je operátor P_a kvazi-hermitovský. Vlastní vektory příslušné k jednotlivým vlastním číslům mají tvar

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(i \left(\frac{2\pi n}{L} - \langle a \rangle\right) x + i \int_0^x a(\xi) d\xi\right).$$

Pro sdružený operátor dostáváme

$$\sigma(P_a^*) = \left\{ \frac{2\pi n}{L} - \langle \bar{a} \rangle \right\}_{n \in \mathbb{Z}}$$

a

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(i \left(\frac{2\pi n}{L} - \langle \bar{a} \rangle\right) x + i \int_0^x \overline{a(\xi)} d\xi\right).$$

Koeficienty jsme zvolili tak, aby byly vektory biortonormální, tedy

$$(\psi_m, \phi_n) = \delta_{mn}, \quad (5.14)$$

pro všechny $m, n \in \mathbb{Z}$. Pokud $\Im a = 0$, přechází tato rovnost na $(\psi_m, \psi_n) = \delta_{mn}$ a funkce jsou shodné s funkcemi z (5.8).

Všimněme si, že vlastní vektory operátorů P_a a P_a^* můžeme přepsat do tvarů

$$\psi_n(x) = \chi(x)e_n(x) \quad \text{a} \quad \phi_n(x) = \chi^{-1}(x)e_n(x), \quad (5.15)$$

kde

$$\chi(x) := \exp \left(\langle \Im a \rangle x - \int_0^x \Im a(\xi) d\xi \right).$$

Dále ukažme, že je $\{\psi_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ Rieszovou bází, ale pro $\Im a \neq 0$ není Barinovou bází. Necht' $(\psi_n, \psi) = 0$ pro všechna $n \in \mathbb{Z}$. Z faktu, že je $\{e_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ ortonormální bází, dostáváme $\chi\psi = 0$, tedy $\psi = 0$, a proto je $\{\psi_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ úplný systém. Ze vztahu (5.14) plyne, že je také nejmenší úplný, protože z něho nelze odebrat žádný prvek. Dále každý vektor $\psi \in L^2((0, L))$ můžeme rozepsat jako

$$\psi = \sum_{n \in \mathbb{Z}} (e_n, \psi) e_n = \sum_{n \in \mathbb{Z}} (\chi^{-1} e_n, \psi) \chi e_n.$$

S přihlédnutím na vztah (5.15) pak můžeme celkově říct, že $\{\psi_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ je Rieszova báze $L^2((0, L))$. Jelikož platí (5.14), je $\{\phi_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ také Rieszova báze. K dokázání tvrzení, že $\{\psi_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ pro $\Im a \neq 0$ není Barinova báze, musíme ukázat, že báze není kvadraticky blízka žádné ortonormální bázi. Z věty 4.2.1 víme, že když je báze $\{\psi_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ kvadraticky blízka ortonormální bázi, pak je také díky vztahu (5.14) kvadraticky blízka bázi $\{\phi_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$. Pokud tedy nejsou kvadraticky blízke, pak nemůže být báze $\{\psi_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ kvadraticky blízka žádné ortonormální bázi. Pro všechna $n \in \mathbb{Z}$

$$|\psi_n - \phi_n| = |\chi - \chi^{-1}| \frac{1}{\sqrt{L}},$$

a proto dostáváme

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} \|\psi_n - \phi_n\|_2^2 = \infty,$$

pokud $\chi \neq \chi^{-1}$, což nastává, právě když $\Im a \neq 0$.

5.3 Kvazi-relativistická částice na kružnici

Pro získání operátoru H_a musíme nejdřív vyšetřit jeho mocninu. Necht' je funkce vektorového potenciálu $a(x) \in D(P)$. Potom mějme operátor $P_a^2 + m^2 I$ s definičním oborem

$$D(P_a^2 + m^2 I) \equiv D(H^2) = \{\psi \in H^2((0, L)) : \psi(0) = \psi(L), \psi'(0) = \psi'(L)\}.$$

Ukažme, že $\sigma_p(P_a)^2 = \sigma_p(P_a^2)$. Pro libovolné $\lambda \in \sigma_p(P_a)$ a jisté ψ máme $P_a \psi = \lambda \psi$. Potom dostáváme

$$P_a^2 \psi = P_a(P_a \psi) = P_a(\lambda \psi) = \lambda^2 \psi.$$

Z toho plyne $\sigma_p(P_a)^2 \subset \sigma_p(P_a^2)$. Naopak, necht' $\mu \in \sigma_p(P_a^2)$. Pro nějaké ϕ máme $P_a^2 \phi = \mu \phi$. Potom

$$(P_a^2 - \mu I)\phi = (P_a - \sqrt{\mu} I)(P_a + \sqrt{\mu} I)\phi = 0.$$

Pokud $(P_a + \sqrt{\mu} I)\phi = 0$, pak $-\sqrt{\mu} \in \sigma_p(P_a)$. Jestliže $\chi \equiv (P_a + \sqrt{\mu} I)\phi \neq 0$, dostáváme $(P_a - \sqrt{\mu} I)\chi = 0$, a tedy $\sqrt{\mu} \in \sigma_p(P_a)$. Celkově máme dokázáno, že

$$\sigma_p(P_a)^2 = \sigma_p(P_a^2). \quad (5.16)$$

K důkazu, že daný operátor nemá spojitě ani reziduální spektrum využijeme podobnostní vztah

$$\Omega_a P_a^2 \Omega_a^{-1} = P_{\langle a \rangle}^2.$$

Snadno bychom opět dokázali, že operátory Ω_a a Ω_a^{-1} nemění definiční obor a pomocí funkce

$$\begin{aligned} \psi(x) &= c e^{(i\langle a \rangle - \sqrt{-\lambda})x} + d e^{(i\langle a \rangle + \sqrt{-\lambda})x} \\ &\quad - e^{(i\langle a \rangle - \sqrt{-\lambda})x} \int_0^x \frac{\sqrt{-\lambda}}{2\lambda} e^{(-i\langle a \rangle + \sqrt{-\lambda})\xi} \phi(\xi) d\xi \\ &\quad + e^{(i\langle a \rangle + \sqrt{-\lambda})x} \int_0^x \frac{\sqrt{-\lambda}}{2\lambda} e^{(-i\langle a \rangle - \sqrt{-\lambda})\xi} \phi(\xi) d\xi, \end{aligned}$$

kde $x \in (0, L)$, $\phi \in \mathcal{H}$, $c, d, \lambda \in \mathbb{C}$ bychom pak ukázali, že $\forall \lambda \in \mathbb{C}$, $\text{Ran}(P_{\langle a \rangle}^2 - \lambda I) = \mathcal{H}$.

Pro operátor $P_a^2 + m^2 I$ s definičním oborem $D(H^2)$ tak dostáváme spektrum triviálně ve tvaru

$$\left\{ \left(\frac{2\pi n}{L} - \langle a \rangle \right)^2 + m^2 \right\}_{n \in \mathbb{Z}} \equiv \{ \lambda_n^2 + m^2 \}_{n \in \mathbb{Z}},$$

s vlastními vektory

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp \left(i \left(\frac{2\pi n}{L} - \langle a \rangle \right) x + i \int_0^x a(\xi) d\xi \right).$$

Vezměme si opět nejdříve reálný potenciál. Snadno lze ukázat, že je operátor $P_a^2 + m^2 I$ samosdružený, a dokonce i pozitivní. Také víme, že vlastní vektory $\{\psi_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ tvoří ortonormální bázi. Abychom získali jeho odmocninu ukažme, že je m -akretivní. K tomu nám stačí ukázat, že

$$\forall \lambda \in \mathbb{C}, \Re \lambda < 0, \quad \|(P_a^2 + m^2 I - \lambda I)^{-1}\| \leq \frac{1}{|\Re \lambda|}.$$

Jelikož jsou taková λ v rezolventní množině, existuje omezený operátor $(P_a^2 + m^2 I - \lambda I)^{-1}$. Potom pro všechna $\phi \in \text{Ran}(P_a^2 + m^2 I - \lambda I)$ existuje $\psi \in D(H^2)$ takové, že $(P_a^2 + m^2 I - \lambda I)\psi = \phi$. Normu tedy můžeme přepsat jako

$$\begin{aligned} \|(P_a^2 + m^2 I - \lambda I)^{-1}\| &= \sup_{0 \neq \phi \in \mathcal{H}} \frac{\|(P_a^2 + m^2 I - \lambda I)^{-1} \phi\|_2}{\|\phi\|_2} \\ &= \sup_{0 \neq \psi \in D(H^2)} \frac{\|\psi\|_2}{\|(P_a^2 + m^2 I - \lambda I)\psi\|_2}, \end{aligned}$$

a stačí nám ukázat, že pro všechna $\psi \in D(H^2)$ platí nerovnost

$$\|(P_a^2 + m^2 I - \lambda I)\psi\|_2 \geq |\Re \lambda| \|\psi\|_2.$$

V tomto případě to platí, protože

$$\begin{aligned} \|(P_a^2 + m^2 I - \lambda I)\psi\|_2^2 &= \|(P_a^2 + m^2 I)\psi\|_2^2 + \|\lambda\psi\|_2^2 - 2\Re((P_a^2 + m^2 I)\psi, \lambda\psi) \\ &\geq |\lambda|^2 \|\psi\|_2^2 - 2(\Re \lambda) (\|P_a \psi\|_2^2 + m^2 \|\psi\|_2^2) \geq |\Re \lambda|^2 \|\psi\|_2^2. \end{aligned}$$

Z věty 4.1.5 pak plyne, že existuje právě jeden m -akretivní operátor H_a , který splňuje $H_a^2 = P_a^2 + m^2 I$, označme ho $\tilde{H}_a \equiv \sqrt{P_a^2 + m^2 I}$. Takový operátor je také samosdružený, pozitivní a má kompaktní rezolventu. Z toho plyne

$$\sigma(H_a) = \left\{ \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \right\}_{n \in \mathbb{Z}}.$$

Definujme operátor

$$\tilde{H}_a := \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \psi_n(\psi_n, \cdot)$$

s definičním oborem

$$D(\tilde{H}_a) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} : \sum_{n \in \mathbb{Z}} |\sqrt{\lambda_n^2 + m^2}|^2 |(\psi_n, \psi)|^2 < \infty \right\},$$

kde $\{\psi_{k_n}\}_{n=1}^\infty$ jsou vlastní vektory operátoru $P_a^2 + m^2 I$ k příslušným vlastním číslům. Chtěli bychom ukázat, že $D(\tilde{H}_a) = D(P)$. Definujme proto ještě operátor

$$\tilde{P}_a := \sum_{n \in \mathbb{Z}} \lambda_n \psi_n(\psi_n, \cdot)$$

s definičním oborem

$$D(\tilde{P}_a) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} : \sum_{n \in \mathbb{Z}} |\lambda_n|^2 |(\psi_n, \psi)|^2 < \infty \right\},$$

Nechť $\varphi \in C_0^\infty$ a $\psi \in D(\tilde{P}_a)$, potom

$$\begin{aligned} (\varphi, i(\tilde{P}_a + A)\psi) &= i \sum_{n \in \mathbb{Z}} ((\varphi, \lambda_n \psi_n)(\psi_n, \psi) + (\varphi, a(x)\psi_n)(\psi_n, \psi)) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} ((\varphi, \psi'_n - i a(x)\psi_n)(\psi_n, \psi) + (\varphi, i a(x)\psi_n)(\psi_n, \psi)) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} (\varphi, \psi'_n)(\psi_n, \psi) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} (-\varphi', \psi_n)(\psi_n, \psi) = (-\varphi', \psi), \end{aligned}$$

kde v posledním řádku jsme využili metodu per partes a u členu $A\psi$ jsme rozepsali ψ pomocí ortonormální báze, přičemž jsme měli na paměti, že $D(A) = \mathcal{H}$ díky podmínce $a(x) \in D(P)$. Operátor $\tilde{P}_a + A$ tedy působí jako slabá derivace, a proto $\psi \in H^1$. Takové funkce jsou spojitě a snadno bychom opět ukázali, že splňují podmínku $\psi(0) = \psi(L)$. Proto platí $D(\tilde{P}_a) = D(P)$. Jelikož také platí

$$|\lambda_n|^2 \leq |\sqrt{\lambda_n^2 + m^2}|^2 \leq |\lambda_n|^2 + m^2$$

a zároveň

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} m^2 |(\psi_n, \psi)|^2 = m^2 \|\psi\|_2^2,$$

dostáváme $D(\tilde{H}_a) = D(\tilde{P}_a) = D(P)$

Dále pro všechna $\lambda \in \mathbb{C}$, $\Re \lambda < 0$ a $\psi \in D(P)$ platí

$$\begin{aligned} \|\tilde{H}_a - \lambda I\psi\|_2 \|\psi\|_2 &\geq |(\psi, (\tilde{H}_a - \lambda I)\psi)| \geq \Re(\psi, (\tilde{H}_a - \lambda I)\psi) \\ &= \Re \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} |(\psi_n, \psi)|^2 - \Re \lambda \|\psi\|_2^2 \\ &\geq |\Re \lambda| \|\psi\|_2^2, \end{aligned}$$

a tedy takový operátor je m-akretivní. Navíc $\forall \psi \in D(H^2)$

$$\begin{aligned}\tilde{H}_a^2 \psi &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \psi_n(\psi_n, \tilde{H}_a \psi) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \sqrt{\lambda_k^2 + m^2} \psi_n(\psi_n, \psi_k) (\psi_k \psi) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} (\lambda_n^2 + m^2) \psi_n(\psi_n, \psi).\end{aligned}$$

Jelikož víme, že podle věty 4.1.1

$$(P_a^2 + m^2 I) \psi = \sum_{n \in \mathbb{Z}} (\lambda_n^2 + m^2) \psi_n(\psi_n, \psi),$$

dostáváme

$$\tilde{H}_a^2 = P_a^2 + m^2 I.$$

Jelikož je takový m-akretivní operátor unikátní, máme celkově

$$H_a = \sqrt{P_a^2 + m^2 I} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \psi_n(\psi_n, \cdot),$$

se spektrem

$$\sigma(H_a) = \left\{ \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \right\}_{n \in \mathbb{Z}} = \left\{ \sqrt{\left(\frac{2\pi n}{L} - \langle a \rangle \right)^2 + m^2} \right\}_{n \in \mathbb{Z}}$$

a s příslušnými vlastními vektory

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp \left(i \lambda_n x + i \int_0^x a(\xi) d\xi \right).$$

Podobný postup bychom chtěli aplikovat pro komplexní potenciál. Abychom mohli použít větu 4.1.5, musí být operátor $P_a^2 + m^2 I$ m-akretivní. Nejdříve ukažme, kdy je tento operátor akretivní, tedy

$$\Re(\psi, (P_a^2 + m^2) \psi) = \Re(\psi, P_a^2 \psi) + m^2 \|\psi\|_2^2 \geq 0, \quad \forall \psi \in D(H^2)$$

Pro první člen dostáváme

$$\begin{aligned}\Re(\psi, P_a^2 \psi) &= \Re(P_a^* \psi, P_a \psi) \\ &= \int_0^L | -i \psi' |^2 + \int_0^L (\Re a^2) |\psi|^2 + \Re(i \bar{a} \psi, \psi') - i(\psi', a \psi) \\ &= \int_0^L | -i \psi' |^2 + \int_0^L (\Re a^2) |\psi|^2 + \Re i \int_0^L a(\bar{\psi} \psi' - \psi \bar{\psi}') \\ &= \int_0^L | -i \psi' |^2 + \int_0^L [(\Re a)^2 - (\Im a)^2] |\psi|^2 - 2 \int_0^L (\Re a) \Im(\bar{\psi} \psi') \\ &= (\psi, P_{\Re a}^2 \psi) - \int_0^L (\Im a)^2 |\psi|^2.\end{aligned}$$

Jelikož je $\Re a$ reálná funkce, snadno vidíme, že operátor $P_{\Re a}$ je samosdružený. Dostáváme tak nerovnost

$$\|P_{\Re a}\psi\|_2^2 + m^2\|\psi\|_2^2 - \|(\Im a)\psi\|_2^2 \geq 0, \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(H^2),$$

kterou musíme splnit, aby byl operátor $P_a^2 + m^2I$ akretivní. Pokud bychom využili spojitost vektorového potenciálu a vztahu (4.3), můžeme napsat podmínku, za které je operátor akretivní, jako

$$\min_{n \in \mathbb{Z}} \left[\left(\frac{2\pi n}{L} - \langle \Re a \rangle \right)^2 \right] + m^2 - \max_{x \in [0, L]} |\Im a(x)|^2 \geq 0, \quad (5.17)$$

kde lze přepsat

$$\min_{n \in \mathbb{Z}} \left[\left(\frac{2\pi n}{L} - \langle \Re a \rangle \right)^2 \right] = \left(\frac{2\pi}{L} \operatorname{dist} \left(\frac{L \langle \Re a \rangle}{2\pi}, \mathbb{Z} \right) \right)^2.$$

Pokud je splněna podmínka (5.17), pak je operátor akretivní.

Dále díky podmínce (5.17) platí $\forall \lambda \in \mathbb{C}, \Re \lambda < 0$

$$\begin{aligned} \|(P_a^2 + m^2I - \lambda I)\psi\|_2 \|\psi\|_2 &\geq |(\psi, (P_a^2 + m^2I - \lambda I)\psi)| \geq \Re(\psi, (P_a^2 + m^2I - \lambda I)\psi) \\ &= \Re(\psi, (P_a^2 + m^2I)\psi) - \Re \lambda \|\psi\|_2^2 \geq |\Re \lambda| \|\psi\|_2^2. \end{aligned}$$

Operátor $P_a^2 + m^2I$ je tedy m-akretivní. Z věty 4.1.5 víme, že existuje právě jeden m-akretivní operátor H_a , který splňuje $H_a^2 = P_a^2 + m^2I$, označme ho $H_a \equiv \sqrt{P_a^2 + m^2I}$. Operátor H_a je m-sektoriální s $\vartheta \leq \pi/4$. Jelikož má také kompaktní rezolventu, dostáváme

$$\sigma(H_a) = \left\{ \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \right\}_{n \in \mathbb{Z}}.$$

Definujme operátor

$$\tilde{H}_a := \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \psi_n(\phi_n, \cdot),$$

s definičním oborem

$$\mathcal{D}(\tilde{H}_a) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} : \sum_{n \in \mathbb{Z}} |\sqrt{\lambda_n^2 + m^2}|^2 |(\phi_n, \psi)|^2 < \infty \right\},$$

kde $\{\phi_n\}_{n=1}^\infty$ je Rieszova báze biortonormální k vlastním vektorům operátoru $P_a^2 + m^2I$. Opět pomocí operátoru

$$\tilde{P}_a := \sum_{n \in \mathbb{Z}} \lambda_n \psi_n(\phi_n, \cdot)$$

a vlastnosti Rieszovy báze

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} |(\phi_n, \psi)|^2 < \infty$$

bychom ukázali, že $\mathcal{D}(\tilde{H}_a) = \mathcal{D}(P)$ jako v případě pro reálný potenciál.

Z předchozí kapitoly víme, že operátor lze rozepsat pomocí vlastních čísel a biortonormálních Rieszových bází, z nichž jednu tvoří vlastní vektory. Z toho plyne

$$P_a^2 + m^2I = \sum_{n \in \mathbb{Z}} (\lambda_n^2 + m^2) \psi_n(\phi_n, \cdot).$$

Našli jsme tedy operátor, pro který platí $\tilde{H}_a^2 = P_a^2 + m^2 I$. Pokud bychom chtěli získat daný operátor odmocniny v duchu samosdruženého pozitivního operátoru jako pro reálný potenciál, museli bychom ukázat, že jsou operátory $P_a^2 + m^2 I$ a \tilde{H}_a m-akretivní. Pro operátor $P_a^2 + m^2 I$ jsme již podmínku, za které je m-akretivní, našli. Ovšem podmínku, za které je operátor \tilde{H}_a akretivní, tedy

$$\Re(\psi, \tilde{H}_a \psi) = \Re \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} (\psi, \psi_n) (\phi_n, \psi) \geq 0, \quad \forall \psi \in D(P),$$

a ve které nevystupují funkce ψ , jsme bohužel nalézt nedokázali.

Sdružený operátor k operátoru $P_a^2 + m^2 I$ je

$$(P_a^*)^2 + m^2 I = P_a^2 + m^2 I,$$

s definičním oborem $D(H^2)$. Takový operátor je také m-akretivní, pokud je splněna podmínka (5.17), protože

$$\Re(\psi, (P_a^*)^2 \psi) = \Re(P_a^2 \psi, \psi) = \Re(\psi, P_a^2 \psi).$$

Z věty 4.1.5 opět dostáváme m-akretivní sektoriální operátor $H_a^* \equiv \sqrt{(P_a^*)^2 + m^2 I}$ se spektrem

$$\sigma(H_a^*) = \left\{ \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \right\}_{n \in \mathbb{Z}} = \left\{ \sqrt{\left(\frac{2\pi n}{L} - \langle \bar{a} \rangle \right)^2 + m^2} \right\}_{n \in \mathbb{Z}}.$$

Definujme operátor

$$\tilde{H}_a^* := \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \phi_n(\psi_n, \cdot)$$

s definičním operátorem

$$D(\tilde{H}_a^*) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} : \sum_{n \in \mathbb{Z}} |\sqrt{\lambda_n^2 + m^2}|^2 |(\psi_n, \psi)|^2 < \infty \right\},$$

kde $\{\psi_n\}_{n=1}^\infty$ je Rieszova báze biortonormální k vlastním vektorům operátoru $(P_a^*)^2 + m^2 I$. Stejně jako v předchozím případě bychom dokázali $D(\tilde{H}_a^*) = D(P)$. Takový operátor je sdružený k \tilde{H}_a , jelikož $\forall \psi, \phi \in D(P)$

$$\begin{aligned} (\phi, \tilde{H}_a \psi) &= \left(\phi, \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \psi_n(\phi_n, \psi) \right) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} (\phi, \psi_n) (\phi_n, \psi) \\ &= \left(\sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \phi_n(\psi_n, \phi), \psi \right) \\ &= (\tilde{H}_a^* \phi, \psi). \end{aligned}$$

Podmínka, za které by byl operátor \tilde{H}_a^* m-akretivní, je tedy stejná jako pro operátor \tilde{H}_a .

Abychom mohli takovými operátory reprezentovat fyzikální pozorovatelné, musí být jejich spektrum reálné. To nastává, pokud platí $\langle \Im a \rangle = 0$. Vyslovme tvrzení, že operátor \tilde{H}_a je kvazi-hermitovský, právě když $\langle \Im a \rangle = 0$. Vezměme si operátor $P_{\langle a \rangle}^2 + m^2$ s definičním oborem $D(H^2)$ ze začátku této části. Takový operátor je akretivní, pokud splňuje pro všechna $\psi \in D(H^2)$

$$\|P_{\langle \Re a \rangle} \psi\|^2 - \langle \Im a \rangle^2 \|\psi\|^2 + m^2 \|\psi\|^2 \geq 0.$$

Jelikož platí $|\langle \Im a \rangle| \leq \max_{x \in [0, L]} |\Im a(x)|$, můžeme nerovnost také splnit podmínkou (5.17). Pokud je operátor $P_{\langle a \rangle}^2 + m^2$ akretivní, snadno bychom ukázali jako v předešlých případech, že je i m-akretivní. Definujme operátor

$$\tilde{H}_{\langle a \rangle} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \tilde{e}_n(\tilde{e}_n, \cdot),$$

kde

$$\tilde{e}_n = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(\lambda_n + \langle a \rangle)x}, \quad \forall n \in \mathbb{Z}$$

jsou vlastní vektory $P_{\langle a \rangle}$ a tvoří ortonormální bázi. Po minulých zkušenostech už můžeme rovnou vidět $D(\tilde{H}_{\langle a \rangle}) = D(P)$. Pokud platí podmínka (5.17), je akretivní i $\tilde{H}_{\langle a \rangle}$, protože $\forall \psi \in D(P)$

$$\Re(\psi, \tilde{H}_{\langle a \rangle} \psi) = \Re \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} |(\tilde{e}_n, \psi)|^2 = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \Re \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} |(\tilde{e}_n, \psi)|^2 \geq 0.$$

Dále pro všechna $\lambda \in \mathbb{C}$, $\Re \lambda < 0$ a $\psi \in D(P)$ platí

$$\|\tilde{H}_{\langle a \rangle} - \lambda I\|_2 \|\psi\|_2 = \Re(\psi, \tilde{H}_{\langle a \rangle} \psi) - \Re \lambda \|\psi\|_2^2 \geq |\Re \lambda| \|\psi\|_2^2,$$

a operátor $\tilde{H}_{\langle a \rangle}$ je tedy i m-akretivní. Jelikož

$$\tilde{H}_{\langle a \rangle}^2 = \sum_{n \in \mathbb{Z}} (\lambda_n^2 + m^2) \tilde{e}_n(\tilde{e}_n, \cdot) = P_{\langle a \rangle}^2 + m^2$$

včetně definičních oborů, dostáváme

$$\tilde{H}_{\langle a \rangle} = H_{\langle a \rangle} \equiv \sqrt{P_{\langle a \rangle}^2 + m^2}.$$

Vzhledem k tomu, že jsme nenašli podmínku, za které je operátor \tilde{H}_a akretivní, nebo neukázali, že stačí (5.17), vycházíme v následujících vztazích jenom z definic daných operátorů. Platí, že operátor \tilde{H}_a je podobný operátoru $\tilde{H}_{\langle a \rangle}$. S využitím Ω_a z (5.9) a vztahů

$$\Omega_a \psi_n = \tilde{e}_n = (\Omega_a^{-1})^* \phi_n, \quad \forall n \in \mathbb{Z},$$

dostáváme pro všechna $\psi \in D(P)$

$$\begin{aligned} \Omega_a \tilde{H}_a \Omega_a^{-1} \psi &= \Omega_a \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \psi_n(\phi_n, \Omega_a^{-1} \psi) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \Omega_a \psi_n((\Omega_a^{-1})^* \phi_n, \psi) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \tilde{e}_n(\tilde{e}_n, \psi) \\ &= \tilde{H}_{\langle a \rangle} \psi. \end{aligned}$$

Nechť platí podmínka $\langle \Im a \rangle = 0$. Pak je operátor $\tilde{H}_{\langle a \rangle}$ samosdružený, a tedy \tilde{H}_a je kvazihermitovský. Podobnostní vztah se sdruženým operátorem \tilde{H}_a^* splňuje s metrikou $\Theta_a = \Omega_a^* \Omega_a$. $\forall \psi \in D(P)$ platí

$$\begin{aligned} \Theta_a \tilde{H}_a \Theta_a^{-1} \psi &= \Theta_a \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \psi_n(\phi_n, \Theta_a^{-1} \psi) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \Theta_a \psi_n(\Theta_a^{-1} \phi_n, \psi) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sqrt{\lambda_n^2 + m^2} \phi_n(\psi_n, \psi) \\ &= \tilde{H}_a^* \psi, \end{aligned}$$

kde jsme využili vztah $\Theta_a \psi_n = \phi_n$. Naopak pokud pro nějakou metrikou Θ platí vztah

$$\Theta \tilde{H}_a \Theta^{-1} = \tilde{H}_a^*,$$

pak je \tilde{H}_a podobný k nějakému samosdruženému operátoru

$$\Theta^{\frac{1}{2}} \tilde{H}_a \Theta^{-\frac{1}{2}}.$$

Z toho plyne, že spektrum \tilde{H}_a je reálné a musí platit $\langle \Im a \rangle = 0$.

Závěr

V této práci jsme uvedli zákony elektrodynamiky v klasické fyzice a ve speciálním případě přenesení popisu elektromagnetického pole do kvantové mechaniky. Dále jsme představili základy relativistické kvantové mechaniky a nestandardní teorie kvazi-hermitovských operátorů. Seznámili jsme se také s motivacemi pro komplexní magnetické pole. V hlavní části práce jsme uvedli důležité pojmy a poznatky z matematické teorie operátorů, které jsme následně využili ve spektrální analýze.

Nejprve jsme vyšetřili operátor hybnosti na různých definičních oborech. Zjistili jsme, jak se pro různé definiční obory mění vlastnosti operátoru, obzvláště jeho spektrum. Dále jsme se omezili na konečný interval s periodickými hraničními podmínkami. Definovali jsme operátor magnetického potenciálu a ukázali, že je P -omezený s P -mezí menší než jedna. Odtud jsme přešli k operátoru P_a , u kterého jsme nejdříve vyšetřili vlastnosti s reálným potenciálem a následně připomněli výsledky z [17] pro komplexní potenciál. V další části jsme se věnovali operátoru $P_a^2 + m^2 I$. Pro reálný potenciál jsme získali magnetický kvazi-relativistický potenciál H_a jako odmocninu operátoru $P_a^2 + m^2 I$ a našli jsme jeho tvar. V případě komplexního potenciálu jsme získali magnetický kvazi-relativistický potenciál jako odmocninu m -akretivního operátoru s podmínkou

$$\left(\frac{2\pi}{L} \operatorname{dist} \left(\frac{L \langle \Re a \rangle}{2\pi}, \mathbb{Z} \right) \right)^2 + m^2 - \max_{x \in [0, L]} |\Im a(x)|^2 \geq 0.$$

Nakonec jsme navrhli jeho tvar a ukázali, že je takový operátor kvazi-hermitovský právě tehdy, když $\langle \Im a \rangle = 0$.

Další výzkum může navázat na tuto práci hned v několika směrech. U kvazi-relativistického operátoru jsme například narazili na zajímavý problém rozhodnout, za jakých podmínek je operátor definovaný pomocí biortonormálních Rieszových bází akretivní či nikoliv, a doplnit tak tuto práci. Také můžeme studovat operátory s komplexním magnetickým potenciálem na jiných definičních oborech.

Literatura

- [1] B. Sedlák, I. Štoll: *Elektřina a magnetismus*. Academia, Praha, 2002.
- [2] I. Jex, I. Štoll, J. Tolar: *Klasická teoretická fyzika*. Karolinum, Praha, 2017.
- [3] D. J. Griffiths: *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson Education, Cambridge University Press, New Jersey, 1995.
- [4] L. Hlavatý, M. Štefaňák: *Slabikář kvantové mechaniky*. Dostupné na: <https://physics.fjfi.cvut.cz/files/predmety/02KVAN/02KVAN>
- [5] B. Thaller: *The Dirac Equation*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, New York, 1992.
- [6] A. A. Balinsky, W. D. Evans: *Spectral Analysis of Relativistic Operators*. Imperial College Press, London, 2011.
- [7] I. Semorádová: *Quantum Mechanics of Klein-Gordon equation*. Dostupné na: https://physics.fjfi.cvut.cz/publications/mf/2016/dp_mf_16_Semoradova.pdf
- [8] D. Kramár: *Solvable models in quasi-Hermitian quantum mechanics*. Dostupné na: https://dspace.cvut.cz/bitstream/handle/10467/97394/F4-BP-2021-Kramar-David-bp_mi_mf_21_kramar.pdf?sequence=-1&isAllowed=y
- [9] D. Krejčířík: *Mathematical aspects of quantum mechanics with non-self-adjoint operators*. Dostupné na: <http://nsa.fjfi.cvut.cz/david/Publications/doc.pdf>
- [10] N. Ananikian, R. Kenna: *Imaginary magnetic fields in the real world*. Physics 8, 2015.
- [11] C. N. Yang, T. D. Lee: *Statistical theory of equations of state and phase transitions. I. theory of condensation*. Phys. Rev., vol. 87, 404, 1952.
- [12] T. D. Lee, C. N. Yang: *Statistical theory of equations of state and phase transitions. II. lattice gas and ising model*. Phys. Rev., vol. 87, 410, 1952.
- [13] B.-B. Wei, R.-B. Liu: *Lee-Yang Zeros and Critical Times in Decoherence of a Probe Spin Coupled to a Bath*. Phys. Rev. Lett. 109, 185701, 2012.
- [14] X. Peng, H. Zhou, B.-B. Wei, J. Cui, J. Du, R.-B. Liu: *Experimental observation of Lee-Yang zeros*. Phys. Rev. Lett. 114, 010601, 2015.
- [15] J. L. Jaramillo: *An Introduction to Local Black Hole Horizons in the 3+1 Approach to General Relativity*. International Journal of Modern Physics D, Vol. 20, No. 11, 2011.

- [16] J. L. Jaramillo: *Black Hole Horizons and Quantum Charged Particles*. Class. Quantum Grav. 32, 132001, 2015.
- [17] D. Krejčířík: *Complex magnetic fields: An improved Hardy-Laptev-Weidl inequality and quasi-self-adjointness*. SIAM J. Math. Anal. 51, 790-807, 2019.
- [18] M. Havlíček, P. Exner, J. Blank: *Lineární operátory v kvantové fyzice*. Karolinum, Praha, 1993.
- [19] T. Kato: *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springe-Verlag Berlin Heidelberg, New York, 1995.
- [20] D. Krejčířík: *Geometrical aspects of spectral theory*, 2022. Dostupné na: <http://nsa.fjfi.cvut.cz/david/other/gspec22.pdf>
- [21] I. C. Gohberg, M. G. Krein: *Introduction to the Theory of Linear Nonselfadjoint Operators in Hilbert Space*. American Mathematical Society, Providence, 1969.
- [22] E. B. Davies: *Linear Operators and their Spectra*. Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
- [23] E. B. Davies: *Spectral theory and differential operators*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.