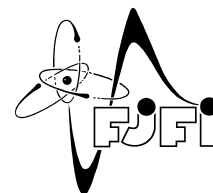




ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE  
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



# Řešitelné modely v kvazi-hermitovské kvantové mechanice

## Solvable models in quasi-Hermitian quantum mechanics

Bakalářská práce

Autor: **David Kramár**  
Vedoucí práce: **doc. Mgr. David Krejčířík, Ph.D. DSc.**  
Akademický rok: 2020/2021



- Zadání práce -

- Zadání práce (zadní strana) -

### *Poděkování:*

Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli doc. Mgr. Davidu Krejčířkovi, Ph.D. DSc. za trpělivost, ochotu, vstřícnost a odborné i lidské zázemí při vedení mé bakalářské práce. Můj velký dík patří také mé partnerce Haně Nicholasové a její i mé rodině za bezpečné a láskyplné zázemí v průběhu mého studia.

### *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 zákonu (autorský zákon).

V Praze dne 7. července 2021

David Kramár



*Název práce:*

## **Řešitelné modely v kvazi-hermitovské kvantové mechanice**

*Autor:* David Kramár

*Obor:* Matematické inženýrství

*Zaměření:* Matematická fyzika

*Druh práce:* Bakalářská práce

*Vedoucí práce:* doc. Mgr. David Krejčířík, Ph.D. DSc., Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT

*Abstrakt:* Uvažujeme jednorozměrný jednoparametrický  $\mathcal{PT}$ -symetrický operátor  $H_\alpha$ , pro který studujeme existenci podobnostní transformace na samosdružený operátor v závislosti na reálném parametru  $\alpha$ . Odvodíme, pro které hodnoty parametru je tento model kvazi-hermitovský a pro tyto hodnoty nalezneme příslušný podobný samosdružený operátor v uzavřeném tvaru. V případech, kdy podobný samosdružený operátor neexistuje, zkonstruujeme zobecněnou podobnostní transformaci a taktéž příslušný podobný operátor nalezneme v uzavřeném tvaru. Následně tyto dva podobné operátory porovnáme a budeme diskutovat jejich rozdíly v závislosti na parametru.

*Klíčová slova:* podobnostní transformace, nesamosdružený operátor, neomezené operátory, PT-symetrie, kvazi-hermitovské operátory

*Title:*

## **Solvable models in quasi-Hermitian quantum mechanics**

*Author:* David Kramár

*Abstract:* We consider an one-dimensional one-parametric  $\mathcal{PT}$ -symmetric operator  $H_\alpha$ , for which we study the existence of the similarity transformation to a self-adjoint operator in dependence on the real parameter  $\alpha$ . We will derive for which values of the parameter the model is quasi-Hermitian and for such values we find corresponding similar self-adjoint operator in the closed form. In the cases when the similar self-adjoint operator does not exist we will construct a generalized similarity transformation and find the similar operator in the closed form likewise. Followingly, we will compare these two similar operators and discuss their differences in dependence on the parameter.

*Key words:* similarity transformation, non-self-adjoint operator, unbounded operators, PT-symmetry, quasi-Hermitian operators





# Obsah

<b>Úvod</b>	<b>10</b>
<b>1 Fyzikální motivace</b>	<b>12</b>
1.1 Konvenční kvantová mechanika . . . . .	12
1.1.1 Historický úvod . . . . .	12
1.1.2 Postuláty kvantové mechaniky . . . . .	12
1.2 Nestandardní kvantové teorie . . . . .	16
1.2.1 Kvazi-hermitovská kvantová mechanika . . . . .	16
1.2.2 $\mathcal{PT}$ -symetrická kvantová mechanika . . . . .	16
<b>2 Matematický aparát</b>	<b>18</b>
2.1 Operátorová teorie . . . . .	18
2.2 Báze v Hilbertových prostorech . . . . .	27
2.3 Kvazi-hermitovskost . . . . .	32
<b>3 Model <math>H_\alpha</math></b>	<b>36</b>
3.1 Spektrální analýza . . . . .	37
3.2 Speciální normalizace . . . . .	38
3.3 Bazické vlastnosti vlastních funkcí . . . . .	39
<b>4 Podobnostní transformace</b>	<b>45</b>
4.1 Jednoduché spektrum . . . . .	45
4.2 Degenerované spektrum . . . . .	47
<b>Závěr</b>	<b>49</b>

# Úvod

Tato bakalářská práce se věnuje studiu modelu  $H_\alpha$ , který byl představen v roce 2006 D. Krejčířkem, H. Bílou a M. Znojilem [18]. Operátor  $H_\alpha$  působí na Hilbertově prostoru  $\mathcal{H} := L^2(0, d)$  jako Laplaceův operátor s komplexními robinovskými hraničními podmínkami

$$\psi'(0) + i\alpha\psi(0) = 0, \quad \psi'(d) + i\alpha\psi(d) = 0,$$

pro každé  $\psi$  z definičního oboru  $H_\alpha$ .

Tento model upoutal velkou pozornost a to z několika důvodů. Tím prvním je skutečnost, že příslušný metrický operátor modifikující skalární součin  $(\cdot, \cdot)$  na prostoru  $\mathcal{H}$  tak, že je vůči němu operátor  $H_\alpha$  samosdružený, lze najít v uzavřeném tvaru (viz [18, 16, 19, 21]). Dalším důvodem je fyzikální relevance tohoto modelu, neboť bylo ukázáno [11, 14, 1, 3], že komplexní robinovské hraniční podmínky mohou reprezentovat určité kvantově-mechanické jevy. Neméně důležitým důvodem je také možnost rozšíření  $H_\alpha$  na vícedimensionální modely [4, 22, 20, 5, 24].

Obsahem této práce je studium operátoru  $H_\alpha$  z hlediska existence podobnostní transformace na samosdružený operátor v prostoru  $\mathcal{H}$  v závislosti na parametru  $\alpha \in \mathbb{R}$ . V obecné rovině bude naše strategie spočívat v zobrazení vlastních vektorů  $H_\alpha$  na nějakou ortonormální bázi prostoru  $\mathcal{H}$  a následném použití spektrálního teorému k nalezení uzavřeného tvaru příslušného podobného operátoru  $h_\alpha$ .

Naším cílem je zobecnit výsledky D. Krejčířka, P. Siegla a J. Železného [21], kteří ukázali, že  $H_\alpha$  je podobný samosdruženému operátoru právě tehdy, když  $\alpha \neq \frac{n\pi}{d}$ , pro všechna  $n \in \mathbb{Z}$ . Pro ortonormální bázi tvořenou vlastními funkcemi neumannovského laplaciánu  $-\Delta_N$  v prostoru  $\mathcal{H}$  dokonce našli podobný samosdružený operátor v uzavřeném tvaru.

**Věta** (Krejčířík, Siegl a Železný [21])

*Necht'  $\alpha \neq \frac{n\pi}{d}$  pro všechna  $n \in \mathbb{Z}$ . Potom existuje  $\Omega \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  taková, že  $\Omega^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  a podobný operátor  $h_\alpha := \Omega H_\alpha \Omega^{-1}$  splňuje*

$$h_\alpha = H_0 + \alpha^2 \psi_0^N(\psi_0^N, \cdot), \quad \text{kde} \quad \psi_0^N(x) := \sqrt{\frac{1}{d}}. \quad (1)$$

Pro případy kdy  $\alpha \neq \frac{n\pi}{d}$ , pro všechna  $n \in \mathbb{Z}$ , prozkoumáme alternativní podobnostní transformaci korespondující ortonormální bázi tvořené vlastními funkcemi dirichletovského laplaciánu  $-\Delta_D$  na  $\mathcal{H}$ . Dále budeme studovat zobecněnou podobnostní transformaci v kritických bodech  $\alpha = \frac{n\pi}{d}$ . Tyto hodnoty  $\alpha$  mají za následek degeneraci vlastní hodnoty  $\lambda_n := \left(\frac{n\pi}{d}\right)^2$  operátoru  $H_\alpha$ . Přestože v těchto bodech není již  $H_\alpha$  podobný žádnému samosdruženému operátoru, podobnostní transformace konstruovaná pomocí zobrazení vlastních vektorů na nějakou ortonormální

bázi je stále možná, vezmeme-li v úvahu tzv. zobecněný vlastní vektor odpovídající degenerované vlastní hodnotě. Naším hlavním cílem bude pro tyto hodnoty najít odpovídající podobný operátor v uzavřeném tvaru a v závislosti na  $\alpha$  jej porovnat s operátorem  $h_\alpha$  definovaného jako (1).

Práce je strukturovaná následovně: nejprve v kapitole 1 stručně probereme fyzikální motivaci studia nesamosdružených operátorů. Dále v kapitole 2 uvedeme nástroje nezbytné pro naše studium operátoru  $H_\alpha$  v kapitole 3, kde bude také korektně definován. Samotná podobnostní transformace bude diskutována v kapitole 4. V poslední kapitole pak uděláme celkové shrnutí.

# Kapitola 1

## Fyzikální motivace

### 1.1 Konvenční kvantová mechanika

Pro sepsání následující kapitoly jsme čerpali zejména z knihy L. Skály [31] a knihy J. Blanka, P. Exnera a M. Havlíčka [12].

#### 1.1.1 Historický úvod

Na konci 19. století se lidé domnívali, že poznávání přírodních zákonů se blíží ke zdárnému konci. Věřilo se, že co ještě vysvětleno nebylo tak brzy bude. Přelom století se však nesl v duchu boření těchto naivních představ.

Rychle rostoucí technologický pokrok na počátku 20. století umožnil provádět experimentální měření s nebyvalou přesností. V důsledku toho se začaly projevovat dosud skryté procesy mikrosvěta, které následně odolávaly teoretickému vysvětlení v rámci klasické fyziky, typickým příkladem takové situace byla diskrétní atomová spektra. Obrovskou ránou pro klasickou fyziku bylo však záření absolutně černého tělesa. Roku 1900 podal Max Planck teoretické vysvětlení tohoto fenoménu za předpokladu, že si absolutně černé těleso vyměňuje energii se svým okolím pouze v dávkách (kvantech). O pět let později, v roce 1905, pomocí této myšlenkové konstrukce vysvětlil Albert Einstein fotoelektrický efekt. Posledním hřebíčkem do rakve klasické fyziky, jakožto nástroji k popisu mikrosvěta, byl Rutherfordův experiment (1911), který vedl na tzv. planetární model atomu a s ním související problém, známý jako stabilita hmoty.

O tomto období se tradičně mluví jako o tzv. krizi klasické fyziky. V následujících letech se však tato krize přerodila v naprostou revoluci chápání světa kolem nás a postupně se zformovala moderní kvantová mechanika.

#### 1.1.2 Postuláty kvantové mechaniky

Moderní náhled na (nerelativistickou) kvantovou mechaniku lze vymezit v rámci následujících pěti postulátů, které jsou dnes obecně přijímané jako platné.

**Postulát 1** (Postulát o vlnové funkci)

Každému kvantovému systému přísluší komplexní separabilní Hilbertův prostor  $\mathcal{H}$ , který nazýváme stavovým (Hilbertovým) prostorem daného systému. Každému stavu uvažovaného systému odpovídá jednotkový vektor  $\psi \in \mathcal{H}$ . Tento vektor bývá tradičně nazýván jako vlnová funkce.

**Poznámka 1.1.1**

- i) Čas vystupuje v kvantové mechanice jako vnější parametr a tedy není, jako je tomu například v rámci obecné teorie relativity, součástí teorie.
- ii) V případě složeného systému (např. více částic) je příslušný Hilbertův prostor dán tenzorovým součinem Hilbertových prostorů odpovídajících jednotlivým systémům (částicím). Také za každý vnitřní stupeň volnosti (např. spin) přibude příslušný Hilbertův prostor.

Pro určitost budeme jako modelovou situaci uvažovat částici v potenciálu  $V$ , neboť se jedná o jednu ze základních úloh kvantové mechaniky. Pro popis tohoto modelu částice v  $\mathbb{R}^3$  je nejhodněji uvažovat stavový Hilbertův prostor jako Lebesgueův prostor  $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}^3)$ .

Podle standardní interpretace kvantové mechaniky je druhá mocnina absolutní hodnoty vlnové funkce  $\psi$  rovna hustotě pravděpodobnosti  $\rho$  nalezení částice v bodě  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  a čase  $t$ , tj.

$$\rho(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2. \quad (1.1)$$

V souladu s touto interpretací musí pochopitelně platit

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz = 1.$$

Odsud' tedy vidíme, že normovací podmínka  $\|\psi\| = 1$  je fyzikálně dobře motivována, neboť v tomto případě vyjadřuje skutečnost, že v každém okamžiku částice "někde je".

**Postulát 2** (Postulát o pozorovatelných)

Fyzikální veličiny, též jen "pozorovatelné", kvantového systému jsou reprezentovány samosdruženými operátory na prostoru stavů  $\mathcal{H}$ .

**Poznámka 1.1.2**

Jaká je skutečná fyzikální motivace požadavku samosdruženosti osvětlí třetí postulát.

Nejelementárnějšími příklady operátorů v kvantové mechanice pro náš modelový příklad jsou operátory polohy a hybnosti.

Kartézským souřadnicím  $x, y, z$  přiřazujeme operátory  $Q_x, Q_y, Q_z$ , definované jako

$$Q_x\psi = x\psi, \quad Q_y\psi = y\psi, \quad Q_z\psi = z\psi. \quad (1.2)$$

Složkám hybnosti  $p_x, p_y, p_z$  v kartézských souřadnicích odpovídají operátory

$$p_x\psi = -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial x}, \quad p_y\psi = -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial y}, \quad p_z\psi = -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial z}. \quad (1.3)$$

### Poznámka 1.1.3

Výše zmíněné operátory jsou neomezené a mají dobrý smysl pouze s příslušnými definičními obory.

Pokud je daná fyzikální veličina  $T$  funkcí polohy a hybnosti (typicky Hamiltonova funkce), získáme její kvantově-mechanický ekvivalent formálním nahrazením proměnných jim odpovídajícími operátory, jinými slovy

$$T(x_i, p_j) \longrightarrow T(Q_{x_i}, p_{x_j}). \quad (1.4)$$

Mluvíme o tzv. principu korespondence.

Nejdůležitějším operátorem v kvantové mechanice je však jistě Hamiltonův operátor  $H$ , odpovídající celkové energii příslušného systému. Pro částici hmotnosti  $m$  pohybující se v potenciálu  $V = V(x, y, z, t)$  je dán její Hamiltonián  $H$  jako

$$H = \frac{p^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V. \quad (1.5)$$

Přičemž operátor  $V$  působí jako násobení skalární funkcí  $V$  a  $p$  značí vektorový operátor hybnosti. Opět připomínáme, že se jedná o neomezené operátory, a proto je třeba vždy společně s působením operátorů zadat i jejich definiční obory.

### Postulát 3 (Postulát o měření)

*Možné hodnoty pozorovatelné  $T$ , daného systému, při měření jsou prvky spektra  $\sigma(T)$  operátoru  $T$ .*

### Poznámka 1.1.4

*Pro jednoduchost budeme nadále uvažovat pouze samosdružené operátory s kompaktní resolventou (viz 2.1.9), neboť tyto operátory mají pouze bodové spektrum.*

Přirozeně očekáváme, že výsledky měření budou reálná čísla, což je zaručeno a priori vzhledem k samosdruženosti operátorů pozorovatelných. Existuje však mnoho operátorů, které samosdružené nejsou a přesto je jejich spektrum reálné. Nejzásadnějším důvodem proč se pozorovatelné zavádějí skrze samosdružené operátory je však Stoneův teorém, který poskytuje unitaritu časového vývoje (viz pátý postulát). Dalším důvodem je také ortogonalita vlastních vektorů. Jak ukazují experimenty, provedeme-li jednou měření veličiny  $T$ , pak všechna další měření téže veličiny dají stejný výsledek. Z matematického hlediska se tedy měření chová jako ortogonální projektor (viz čtvrtý postulát). Ortogonalita, resp. ortonormalita vlastních vektorů pozorovatelných tedy vyjadřuje tuto empirickou skutečnost. Požadavek samosdruženosti v druhém postulátu je tedy čistě pragmatický. Možnostem, jak tento postulát rozšířit bude věnována pozornost v další části této kapitoly.

### Postulát 4 (Postulát o redukci vlnové funkce)

*Při měření veličiny  $T$  se náhodně vybere některá z vlastních hodnot  $T$ . Po měření se částice nachází ve stavu  $\psi_n$ , odpovídajícímu vlastnímu vektoru operátoru  $T$  příslušejícím vlastní hodnotě  $\lambda_n$ .*

### Poznámka 1.1.5

*Tento jev bývá ve fyzikální literatuře nazýván jako redukce vlnové funkce, někdy méně přesně jako kolaps vlnové funkce.*

Jak bylo již zmíněno výše, z matematického hlediska je akt měření působení ortogonálního projektoru  $P_n$  na vlastní podprostor pozorovatelné  $T$ . Pokud byla částice původně ve stavu  $\psi$  je  $p_n$ , pravděpodobnost naměření hodnoty  $\lambda_n$  na stavu  $\psi$ , dána jako

$$p_n := \|P_n\psi\|^2 = \sum_{k=0}^m |(\psi_{n,k}, \psi)|^2, \quad (1.6)$$

kde  $\psi_{n,k}$  jsou příslušné vlastní vektory  $T$  normované k jedné a  $m$  je stupeň degenerace vlastní hodnoty  $\lambda_n$ .

Střední hodnota veličiny  $T$  je pro částici v daném stavu  $\psi \in \mathcal{H}$  dána jako

$$\langle T \rangle_\psi := (\psi, T\psi). \quad (1.7)$$

### Postulát 5 (Postulát o časovém vývoji)

*Necht' se kvantový systém nachází v čase  $t = t_0$  ve stavu  $\psi$ , jeho časový vývoj se potom řídí Schrödingerovou rovnicí*

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = H\psi(t), \quad \text{s počáteční podmínkou} \quad \psi(t_0) = \psi, \quad (1.8)$$

*přičemž operátor  $H$  je Hamiltonián daného systému.*

Schrödingerovu rovnici, stejně jako Newtonovu pohybovou rovnici v klasické fyzice, nelze odvodit z žádných vyšších principů a musí se postulovat jako platná.

Je-li daný Hamiltonián  $H$  nezávislý na čase, pak (vzhledem k již zmíněnému Stoneově teorému) je řešení rovnice (1.8) jedno-parametrická unitární grupa

$$U(t) := e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \quad (1.9)$$

působící na počáteční stav  $\psi_0$ . Příмым důsledkem samosdruženosti Hamiltoniánů je zachování skalárního součinu "v čase". Jinými slovy, pro  $\phi(t), \psi(t)$ , řešení Schrödingerovy rovnice s počátečními podmínkami  $\phi(t_0), \psi(t_0)$ , platí

$$(\phi(t), \psi(t)) = (\phi, \psi), \quad \text{pro všechna} \quad t > t_0.$$

Tato vlastnost časového vývoje stavů je v rámci kvantové mechaniky zcela esenciální.

Co víc, ukazuje se, že unitarita časového vývoje a reálnost spektra pozorovatelných jsou naprosto fundamentální vlastnosti jakékoliv kvantové teorie a na cestě k případnému zobecnění musí být zachovány.

## 1.2 Nestandardní kvantové teorie

Historický přehled vývoje nestandardních kvantových teorií je čerpán zejména z habilitační práce D. Krejčířka [15].

Lidská zvědavost a neukojitelná touha po poznání a porozumění světa kolem nás, nás přivedla do cílové rovinky. Kvantová teorie společně s obecnou teorií relativity jsou vyvrcholením tisíců let bádání. Od naivní představy atomu, coby filosofického konceptu uspokojujícího lidskou představivost, jsme se dostali do kvantového světa. Kvantová mechanika je teorie, která dalece přesahuje nejdivočejší představy řeckých filosofů. Je však jen otázkou času kdy i kvantová mechanika začne být nedostatečnou a to ať už z praktického hlediska nebo z hlediska čistě teoretického. Zástupcem té první z možností je tzv. kvazi-hermitovská kvantová mechanika, jež vzešla z potřeby implementování speciální třídy nesamosdružených operátorů coby pozorovatelných. Naopak ryze teoretický popud sleduje pokus o tzv.  $\mathcal{PT}$ -symetrickou kvantovou mechaniku. V rámci této teorie se vedle samosdruženosti připouští také určitá fyzikální symetrie, která za dodatečných podmínek zaručuje reálnost spektra a unitární časový vývoj. Ani v jednom případě se však bohužel nedá mluvit o zobecnění kvantové mechaniky v pravém slova smyslu.

### 1.2.1 Kvazi-hermitovská kvantová mechanika

V devadesátých letech 20. století se poprvé ukázala potřeba rozšíření kvantové mechaniky o nesamosdružené operátory, resp. jejich speciální třídy, jakožto pozorovatelné. Tento impuls vyplynul z potřeby jaderné fyziky. Průkopníky této myšlenky byli F. G. Scholtz, H. B. Geyer a F. J. W. Hahne, kteří v roce 1992 publikovali článek [29], kde ukázali, že namísto samosdružených operátorů lze konzistentně uvažovat tzv. kvazi-hermitovské, (obecně) nesamosdružené, operátory  $H$  splňující

$$H^* \Theta = \Theta H. \quad (1.10)$$

Operátor  $\Theta$  je pozitivní, omezený a omezeně invertovatelný. Takový operátor existuje jen tehdy, pokud  $H$  je podobný nějakému samosdruženému operátoru  $h$  skrze podobnostní transformaci  $h = \Omega H \Omega^{-1}$ . Jak bylo již naznačeno, nejedná se o rozšíření kvantové mechaniky v pravém slova smyslu, nýbrž pouze o nestandardní reprezentaci samosdružených operátorů. Formálně se jedná pouze o přechod do jiného, topologicky ekvivalentního, Hilbertova prostoru  $\mathcal{H}_\Theta := (\mathcal{H}, (\cdot, \cdot)_\Theta)$ .

Kvazi-hermitovská mechanika byla ve fyzikální i matematické komunitě dlouho přehlížena až do příchodu myšlenky  $\mathcal{PT}$ -symetrické kvantové mechaniky (viz 1.2.2), která upoutala více pozornosti. Studium nesamosdružených operátorů a jejich aplikací se tak stalo velkou výzvou pro mnoho fyziků i matematiků po celém světě, kteří čelí této nové výzvě. Matematickým aspektům kvazi-hermitovských operátorů se budeme podrobněji věnovat v podkapitole 2.3.

### 1.2.2 $\mathcal{PT}$ -symetrická kvantová mechanika

Kvazi-hermitovská kvantová mechanika upoutala ve vědecké komunitě více pozornosti až po příchodu tzv.  $\mathcal{PT}$ -symetrické kvantové mechaniky. Na přelomu tisíciletí se  $\mathcal{PT}$ -symetrická



kvantová mechanika objevila nezávisle na kvazi-hermitovské kvantové mechanice, jakožto další impuls pro implementování nesamosdružených operátorů coby pozorovatelných. C. M. Bender a S. Boettcher [6] si v roce 1998 všimli, že existuje velká třída operátorů na  $L^2(\mathbb{R}^n)$ , které mají reálné spektrum v důsledku tzv.  $\mathcal{PT}$ -symetrie. Jinými slovy, v důsledku komutační relace

$$[\mathcal{PT}, H] = 0, \quad (1.11)$$

kde operátor  $\mathcal{P}\psi(x) := \psi(-x)$  reprezentuje zrcadlení prostoru a  $\mathcal{T}\psi(x) := \bar{\psi}(x)$  reprezentuje otočení směru času.

Bender a Boettcher byli ve svém bádání motivováni modelem

$$H := -\frac{d^2}{dx^2} + ix^3 \quad \text{na} \quad L^2(\mathbb{R}), \quad (1.12)$$

který rozšířili na celou třídu parametrických  $\mathcal{PT}$ -symetrických operátorů v  $L^2(\mathbb{R})$

$$H_\epsilon := -\frac{d^2}{dx^2} + x^2(ix)^\epsilon, \quad \text{pro} \quad \epsilon \in \mathbb{R}. \quad (1.13)$$

Přičemž operátor  $H_\epsilon$  má kladné a reálné spektrum pouze pro nezáporné hodnoty parametru  $\epsilon$ , což koresponduje se zachováním  $\mathcal{PT}$ -symetrie. Následná diskuze ve vědecké komunitě však naznačovala, že  $\mathcal{PT}$ -symetrické operátory jsou kvantově mechanicky relevantní pouze za předpokladu, že jsou současně kvazi-hermitovské a tedy žádné nové operátory nepřinášejí. S tímto argumentem poprvé přišel Ali Mostafazadeh [27, 25, 26]. Navzdory tomu nacházejí  $\mathcal{PT}$ -symetrické hamiltoniány využití při popisu experimentálních jevů v optice a částicové fyzice, viz [10, 23].

# Kapitola 2

## Matematický aparát

Jak již bylo zmíněno výše, hlavním nástrojem pro studium kvantové mechaniky je teorie Hilbertových prostorů, resp. (obecněji) funkcionální analýza. Z toho důvodu v následující kapitole přinášíme přehled pojmů a základních, místy i pokročilejších, poznatků funkcionální analýzy, které budou dále v této práci využívány. Většina pojmů a tvrzení je převzata z knihy J. Blanka, P. Exnera a M. Havlíčka [12] a přednášek P. Šťovíčka z funkcionální analýzy [28]. Obsah podkapitoly týkající se bází v Hilbertových prostorech je čerpán z [13, 9, 7].

### 2.1 Operátorová teorie

**Definice 2.1.1** (Hilbertův prostor)

Řekneme, že vektorový prostor  $\mathcal{H}$  nad tělesem  $T = \mathbb{R}$  nebo  $T = \mathbb{C}$  se skalárním součinem  $(\cdot, \cdot)$  je Hilbertův prostor, jestliže je úplný vzhledem k normě  $\|\cdot\|$  indukované skalárním součinem.

**Poznámka 2.1.1**

- i) Hilbertův prostor budeme značit jako  $\mathcal{H}$  a nebude-li řečeno jinak, bude předpokládáno, že je definovaný nad tělesem  $\mathbb{C}$ .
- ii) Skalární součin  $(\cdot, \cdot)$  bude uvažován jako antilineární ve svém prvním argumentu.

**Definice 2.1.2** (Lineární operátor)

Lineárním operátorem  $H$  na  $\mathcal{H}$  rozumíme uspořádanou dvojici  $(H, \text{Dom}(H))$ , kde  $\text{Dom}(H) \subset \mathcal{H}$ , podprostor  $\mathcal{H}$ , nazýváme definičním oborem  $H$  a  $H : \text{Dom}(H) \rightarrow \mathcal{H}$  je lineární zobrazení.

**Definice 2.1.3** (Graf lineárního zobrazení)

Bud'  $X, Y$  normované vektorové prostory,  $H$  lineární zobrazení z  $X$  do  $Y$ . Potom grafem lineárního zobrazení  $H$  rozumíme množinu

$$\Gamma(H) := \{(x, Hx) \in X \times Y \mid x \in \text{Dom}(H)\} \quad (2.1)$$

Tuto množinu navíc vybavujeme normou  $\|(x, y)\|_{\Gamma}^2 := \|x\|_X^2 + \|y\|_Y^2$ .

### Poznámka 2.1.2

i) Bud'  $\Gamma \subset X \times Y$ , potom  $\Gamma$  je grafem nějakého lineárního zobrazení právě tehdy když platí výrok

$$\forall (x, y) \in \Gamma : x = 0 \Rightarrow y = 0.$$

ii) Dále bude přísudek "lineární" v pojmu lineární operátor typicky vypuštěn. Nebude-li řečeno jinak bude pojem "operátor" vždy označovat lineární operátor.

### Definice 2.1.4

Bud'  $\mathcal{H}$  Hilbertův prostor, potom

i)  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  bude označovat prostor všech hustě definovaných lineárních operátorů na  $\mathcal{H}$ .

ii)  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  bude označovat prostor všech omezených lineárních operátorů na  $\mathcal{H}$ .

### Definice 2.1.5 (Uzavřené zobrazení)

Řekneme, že operátor  $H$  na prostoru  $\mathcal{H}$  je uzavřený, jestliže  $\Gamma(H)$  je uzavřená množina.

### Poznámka 2.1.3

Alternativní přepis definice 2.1.5 je, že pro libovolnou posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^{\infty} \subset \text{Dom}(H)$  platí

$$\left( \lim_{n \rightarrow \infty} \psi_n = \psi \in \mathcal{H} \wedge \lim_{n \rightarrow \infty} H\psi_n = \phi \in \mathcal{H} \right) \Rightarrow (\psi \in \text{Dom}(H) \wedge H\psi = \phi).$$

### Definice 2.1.6 (Uzavíratelné zobrazení)

Při stejných předpokladech jako v definici 2.1.3 řekneme, že  $H$  je uzavíratelné zobrazení, jestliže  $\overline{\Gamma(H)}$  je graf.

### Poznámka 2.1.4

Alternativně lze také definici 2.1.6 formulovat jako výrok

$$\forall (\psi_n)_{n=0}^{\infty} \subset \text{Dom}(H) : (\psi_n \rightarrow 0 \wedge \|H\psi_n - H\psi_m\| \rightarrow 0) \Rightarrow H\psi_n \rightarrow 0.$$

### Definice 2.1.7 (Uzávěr lineárního zobrazení)

Pokud je lineární zobrazení  $H$  uzavíratelné, pak jeho uzávěr  $\overline{H}$  definujeme vztahem  $\Gamma(H) := \overline{\Gamma(H)}$ .

### Poznámka 2.1.5

Nadále, nebude-li řečeno jinak, budeme považovat všechna zobrazení za uzavřená, místy to však explicitně zdůrazníme.

### Definice 2.1.8 (Resolventní množina)

Bud' te  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  uzavřený operátor,  $\lambda \in \mathbb{C}$ . Řekneme, že  $\lambda$  je z resolventní množiny operátoru  $H$  ( $\lambda \in \rho(H)$ ), jestliže  $H - \lambda\mathbb{I}$  je bijekce  $\text{Dom}(H)$  na  $\mathcal{H}$ .

Jinými slovy

$$\rho(H) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \text{Ker}(H - \lambda\mathbb{I}) = \{0\} \wedge \text{Ran}(H - \lambda\mathbb{I}) = \mathcal{H}\}. \quad (2.2)$$

### Definice 2.1.9 (Resolventa)

Bud' te  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ,  $\lambda \in \rho(H)$ . Pak resolventou rozumíme parametrický operátor  $R_\lambda := (H - \lambda\mathbb{I})^{-1}$ .

**Definice 2.1.10** (Spektrum)

Bud'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ . Potom spektrem  $H$  rozumíme množinu  $\sigma(H) := \mathbb{C} \setminus \rho(H)$ .

**Definice 2.1.11** (Klasifikace spektra)

Bud'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ . Potom definujeme disjunktní rozdělení jeho spektra  $\sigma(H)$  následovně:

- i) Bodové spektrum  $\sigma_p(H) := \{\lambda \in \sigma(H) \mid \text{Ker}(\lambda - \mathbb{I}) \neq \{0\}\}$ .
- ii) Spojité spektrum  $\sigma_c(H) := \{\lambda \in \sigma(H) \mid \text{Ker}(H - \lambda\mathbb{I}) = \{0\} \wedge \overline{\text{Ran}(H - \lambda\mathbb{I})} = \mathcal{H}\}$ .
- iii) Reziduální spektrum  $\sigma_r(H) := \{\lambda \in \sigma(H) \mid \text{Ker}(H - \lambda\mathbb{I}) = \{0\} \wedge \overline{\text{Ran}(H - \lambda\mathbb{I})} \neq \mathcal{H}\}$ .

**Definice 2.1.12** (Sdružený operátor)

Bud'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  ne nutně uzavřený operátor na  $\mathcal{H}$ . Potom sdružený operátor  $H^*$  definujeme jako

$$\text{Dom}(H^*) = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \exists \eta \in \mathcal{H} : \forall \phi \in \text{Dom}(H) : (\psi, H\phi) = (\eta, \phi)\}$$

$$H^*\psi := \eta.$$

**Definice 2.1.13** (Symetrický operátor)

Bud'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  ne nutně uzavřený operátor na  $\mathcal{H}$ . Řekneme, že  $H$  je symetrický, jestliže  $H \subset H^*$ . Jinými slovy, pro všechna  $\phi, \psi \in \text{Dom}(H)$  platí  $(\phi, H\psi) = (H\phi, \psi)$ .

**Definice 2.1.14**

Bud'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  ne nutně omezený operátor na  $\mathcal{H}$ , tak že  $\text{Dom}(H) = \text{Dom}(H^*)$ . Řekneme, že  $H$  je

- i) samosdružený, jestliže  $H = H^*$ .
- ii) normální, jestliže  $H^*H = HH^*$ .

**Poznámka 2.1.6**

Z definice 2.1.14 je jasné, že každý samosdružený operátor je také normální.

**Tvrzení 2.1.1**

Bud'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  normální operátor v  $\mathcal{H}$ . Potom  $\lambda \in \sigma_p(H) \Leftrightarrow \bar{\lambda} \in \sigma_p(H^*)$ .

*Důkaz.*  $\lambda \in \sigma_p(H) \Leftrightarrow$  existuje nenulový vektor  $\psi \in \text{Dom}(H) : (H - \lambda\mathbb{I})\psi = 0$ .

Pro libovolné  $\lambda \in \sigma_p(H)$  pak máme

$$0 = ((H - \lambda\mathbb{I})\psi, (H - \lambda\mathbb{I})\psi) = ((H^* - \bar{\lambda}\mathbb{I})\psi, (H^* - \bar{\lambda}\mathbb{I})\psi).$$

Odtud již plyne dokazované tvrzení. □

**Tvrzení 2.1.2**

Bud'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  libovolný operátor na  $\mathcal{H}$ . Potom  $\text{Ker}(H^*) = \text{Ran}(H)^\perp$ .

*Důkaz.* Bud'  $\psi \in \text{Ker}(H^*)$  libovolné. Pak pro všechna  $\phi \in \text{Dom}(H)$  platí

$$0 = (H^*\psi, \phi) = (\psi, H\phi).$$

A tedy  $\psi \in \text{Ran}(H)^\perp$ . □

**Věta 2.1.1**

Bud'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  normální operátor na  $\mathcal{H}$ . Potom  $\sigma_r(H) = \emptyset$ , tj. jeho residuální spektrum je prázdné.

*Důkaz.* Bud'  $\lambda \in \sigma_c(H) \cup \sigma_r(H)$  libovolné. Podle tvrzení 2.1.2 lze prostor  $\mathcal{H}$  rozložit na direktní součet jako

$$\mathcal{H} = \text{Ker}(H^* - \bar{\lambda}\mathbb{I}) \oplus \overline{\text{Ran}(H - \lambda\mathbb{I})}$$

Protože však  $\lambda \in \sigma_p(H) \Leftrightarrow \bar{\lambda} \in \sigma_p(H^*)$  je  $\text{Ker}(H^* - \bar{\lambda}\mathbb{I}) = \{0\}$ . Tudíž  $\overline{\text{Ran}(H - \lambda\mathbb{I})} = \mathcal{H}$  a tedy  $\lambda \in \sigma_c(H)$ . □

**Věta 2.1.2 (Weylovo kritérium)**

Bud' te  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  uzavřený normální operátor,  $\lambda \in \mathbb{C}$ .

Potom  $\lambda \in \rho(H) \Leftrightarrow \exists m \in \mathbb{R}^+ : \forall \psi \in \text{Dom}(H) : \|(H - \lambda\mathbb{I})\psi\|^2 \geq m\|\psi\|^2$ .

*Důkaz.*

$\Rightarrow$ : Necht'  $\lambda \in \rho(H)$ . Potom pro všechna  $\psi \in \text{Dom}(H)$  platí

$$\|\psi\|^2 = \|\mathcal{R}_\lambda(H - \lambda\mathbb{I})\psi\|^2 \leq \|\mathcal{R}_\lambda\|^2 \|(H - \lambda\mathbb{I})\psi\|^2.$$

Stačí tedy volit  $m := \frac{1}{\|\mathcal{R}_\lambda\|^2}$ .

$\Leftarrow$ : Necht' existuje kladné  $m$ , tak že pro všechna  $\psi \in \text{Dom}(H)$  je

$$\|(H - \lambda\mathbb{I})\psi\|^2 \geq m\|\psi\|^2. \quad (2.3)$$

Jistě lze prostor  $\mathcal{H}$  rozložit jako

$$\mathcal{H} = \text{Ker}(H^* - \bar{\lambda}\mathbb{I}) \oplus \overline{\text{Ran}(H - \lambda\mathbb{I})}.$$

Ze skutečnosti, že  $H$  je normální a nerovnosti (2.3) plyne, že existuje omezený hustě definovaný operátor  $(H - \lambda\mathbb{I})^{-1}$ . Zároveň je uzavřený neboť  $H$  je uzavřený. Uzavřený, omezený a hustě definovaný operátor je ale nutně definovaný všude a tedy  $(H - \lambda\mathbb{I})^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ . □

**Věta 2.1.3**

Bud'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  samosdružený operátor na  $\mathcal{H}$ . Potom  $\sigma(H) \subset \mathbb{R}$ .

*Důkaz.* Bud'  $\lambda \in \mathbb{C}$  libovolné. Označme  $\lambda^R := \text{Re}(\lambda)$ ,  $\lambda^I := \text{Im}(\lambda)$ . Pro všechna  $\psi \in \text{Dom}(H)$  máme

$$\begin{aligned} \|(H - \lambda\mathbb{I})\psi\|^2 &= \left( (H - \lambda^R\mathbb{I} - \lambda^I\mathbb{I})\psi, (H - \lambda^R\mathbb{I} - \lambda^I\mathbb{I})\psi \right) = \\ &= \|(H - \lambda^R\mathbb{I})\psi\|^2 + |\lambda^I|^2\|\psi\|^2 \geq |\lambda^I|^2\|\psi\|^2. \end{aligned}$$

Jinými slovy  $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \subset \rho(H)$  a tedy  $\sigma(H) \subset \mathbb{R}$ . □

**Věta 2.1.4 (Spektrální teorém)**

Bud'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  libovolný samosdružený operátor na  $\mathcal{H}$ . Potom množina vlastních vektorů  $H$  tvoří ortonormální bázi prostoru  $\mathcal{H}$  právě tehdy, když  $\sigma_c(H) = \emptyset$ .

### Důsledek 2.1.1

Bud' te  $\mathcal{H}$  separabilní Hilbertův prostor nekonečné dimenze,  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  samosdružený operátor s čistě bodovým spektrem  $(\lambda_n)_{n=0}^{\infty}$  s příslušnými vlastními funkcemi  $(\psi_n)_{n=0}^{\infty}$ . Potom pro všechna  $\psi \in \text{Dom}(H)$  platí

$$H\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \psi_n (\psi_n, \psi) = s - \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^m \lambda_n \psi_n (\psi_n, \psi). \quad (2.4)$$

Důkaz. Podle předpokladů tvoří posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^{\infty}$  ortonormální bázi prostoru  $\mathcal{H}$ . Pro všechna  $\psi \in \mathcal{H}$  tedy platí

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n (\psi_n, \psi) = s - \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^m \psi_n (\psi_n, \psi).$$

Pro libovolné  $\phi, \psi \in \text{Dom}(H)$  potom dostáváme

$$(\phi, H\psi) = \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi, H\psi) = \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi, \sum_{n=0}^m \lambda_n \psi_n (\psi_n, \psi)) = \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi, \sum_{n=0}^m \lambda_n \psi_n (\psi_n, \psi)).$$

Přičemž  $H$  je samosdružený a tedy podle definice hustě definovaný. To nám zaručuje rovnost pro každé  $\phi \in \mathcal{H}$  a tedy dostáváme pro všechna  $\psi \in \text{Dom}(H)$

$$H\psi = s - \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^m \lambda_n \psi_n (\psi_n, \psi).$$

□

### Věta 2.1.5

Bud' te  $K \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ ,  $(a_n)_{n=0}^{\infty}, (b_n)_{n=0}^{\infty}$  libovolné dvě ortonormální báze. Potom platí

$$\sum_{n=0}^{\infty} \|Ka_n\|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \|K^*b_n\|^2. \quad (2.5)$$

Důkaz. Necht'  $\sum_{n=0}^{\infty} \|Ka_n\|^2$  konverguje, pak platí

$$\sum_{n=0}^{\infty} \|Ka_n\|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} |(b_k, Ka_n)|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} |(K^*b_k, a_n)|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \|K^*b_n\|^2.$$

□

### Definice 2.1.15 (Hilbert-Schmidtův operátor)

Řekneme, že  $K \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  je Hilbert-Schmidtův operátor, jestliže pro nějakou ortonormální bázi  $(e_n)_{n=0}^{\infty}$  (a tím pádem pro všechny) platí

$$r^2 := \sum_{n=0}^{\infty} \|Ke_n\|^2 < \infty. \quad (2.6)$$

Hilbert-Schmidtovu normu  $\|K\|_{HS}$  pak definujeme jako  $\|K\|_{HS} := r$ .

**Věta 2.1.6**

Bud'  $K$  Hilbert-Schmidtův operátor na  $\mathcal{H}$ . Potom platí  $\|K\| \leq \|K\|_{HS}$ .

Důkaz. Bud' te  $(e_n)_{n=0}^{\infty}$  libovolná ortonormální báze,  $\psi \in \mathcal{H}$

$$\|K\psi\|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} |(e_n, K\psi)|^2 \leq \sum_{n=0}^{\infty} \|K^* e_n\|^2 \|\psi\|^2 = \|K\|_{HS}^2 \|\psi\|^2.$$

□

**Věta 2.1.7**

Bud'  $M$  měřitelný prostor s mírou  $\mu$  a položme  $\mathcal{H} := L^2(M, d\mu)$ . Necht' navíc  $\mathcal{H}$  je separabilní. Potom pro každé  $\mathcal{K} \in L^2(M \times M, d\mu \times d\mu)$  je integrální operátor

$$K\psi(x) := \int_M \mathcal{K}(x, y)\psi(y)dy, \quad \text{pro všechna } \psi \in \mathcal{H} \quad (2.7)$$

dobře definovaný Hilbert-Schmidtův operátor na  $\mathcal{H}$  a platí  $\|K\|_{HS} = \|\mathcal{K}\|_{L^2(M \times M)}$ .

**Definice 2.1.16** (Multi-index)

Bud' te  $n \in \mathbb{N}$ ,  $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{N}_0$ . Potom multi-indexem rozumíme uspořádanou  $n$ -tici  $\alpha := (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ . Dále definujeme velikost multi-indexu  $\alpha$  jako  $|\alpha| := \alpha_1 + \dots + \alpha_n$ .

**Poznámka 2.1.7**

Pomocí multi-indexu zavádíme následující značení parciální derivace

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

**Definice 2.1.17** (Slabá derivace)

Bud' te  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  oblast,  $\alpha \in \mathbb{N}_0^n$  multi-index. Necht' dále  $\psi \in L^1_{loc}(\Omega)$ . Říkáme, že  $\xi \in L^1_{loc}(\Omega)$  je slabá derivace  $\psi$ , jestliže pro všechna  $\phi \in C_0^\infty(\Omega)$  platí

$$\int_\Omega \xi(x)\phi(x)dx := (-1)^{|\alpha|} \int_\Omega \psi(x)D^\alpha \phi(x)dx.$$

**Poznámka 2.1.8**

i) Množina  $C_0^\infty(\Omega)$  je definovaná jako  $C_0^\infty(\Omega) := \{\psi \in C^\infty(\Omega) \mid \text{supp } \psi \subset \Omega \text{ je kompaktní}\}$ .

ii) Pokud navíc  $\psi \in C^k(\Omega)$ , pak pro  $|\alpha| \leq k$  slabá a klasická derivace splývají.

iii) Za účelem zjednodušení značení budeme slabou derivaci  $\psi \in L^1_{loc}(\Omega)$  řádu  $\alpha \in \mathbb{N}_0^n$  značit jako  $D^\alpha \psi$ . Pokud nebude z kontextu jasné, zda se jedná o klasickou, resp. slabou derivaci bude to vždy zdůrazněno.

**Definice 2.1.18** (Sobolevovy prostory)

Bud'  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ,  $p \in [1, \infty]$ ,  $k \in \mathbb{N}_0$ . Potom Sobolevovým prostorem  $W^{k,p}(\Omega)$  rozumíme množinu funkcí  $\psi \in L^p(\Omega)$  takových že pro všechna  $|\alpha| \leq k$  slabá derivace  $D^\alpha \psi$  leží v prostoru  $L^p(\Omega)$ , tj. množina

$$W^{k,p}(\Omega) := \{\psi \in L^p(\Omega) \mid \forall |\alpha| \leq k : D^\alpha \psi \in L^p(\Omega)\} \quad (2.8)$$

vybavená normou

$$\|\psi\|_{k,p}^p = \|\psi\|_{W^{k,p}(\Omega)}^p := \sum_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha \psi\|_{L^p(\Omega)}^p, \quad \text{pro } p \in [1, \infty), \quad (2.9)$$

$$\|\psi\|_{k,\infty} = \|\psi\|_{W^{k,\infty}(\Omega)} := \max_{|\alpha| \leq k} \|\psi\|_{L^\infty(\Omega)}, \quad \text{pro } p = \infty. \quad (2.10)$$

**Poznámka 2.1.9**

Pro  $k = 0$  ztotožňujeme  $W^{0,p}(\Omega) = L^p(\Omega)$ .

**Věta 2.1.8** ([32, Lemma 5.2])

Bud'  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  libovolná oblast.

- i) Pro libovolné  $p \in [1, \infty]$  a  $k \in \mathbb{N}_0$  je Sobolevův prostor  $W^{k,p}(\Omega)$  Banachův prostor.  
ii) Pro  $p = 2$  je navíc  $W^{k,2}(\Omega)$  Hilbertův prostor se skalárním součinem definovaným pro  $\psi, \phi \in W^{k,2}(\Omega)$  jako

$$(\psi, \phi)_k := \sum_{|\alpha| \leq k} \int_{\Omega} \overline{D^\alpha \psi(x)} D^\alpha \phi(x) dx. \quad (2.11)$$

**Věta 2.1.9** (Meyers-Serrin)

Bud'  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  otevřená,  $p \in [1, \infty]$ ,  $k \in \mathbb{N}_0$ . Potom  $W^{k,p}(\Omega) = \overline{C^\infty(\Omega)}$  vzhledem k normě  $\|\cdot\|_{k,p}$ .

**Poznámka 2.1.10**

V duchu předchozí věty 2.1.9 zavádíme značení  $W_0^{k,p}(\Omega) := \overline{C_0^\infty(\Omega)}$  vzhledem k normě  $\|\cdot\|_{k,p}$ .

**Věta 2.1.10** ([13, Chapter VI, Theorem 1.27])

Bud'  $h$  hustě definovaná, zespoda uzavřená sesquilineární forma na prostoru  $\mathcal{H}$ . Potom  $h$  je uzavíratelné zobrazení.

**Věta 2.1.11** ([13, Chapter VI, Theorem 2.1])

Bud'  $h$  hustě definovaná uzavřená a zespoda omezená sesquilineární forma v prostoru  $\mathcal{H}$ . Potom existuje právě jeden zespoda omezený operátor  $H$  takový, že

- i)  $\text{Dom}(H) \subset \text{Dom}(h)$ .  
ii) pro všechna  $\psi \in \text{Dom}(H)$ ,  $\phi \in \text{Dom}(h)$  platí  $h(\phi, \psi) = (\phi, H\psi)$ .

**Definice 2.1.19** (Friedrichsovo rozšíření)

Bud'  $\tilde{H}$  zespoda omezený, hustě definovaný operátor na prostoru  $\mathcal{H}$ . Položme  $\tilde{h}(\phi, \psi) := (\phi, H\psi)$  pro  $\phi, \psi \in \text{Dom}(\tilde{H})$ , tj.  $\text{Dom}(\tilde{h}) = \text{Dom}(\tilde{H})$ . Pak podle věty 2.1.10 existuje  $h := \tilde{h}$ , uzávěr  $\tilde{h}$ , a podle věty 2.1.11 existuje jednoznačně určený operátor  $H$  jehož je  $h$  přidružená sesquilineární forma. Operátor  $H$  nazýváme Friedrichsovým rozšířením daného operátoru  $\tilde{H}$ .



**Definice 2.1.20** (Klasifikace hraničních podmínek)

Bud'  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  omezená oblast s hranicí  $\partial\Omega$  a  $H$  diferenciální operátor na  $L^p(\Omega)$ . Uvažujme dále funkci  $f : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{C}$ , potom hraniční podmínkou 1. druhu (dirichletovskou) rozumíme rovnici

$$\psi(x) = f(x) \quad \text{na} \quad \partial\Omega. \quad (2.12)$$

Hraniční podmínkou 2. druhu (neumannovskou) rozumíme rovnici

$$\frac{\partial\psi(x)}{\partial n} = f(x) \quad \text{na} \quad \partial\Omega, \quad (2.13)$$

kde  $n$  je směrový vektor vnější normály. Smíšenou hraniční podmínku pro  $\alpha \in \mathbb{C}$

$$\psi(x) + \alpha \frac{\partial\psi(x)}{\partial n} = f(x) \quad \text{na} \quad \partial\Omega, \quad (2.14)$$

nazýváme robinovskou hraniční podmínkou.

**Poznámka 2.1.11**

- i) V definici 2.1.20 jsme uvažovali  $\Omega$  omezenou, nicméně hraniční podmínky musí být zadány kdykoliv existuje nějaká hranice  $\partial\Omega$ , tj. když "neleží v nekonečnu".
- ii) V případě hraniční podmínky 2. druhu (neumannovské) či hraniční podmínky smíšené (robinovské) je třeba dodatečně předpokládat dostatečnou hladkost hranice  $\partial\Omega$ , tak aby normálová derivace byla dobře definována, tj. hranice nesmí obsahovat například "rohy".
- iii) V případě diferenciálních operátorů na  $L^2(\Omega)$  bývá funkce  $f$  typicky volena jako nulová, neboť je to nezbytná podmínka samosdruženosti operátoru  $H$ .

**Příklad 2.1.1** (Definice dirichletovského laplaciánu)

Uvažujme Hilbertův prostor  $\mathcal{H} := L^2(\Omega)$ , kde  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  je libovolná omezená oblast s po částech hladkou hranicí.

Jedním z nejdůležitějších operátorů na prostoru  $\mathcal{H}$  je Laplaceův operátor. Jeho důležitost plyne zejména z kvantové mechaniky, kde reprezentuje operátor kinetické energie částice (případně více částic) na množině  $\Omega$ . V závislosti na hraničních podmínkách potom mluvíme o tzv. dirichletovském laplaciánu  $-\Delta_D^\Omega$ , resp. neumannovském laplaciánu  $-\Delta_N^\Omega$ . Tyto operátory jsou při vhodné volbě definičního oboru samosdružené. Ve fyzikální literatuře se však zřídka kdy uvádějí příslušné definiční obory či jejich korektní odvození. Z tohoto důvodu odvodíme v případě dirichletovských hraničních podmínek korektní zavedení operátoru  $-\Delta_D^\Omega$ . Nadále budeme následující dirichletovské hraniční podmínky:

$$\psi(x) = 0 \quad \text{na} \quad \partial\Omega.$$

Dirichletovský laplacián budeme hledat jako Friedrichsovo rozšíření následujícího operátoru:

$$\begin{aligned} \tilde{H} &:= -\Delta, \\ \text{Dom}(\tilde{H}) &:= C_0^\infty(\overline{\Omega}). \end{aligned}$$

Pro všechna  $\phi, \psi \in \text{Dom}(\tilde{H})$  platí

$$\begin{aligned} (\phi, \tilde{H}\psi) &= - \int_{\Omega} \bar{\phi}(x) \Delta \psi(x) dx = - \int_{\Omega} \left[ \nabla (\bar{\phi}(x) \nabla \psi(x)) - \nabla \bar{\phi}(x) \nabla \psi(x) \right] dx = \\ &= - \int_{\partial\Omega} \bar{\phi}(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial n} dS + \int_{\Omega} \nabla \bar{\phi}(x) \nabla \psi(x) dx = (\nabla \phi, \nabla \psi). \end{aligned}$$

Od operátoru  $\tilde{H}$  nejprve přejdeme k jeho přidružené sesquilineární formě

$$\begin{aligned} \tilde{h} &:= (\phi, \tilde{H}\psi) = (\nabla \phi, \nabla \psi), \\ \text{Dom}(\tilde{h}) &:= \text{Dom}(\tilde{H}). \end{aligned}$$

### Tvrzení 2.1.3

Forma  $\tilde{h}$  je uzavíratelná.

Důkaz.  $\tilde{h}$  je uzavíratelná  $\Leftrightarrow \forall (\psi_n)_{n=0}^{\infty} \subset \text{Dom}(\tilde{h}) : \|\psi_n\| \rightarrow 0 \wedge \|\nabla \psi_n - \nabla \psi_m\| \rightarrow 0 \Rightarrow \tilde{h}[\psi_n] \rightarrow 0$

Bud'  $(\psi_n)_{n=0}^{\infty} \subset \text{Dom}(\tilde{h})$  libovolná taková posloupnost.

Potom  $(\nabla \psi_n)_{n=0}^{\infty} \subset L^2(\Omega, \mathbb{C}^n) := \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}^n \mid \int_{\Omega} |f|^2 < \infty\}$  je Cauchyovská a tedy existuje  $f \in L^2(\Omega, \mathbb{C}^n)$ , tak že  $\nabla \psi_n \rightarrow f$  v  $L^2(\Omega, \mathbb{C}^n)$ . Pro všechna  $\phi \in C_0^{\infty}(\Omega, \mathbb{C}^n)$  pak platí

$$\begin{aligned} (\phi, f) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \bar{\phi}(x) \nabla \psi_n(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\partial\Omega} \bar{\phi}(x) \psi_n(x) dS - \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \text{div} \bar{\phi}(x) \psi_n(x) dx = \\ &= (-\text{div} \phi, 0) = (\phi, 0). \end{aligned}$$

Protože  $C_0^{\infty}(\Omega, \mathbb{C}^n)$  je hustá v  $L^2(\Omega, \mathbb{C}^n)$  je jasné, že  $f = 0$ . □

Označme  $h := \overline{\tilde{h}}$  uzávěr  $\tilde{h}$  s definičním oborem  $\text{Dom}(h) = \overline{C_0^{\infty}(\Omega)}^{\|\cdot\|_h} = W_0^{1,2}(\Omega)$ .

### Tvrzení 2.1.4

Pro všechna  $\phi, \psi \in W_0^{1,2}(\Omega)$  platí  $h(\phi, \psi) = (\nabla \phi, \nabla \psi)$ , kde  $\nabla$  je slabý gradient.

Důkaz. Bud'  $\psi \in W_0^{1,2}(\Omega)$  libovolné. Pak existuje  $(\psi_n)_{n=0}^{\infty} \subset C_0^{\infty}(\Omega)$ ,  $f \in L^2(\Omega, \mathbb{C}^n)$  tak, že platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_n = \psi \in W_0^{1,2}(\Omega), \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \nabla \psi_n = f \in L^2(\Omega, \mathbb{C}^n).$$

Potom pro všechna  $\phi \in C_0^{\infty}(\Omega, \mathbb{C}^n)$  máme

$$\begin{aligned} (\phi, f) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \bar{\phi}(x) \nabla \psi_n(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\partial\Omega} \bar{\phi}(x) \psi_n(x) dS - \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \text{div} \bar{\phi}(x) \psi_n(x) dx = \\ &= (-\text{div} \phi, \psi). \end{aligned}$$

Pro všechna  $i \in \{1, \dots, n\}$  tedy máme

$$\int_{\Omega} \bar{\phi}_i(x) f_i(x) dx = - \int_{\Omega} \frac{\partial \bar{\phi}_i(x)}{\partial x_i} \psi(x) dx.$$

Z definice 2.1.17 je tedy  $f$  slabý gradient limity  $\psi$ , tj.  $f(x) = \nabla \psi(x)$ . Odtud již vidíme, že pro libovolná  $\phi, \psi \in W_0^{1,2}(\Omega) : h(\phi, \psi) = (\nabla \phi, \nabla \psi)$ , kde  $\nabla$  je slabý gradient. □

Zbývá pouze určit hledaný samosdružený operátor  $H$ , jehož je  $h$  přidružená sesquilineární forma. Takový operátor podle věty 2.1.11 existuje, protože  $h$  je hustě definovaná, uzavřená a zdola omezená forma.  $H$  je jistě samosdružený, neboť  $h$  je symetrická forma.

### Tvrzení 2.1.5

Samosdružený operátor  $H$  působí na svém definičním oboru jako slabý laplacián, tj.  $H\psi = -\Delta\psi$ .

*Důkaz.* Již víme, že  $H$  existuje. Uvažujme  $\psi \in \text{Dom}(H)$  libovolné, potom pro všechna  $\phi \in C_0^\infty(\Omega)$  platí

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \bar{\phi}(x)H\psi(x)dx &= h(\phi, \psi) = \int_{\Omega} \nabla\bar{\phi}(x)\nabla\psi(x)dx = - \int_{\Omega} \bar{\phi}(x)\Delta\psi(x)dx = \\ &= \int_{\Omega} \bar{\phi}(x)(-\Delta)\psi(x)dx \end{aligned}$$

Podle definice 2.1.17 tedy  $H$  působí jako záporně vzatý slabý laplacián, tj.

$$\begin{aligned} H\psi &= -\Delta\psi, \quad \text{ve slabém smyslu} \\ \text{Dom}(H) &= \{\psi \in W_0^{1,2}(\Omega) \mid \Delta\psi \in L^2(\Omega)\}. \end{aligned}$$

□

### Poznámka 2.1.12

Pro dostatečně "hezkké" oblasti  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  (například omezené oblasti s hranicí  $\partial\Omega \in C^2$ ) platí

$$\text{Dom}(H) = \{\psi \in W_0^{1,2}(\Omega) \mid \Delta\psi \in L^2(\Omega)\} = W_0^{1,2}(\Omega) \cap W^{2,2}(\Omega).$$

## 2.2 Báze v Hilbertových prostorech

V této podkapitole bychom rádi krátce uvedli teorii bází v Hilbertových prostorech. Vedle ortonormálních bází, které poskytují jeden z nejsilnějších nástrojů v teorii Hilbertových prostorů, lze uvažovat jiné rodiny bází, běžně užívané v literatuře věnující se nesamosdruženým operátorům. Čtenáře odkazujeme na [9, 13, 2] pro detailní studium rozličných bazických vlastností posloupností v Hilbertových prostorech.

### Poznámka 2.2.1

V celé podkapitole budeme uvažovat komplexní separabilní Hilbertův prostor a budeme jej značit jako  $\mathcal{H}$ . Bez újmy na obecnosti budeme předpokládat jeho dimenzi nekonečnou.

### Definice 2.2.1 (Úplnost)

Řekneme, že posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^\infty \subset \mathcal{H}$  je úplná, jestliže její ortogonální doplněk obsahuje pouze nulový vektor, tzn.:

$$(\psi, \psi_n) = 0, \quad \forall n \in \mathbb{N}_0 \Rightarrow \psi = 0. \quad (2.15)$$

**Definice 2.2.2 (Báze)**

Řekneme, že  $(\psi_n)_{n=0}^\infty \subset \mathcal{H}$  je báze prostoru  $\mathcal{H}$ , jestliže pro každý prvek  $\psi \in \mathcal{H}$  existuje právě jedna posloupnost  $(\alpha_n)_{n=0}^\infty \subset \mathbb{C}$  taková, že

$$\psi = s - \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^m \alpha_n \psi_n. \quad (2.16)$$

**Poznámka 2.2.2**

Takto zavedený koncept báze lze zavést pro obecný Banachův prostor.

**Tvrzení 2.2.1**

Každá báze prostoru  $\mathcal{H}$  je úplná.

*Důkaz.* Necht'  $M := \{\psi_n \mid n \in \mathbb{N}_0\}$  je libovolná báze  $\mathcal{H}$ ,  $\phi \in M^\perp$ , potom

$$\phi = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \psi_n \Rightarrow \|\phi\|^2 = (\phi, \phi) = \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi, \sum_{n=0}^m \alpha_n \psi_n) = 0.$$

□

**Definice 2.2.3 (Bi-ortonormální relace)**

Bud'te  $(\psi_n)_{n=0}^\infty, (\phi_n)_{n=0}^\infty \subset \mathcal{H}$  posloupnosti v  $\mathcal{H}$ .

Řekneme, že  $(\psi_n)_{n=0}^\infty, (\phi_n)_{n=0}^\infty$  jsou v bi-ortonormální relaci, jestliže pro všechna  $n, m \in \mathbb{N}_0$  platí

$$(\psi_n, \phi_m) = \delta_{nm}.$$

Pokud navíc  $(\psi_n)_{n=0}^\infty, (\phi_n)_{n=0}^\infty$  jsou báze, řekneme, že společně tvoří bi-ortonormální bázi.

**Tvrzení 2.2.2**

Neht'  $(\psi_n)_{n=0}^\infty, (\phi_n)_{n=0}^\infty$  tvoří bi-ortonormální bázi prostoru  $\mathcal{H}$ .

Potom pro všechna  $\psi \in \mathcal{H}$  platí

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} (\phi_n, \psi) \psi_n = \sum_{n=0}^{\infty} (\psi_n, \psi) \phi_n. \quad (2.17)$$

*Důkaz.* Dle předpokladu obě posloupnosti  $(\psi_n)_{n=0}^\infty, (\phi_n)_{n=0}^\infty$  tvoří bázi prostoru  $\mathcal{H}$  samy o sobě. Existují tedy posloupnosti  $(\alpha_n)_{n=0}^\infty, (\beta_n)_{n=0}^\infty \subset \mathbb{C}$  pro které platí

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \psi_n = \sum_{n=0}^{\infty} \beta_n \phi_n.$$

Odtud již snadno vyvodíme dokazované tvrzení:

$$(\phi_k, \psi) = \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi_k, \sum_{n=0}^m \alpha_n \psi_n) = \alpha_k,$$

$$(\psi_k, \psi) = \lim_{m \rightarrow \infty} (\psi_k, \sum_{n=0}^m \beta_n \phi_n) = \beta_k.$$

□

### Poznámka 2.2.3

Pro danou posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^\infty$  existuje bi-ortonormální posloupnost  $(\phi_n)_{n=0}^\infty$  právě tehdy, když

$$\psi_k \notin \overline{M_k}, \quad \text{pro všechna } k \in \mathbb{N}_0,$$

kde  $M_k := \text{span}\{\psi_n \mid n \in \mathbb{N}_0, n \neq k\}$ . Příslušný vektor  $\phi_k$  potom leží v ortogonálním doplňku  $M_k^\perp$ . Pokud je navíc  $(\psi_n)_{n=0}^\infty$  úplná množina, posloupnost  $(\phi_n)_{n=0}^\infty$  je určena jednoznačně.

**Věta 2.2.1** (S. Banach [9, Chapter VI., Theorem 1.1])

Nechť posloupnosti  $(\psi_n)_{n=0}^\infty, (\phi_n)_{n=0}^\infty \subset \mathcal{H}$  jsou v bi-ortonormální relaci. Potom pokud jedna z nich tvoří bázi prostoru  $\mathcal{H}$ , pak i druhá je báze  $\mathcal{H}$ .

Bi-ortonormalita je spojena s první rodinou bází v Hilbertových prostorech, kterou zavedeme. Buďte  $(e_n)_{n=0}^\infty$  libovolná ortonormální báze prostoru  $\mathcal{H}$  a  $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  omezený operátor s omezenou inverzí.

Označme  $\phi_n := T e_n$ , pro všechna  $n \in \mathbb{N}_0$ . Potom pro všechna  $\psi \in \mathcal{H}$  platí

$$T^{-1}\psi = \sum_{n=0}^{\infty} (e_n, T^{-1}\psi) e_n \quad (2.18)$$

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} ((T^{-1})^* e_n, \psi) T e_n \quad (2.19)$$

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \phi_n, \quad (2.20)$$

kde  $\alpha_n = ((T^{-1})^* e_n, \psi)$  pro  $n \in \mathbb{N}_0$  je posloupnost určená jednoznačně a proto  $(\phi_n)_{n=0}^\infty$  je báze prostoru  $\mathcal{H}$ .

Báze generované skrze omezená a omezeně invertovatelná lineární zobrazení se nazývají "Báze ekvivalentní ortonormální bázi" nebo také "Rieszovy báze". My se budeme přiklánět k druhému z pojmenování.

### Poznámka 2.2.4

K dosažení rovnosti (2.19) jsme využili záměnnost limity a spojitého zobrazení.

**Definice 2.2.4** (Rieszova báze)

Řekneme, že posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^\infty \subset \mathcal{H}$  je Rieszova báze prostoru  $\mathcal{H}$ , jestliže existuje  $(e_n)_{n=0}^\infty \subset \mathcal{H}$ , ortonormální báze  $\mathcal{H}$ , a omezené lineární zobrazení  $T$  s omezenou inverzí, takové že platí

$$T e_n = \psi_n, \quad \text{pro všechna } n \in \mathbb{N}_0. \quad (2.21)$$

**Věta 2.2.2** (Frame)

Každá Rieszova báze  $(\psi_n)_{n=0}^\infty$  prostoru  $\mathcal{H}$  tvoří jeho frame. Tj. existují kladná čísla  $m, M \in \mathbb{R}^+$  taková, že pro všechna  $\psi \in \mathcal{H}$  platí

$$m\|\psi\|^2 \leq \sum_{n=0}^{\infty} |(\psi_n, \psi)|^2 \leq M\|\psi\|^2. \quad (2.22)$$

*Důkaz.* Necht'  $(\psi_n)_{n=0}^\infty$  tvoří Rieszovu bázi prostoru  $\mathcal{H}$ . Podle definice existují lineární zobrazení  $T, T^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ , tak že  $(T^{-1}\psi_n)_{n=0}^\infty$  je ortonormální báze  $\mathcal{H}$ . Pro každé  $\psi \in \mathcal{H}$  pak máme

i)

$$\sum_{n=0}^{\infty} |(\psi_n, \psi)|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} |(Te_n, \psi)|^2 = \|T^*\psi\|^2 \leq \|T^*\|^2 \|\psi\|^2 = \|T\|^2 \|\psi\|^2$$

ii)

$$\frac{1}{\|T^{-1}\|^2} \|\psi\|^2 = \frac{1}{\|T^{-1}\|^2} \|(T^*)^{-1}T^*\psi\|^2 \leq \|T^*\psi\|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} |(\psi_n, \psi)|^2$$

□

### Poznámka 2.2.5

Z důkazu mimo jiné plyne, že čísla  $\frac{1}{\|T^{-1}\|^2}$ , resp.  $\|T\|^2$  jsou optimální hodnoty omezujících konstant  $m$ , resp.  $M$ .

### Lemma 2.2.1

Bud'  $(\phi_n)_{n=0}^\infty$  Rieszova báze prostoru  $\mathcal{H}$ . Potom operátor  $\Theta$  definovaný jako

$$\Theta := \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(\phi_n, \cdot) = s\text{-}\lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^m \phi_n(\phi_n, \cdot) \quad (2.23)$$

je pozitivní, omezený a má omezenou inverzi v  $\mathcal{H}$ .

*Důkaz.* Podle věty 2.2.2 existují kladná čísla  $m, M \in \mathbb{R}^+$ , tak že pro všechna  $\psi \in \mathcal{H}$  platí

$$m\|\psi\|^2 \leq \sum_{n=0}^{\infty} |(\psi_n, \psi)|^2 \leq M\|\psi\|^2.$$

Jinými slovy

$$m\|\psi\|^2 \leq (\psi, \Theta\psi) \leq M\|\psi\|^2 \Leftrightarrow \Theta, \Theta^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}),$$

přičemž pozitivita zobrazení  $\Theta$  je zřejmá.

□

### Věta 2.2.3

Bud' te  $(\phi_n)_{n=0}^\infty$  Rieszova báze prostoru  $\mathcal{H}$  a posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^\infty$  k ní bi-ortonormální. Potom i  $(\psi_n)_{n=0}^\infty$  tvoří Rieszovu bázi  $\mathcal{H}$ .

*Důkaz.* Uvažujme operátor  $\Theta$  definovaný v lemmatu 2.2.1. Zřejmě pak platí

$$\phi_n = \Theta\psi_n, \quad \text{pro všechna } n \in \mathbb{N}_0.$$

Z definice skutečnosti, že  $(\phi_n)_{n=0}^\infty$  je Rieszova báze plyne existence omezeného a omezeně invertovatelného zobrazení  $T$  tak, že  $(T^{-1}\phi_n)_{n=0}^\infty$  je ortonormální báze. Kombinací těchto dvou faktů získáváme tvrzení věty.

□

Následující větu poprvé vyslovila a dokázala Nina Karlovna Bari. Tato věta odpovídá na otázku, jak souvisí Rieszovy báze a relace bi-ortonormality.

**Věta 2.2.4** (N. K. Bari [9, Chapter VI., Theorem 2.1])

*Následující tvrzení jsou ekvivalentní.*

- i) Posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^\infty \subset \mathcal{H}$  tvoří Rieszovu bázi prostoru  $\mathcal{H}$ .
- ii) Na prostoru  $\mathcal{H}$  existuje topologicky ekvivalentní skalární součin  $(\cdot, \cdot)_1$  tak, že vzhledem k němu tvoří posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^\infty$  ortonormální bázi.
- iii) Posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^\infty$  je úplná v  $\mathcal{H}$  a existují kladná čísla  $m, M$  taková, že pro libovolné přirozené číslo  $n \in \mathbb{N}$  a libovolnou konečnou komplexní posloupnost  $(\alpha_n)_{k=0}^n \subset \mathbb{C}$  platí

$$m \sum_{k=0}^n |\alpha_k|^2 \leq \left\| \sum_{k=0}^n \alpha_k \psi_k \right\|^2 \leq M \sum_{k=0}^n |\alpha_k|^2.$$

- vi) Posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^\infty$  je úplná v  $\mathcal{H}$  a její Gramova matice

$$((\psi_k, \psi_n))_{k,n=0}^\infty$$

generuje omezený invertibilní operátor na prostoru  $\ell^2$ .

- v) Posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^\infty$  je úplná v  $\mathcal{H}$  a existuje k ní úplná bi-ortonormální posloupnost  $(\phi_n)_{n=0}^\infty$  tak, že pro každé  $\psi \in \mathcal{H}$  platí

$$\sum_{k=0}^\infty |(\psi_n, \psi)|^2 < \infty, \quad \sum_{k=0}^\infty |(\phi_n, \psi)|^2 < \infty.$$

Kromě Rieszových bází je dalším nekonvenčním zástupcem bází v Hilbertových prostorech rodina bází nazývaná Bariny báze. V angličtině "Bari basis". Bariny báze jsou (ve smyslu inkluze) silnější vlastností, než Rieszovy báze.

**Definice 2.2.5** ( $\omega$ -lineární nezávislost)

Řekneme, že posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^\infty \subset \mathcal{H}$  je  $\omega$ -lineárně nezávislá, jestliže pro libovolnou komplexní posloupnost  $(\alpha_n)_{n=0}^\infty \subset \mathbb{C}$  platí výrok:

$$\sum_{n=0}^\infty \alpha_n \psi_n = 0 \Rightarrow \alpha_n = 0, \quad \forall n \in \mathbb{N}_0. \quad (2.24)$$

**Definice 2.2.6**

Řekneme, že posloupnosti  $(\psi_n)_{n=0}^\infty, (\phi_n)_{n=0}^\infty \subset \mathcal{H}$  jsou si kvadraticky blízké, jestliže

$$r^2 := \sum_{n=0}^\infty \|\psi_n - \phi_n\|^2 < \infty. \quad (2.25)$$

**Věta 2.2.5** (N. K. Bari [9, Theorem 2.3])

Libovolná  $\omega$ -lineárně nezávislá posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^\infty \subset \mathcal{H}$ , která je kvadraticky blízko nějaké bázi  $(\phi_n)_{n=0}^\infty$ , která je Rieszova báze je sama Rieszovou bází.

**Definice 2.2.7** (Barina báze)

Řekneme, že  $\omega$ -lineárně nezávislá posloupnost  $(\psi_n)_{n=0}^{\infty} \subset \mathcal{H}$  je Barina báze prostoru  $\mathcal{H}$ , jestliže je kvadraticky blízko nějaké ortonormální bázi  $(e_n)_{n=0}^{\infty}$ .

**Poznámka 2.2.6**

Barina báze je tedy vskutku výrazně silnější vlastností (ve smyslu inkluze), než Rieszova báze. Mezi uvedenými rodinami bází pak panují následující formální vztahy:  
Ortonormální báze  $\subset$  Barina báze  $\subset$  Rieszova báze  $\subset$  báze  $\subset$  úplná posloupnost.

## 2.3 Kvazi-hermitovskost

**Definice 2.3.1** (Metrika)

Bud'  $\Theta$  pozitivní omezený operátor s omezenou inverzí na separabilním Hilbertově prostoru  $\mathcal{H}$ . Řekneme, že  $\Theta$  je metrika pro daný operátor  $H$ , pokud platí

$$\Theta H = H^* \Theta. \quad (2.26)$$

**Poznámka 2.3.1**

- i) Pro daný operátor  $H$  existuje metrika právě tehdy, když  $H$  je podobný samosdruženému operátoru. V takovém případě snadno nahlédneme, že operátor  $H$  je samosdružený v topologicky ekvivalentním Hilbertově prostoru  $\mathcal{H}_{\Theta} := (\mathcal{H}, (\cdot, \cdot)_{\Theta})$ . Operátor  $H$  pak nazýváme kvazi-hermitovským.
- ii) Snadno také vidíme, že metrika není určena jednoznačně. Je-li  $\Theta$  metrika pro  $H$ , pak pro každé  $\lambda \in \mathbb{R}^+$  je také  $\lambda\Theta$  metrika pro  $H$ . Mělo by být také zmíněno, že operátor metriky  $\Theta$  je samosdružený, což plyne ze skutečnosti, že  $\Theta$  je pozitivní a omezený.
- iii) Pojem metriky je pevně svázaný s daným operátorem  $H$  pro něhož metriku tvoří. Nemá tedy smysl mluvit o metrice bez kontextu.

**Lemma 2.3.1**

Necht'  $\Theta$  představuje metriku pro daný operátor  $H$  na prostoru  $\mathcal{H}$ .

- i) Potom existuje omezený operátor  $\Omega$  s omezenou inverzí tak, že  $\Theta = \Omega^* \Omega$ .
- ii) Pro takové  $\Omega$  je  $h := \Omega H \Omega^{-1}$  podobný  $H$  a platí  $h = h^*$ .



*Důkaz.*

i) Podle předpokladů je operátor  $\Theta$  omezený a pozitivní, existuje tedy právě jeden pozitivní operátor  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ , takový, že platí  $A^2 = \Theta$ . Protože  $A$  je pozitivní a omezený, je také samodružený a tedy triviálně splňuje rovnost  $A^*A = \Theta$ . Stačí tedy volit  $\Omega := A$ .

ii) Tvrzení, že  $h$  je podobný  $H$  je triviální, neboť to plyne přímo z jeho definice. S využitím vlastností metriky pro  $H$  pak snadno ověříme i jeho samodruženost:

$$h^* = (\Omega^{-1})H^*\Omega^* = (\Omega^{-1})\Theta H\Theta^{-1}\Omega^* = \Omega H\Omega^{-1} = h.$$

□

### **Poznámka 2.3.2**

*Podobnostní transformace z lemmatu 2.3.1 je dobře definovaná kdykoliv jsou operátory  $\Omega, \Omega^{-1}$  omezené v  $\mathcal{H}$ . Poznáváme, že jejich omezenost je ekvivalentní omezenosti operátorů  $\Theta, \Theta^{-1}$ , kde  $\Theta = \Omega^*\Omega$ .*

### **Věta 2.3.1**

*Necht'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ , operátor na separabilním Hilbertově prostoru  $\mathcal{H}$ , má čistě bodové reálné spektrum. Potom  $H$  je kvazi-hermitovský právě tehdy, když vlastní vektory  $H^*$  tvoří Rieszovu bázi prostoru  $\mathcal{H}$ .*

*Důkaz.* Důkaz provedeme jako dvě implikace. Označme  $(\phi_n)_{n=0}^\infty$  posloupnost vlastních vektorů  $H^*$ . Kvazi-hermitovskost je ekvivalentní existenci metriky pro  $H$ .

$\Rightarrow$ : Necht' existuje  $\Theta$ , metrika pro  $H$ . Podle lemmatu 2.3.1 existuje omezený operátor  $\Omega$  s omezenou inverzí, tak že  $\Theta = \Omega^*\Omega$ .

Definujme posloupnost

$$e_n := (\Omega^*)^{-1}\phi_n \quad \text{pro všechna } n \in \mathbb{N}_0. \quad (2.27)$$

Potom  $(e_n)_{n=0}^\infty$  tvoří vlastní vektory samodruženého operátoru  $h$  definovaného v souladu s lemmatem 2.3.1. Protože  $H$  má čistě bodové spektrum i podobný operátor  $h$  má čistě bodové spektrum a tedy podle spektrálního teorému  $(e_n)_{n=0}^\infty$  tvoří ortonormální bázi  $\mathcal{H}$ .

$\Leftarrow$ : Necht'  $(\phi_n)_{n=0}^\infty$  tvoří Rieszovu bázi prostoru  $\mathcal{H}$ .

Definujme operátor  $\Theta$  jako

$$\Theta := \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(\phi_n, \cdot) = s - \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^m \phi_n(\phi_n, \cdot). \quad (2.28)$$

Podle lemmatu 2.2.1 je takový operátor pozitivní, omezený a s omezenou inverzí.

Pro libovolná  $\phi, \psi \in \text{Dom } H$  pak dostáváme

$$\begin{aligned} (\phi, H^* \Theta \psi) &= \lim_{m \rightarrow \infty} (H\phi, \sum_{n=0}^m \phi_n(\phi_n, \psi)) = \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi, \sum_{n=0}^m \lambda_n \phi_n(\phi_n, \psi)) = \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi, \sum_{n=0}^m \phi_n(H^* \phi_n, \psi)) = \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi, \sum_{n=0}^m \phi_n(\phi_n, H\psi)) = (\phi, \Theta H\psi). \end{aligned}$$

Rovnost ve smyslu forem však lze rozšířit pro každé  $\phi \in \mathcal{H}$ , neboť  $\text{Dom } H$  je hustá v  $\mathcal{H}$ .

Tudíž  $H^* \Theta \psi = \Theta H\psi$ , pro všechna  $\psi \in \text{Dom } H$ .  $\square$

### Tvrzení 2.3.1

Bud'  $H$  kvazi-hermitovský operátor s vlastními funkcemi  $(\psi_n)_{n=0}^{\infty}$ . Při stejném značení jako ve větě 2.3.1 pro všechna  $n \in \mathbb{N}_0$  platí

$$(\Omega^*)^{-1} \phi_n = \Omega \psi_n. \quad (2.29)$$

Pro libovolné  $\Omega$  splňující  $\Theta = \Omega^* \Omega$ .

Důkaz. Pro libovolné  $n \in \mathbb{N}_0$  snadno nahlédneme, že

$$H^* \Theta \psi_n = \Theta H\psi_n = \lambda_n \Theta \psi_n \rightarrow \phi_n = \Theta \psi_n.$$

Pro libovolný rozklad  $\Theta = \Omega^* \Omega$  pak dostáváme dokazované tvrzení.  $\square$

### Důsledek 2.3.1

Bud'  $H$  kvazi-hermitovský operátor na  $\mathcal{H}$  s čistě bodovým spektrem. Potom vlastní vektory  $H$  a  $H^*$  tvoří bi-ortonormální bázi prostoru  $\mathcal{H}$ .

Důkaz. Bud'  $\Theta := \Omega^* \Omega$  metrika pro  $H$  a označme  $(\psi_n)_{n=0}^{\infty}$ , resp.  $(\phi_n)_{n=0}^{\infty}$  vlastní vektory  $H$ , resp.  $H^*$ .

Pro každé  $n \in \mathbb{N}_0$  položme  $e_n := (\Omega^*)^{-1} \phi_n = \Omega \psi_n$ . Pak podle věty 2.3.1  $(e_n)_{n=0}^{\infty}$  tvoří ortonormální bázi prostoru  $\mathcal{H}$ . Pro všechna  $n, m \in \mathbb{N}_0$  platí

$$(\phi_n, \psi_m) = (\Omega^* e_n, \Omega^{-1} e_m) = (e_n, e_m) = \delta_{nm}.$$

$\square$

### Věta 2.3.2

Bud'  $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  kvazi-hermitovský operátor v prostoru  $\mathcal{H}$ , tak že  $\sigma(H) = (\lambda_n)_{n=0}^{\infty}$ .

Označme příslušné vlastní funkce  $H$ , resp.  $H^*$  jako  $(\psi_n)_{n=0}^{\infty}$ , resp.  $(\phi_n)_{n=0}^{\infty}$ . Potom platí

$$H = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \psi_n(\phi_n, \cdot) \quad H = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \phi_n(\psi_n, \cdot). \quad (2.30)$$

Limity jsou chápány v silném smyslu.

*Důkaz.* Podle důsledku 2.3.1 tvoří vlastní funkce  $H, H^*$  bi-ortonormální bázi a tedy podle tvrzení (2.2.2) pro všechna  $\phi \in \text{Dom}(H^*), \psi \in \text{Dom}(H)$  máme

$$(\phi, H\psi) = \lim_{m \rightarrow \infty} (H^* \phi, \sum_{n=0}^m \psi_n(\phi_n, \psi)) = \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi, \sum_{n=0}^m \lambda_n \psi_n(\phi_n, \psi)) = (\phi, \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \psi_n(\phi_n, \psi)).$$

Protože  $H$  je v  $\mathcal{H}$  hustě definovaný je i  $H^*$  hustě definovaný v  $\mathcal{H}$  a tedy máme pro všechna  $\phi \in \mathcal{H}$  rovnost

$$(\phi, H\psi) = (\phi, \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \psi_n(\phi_n, \psi)).$$

Pro všechna  $\psi \in \text{Dom}(H)$  tedy platí

$$H\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \psi_n(\phi_n, \psi).$$

Ze stejného důvodu platí i druhá rovnost. □

Obecně platí, že kdykoliv má kvazi-hermitovský operátor  $H$  čistě bodové spektrum, lze v duchu důkazu věty 2.3.1 zkonstruovat jeho metriku  $\Theta$  pomocí vlastních vektorů  $H^*$  jako

$$\Theta = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^2 \phi_n(\phi_n, \cdot) = s - \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^m C_n^2 \phi_n(\phi_n, \cdot). \quad (2.31)$$

Posloupnost  $(C_n)_{n=0}^{\infty}$ , splňující

$$0 < k \leq C_n \leq K < \infty, \quad \text{pro všechna } n \in \mathbb{N}_0, \quad (2.32)$$

lze interpretovat jako různé normalizace posloupnosti  $(\phi_n)_{n=0}^{\infty}$  a volením různých posloupností  $(C_n)_{n=0}^{\infty}$  získáme všechny metriky pro  $H$ . V případě bodového spektra  $H$  je také možné operátor  $\Omega$  z lemmatu 2.3.1 definovat jako

$$\Omega := \sum_{n=0}^{\infty} e_n(\phi_n, \cdot) = s - \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^m e_n(\phi_n, \cdot), \quad (2.33)$$

kde  $(e_n)_{n=0}^{\infty}$  je libovolná ortonormální báze  $\mathcal{H}$ .

### **Poznámka 2.3.3**

*Veškerá tvrzení v této podkapitole byla vyslovena v řeči vlastních vektorů sdruženého operátoru  $H^*$ , ve skutečnosti bychom však mohli místo nich vyslovit tvrzení pro vlastní vektory samotného operátoru  $H$ . Je totiž zřejmé, že  $H$  je kvazi-hermitovský právě tehdy, když  $H^*$  je kvazi-hermitovský.*

# Kapitola 3

## Model $H_\alpha$

Bud'  $d$  kladné reálné číslo. Nadále  $\mathcal{H} := L^2(0, d)$  bude značit Hilbertův prostor,  $\|\cdot\|$  bude označovat standardní normu v prostoru  $\mathcal{H}$  a příslušný skalární součin  $(\cdot, \cdot)$  bude antilineární v prvním argumentu.

Pro reálný parametr  $\alpha$  definujeme operátor  $H_\alpha$ , působící na prostoru  $\mathcal{H}$  jako záporně vzatá druhá derivace

$$H_\alpha := -\frac{d^2}{dx^2} \quad (3.1)$$

s definičním oborem

$$\text{Dom}(H_\alpha) := \{\psi \in W^{2,2}(0, d) \mid \psi'(0) + i\alpha\psi(0) = 0 = \psi'(d) + i\alpha\psi(d)\}. \quad (3.2)$$

### Poznámka 3.0.1

Pro hodnoty  $\alpha = 0$ , resp.  $\alpha = \infty$  operátor  $H_\alpha$  přechází (v případě  $\alpha = \infty$  pouze formálně) na neumannovský, resp. dirichletovský laplacián v  $\mathcal{H}$ , t.j.:

$$H_0 = -\Delta_N, \quad H_\infty = -\Delta_D. \quad (3.3)$$

Spektra těchto operátorů jsou [17]:

$$\sigma(-\Delta_N) = \{k_n^2\}_{n=0}^\infty, \quad \sigma(-\Delta_D) = \{k_n^2\}_{n=1}^\infty, \quad \text{kde} \quad k_n := \frac{n\pi}{d}. \quad (3.4)$$

Příslušné vlastní funkce  $-\Delta_N$  a  $-\Delta_D$  jsou pro  $n \in \mathbb{N}$  dány po řadě jako

$$\begin{aligned} \psi_n^N(x) &:= \sqrt{\frac{2}{d}} \cos(k_n x), & \psi_0^N(x) &:= \sqrt{\frac{1}{d}}, \\ \psi_n^D(x) &:= \sqrt{\frac{2}{d}} \sin(k_n x). \end{aligned}$$

Takto normalizované posloupnosti  $(\psi_n^N)_{n=0}^\infty$ ,  $(\psi_n^D)_{n=1}^\infty$  tvoří ortonormální báze prostoru  $\mathcal{H}$ .

Dále na prostoru  $\mathcal{H}$  zavádíme operátor "hybnosti"  $p$  a jeho sdružený operátor  $p^*$  jako

$$p := -i\frac{d}{dx}, \quad \text{Dom}(p) := W_0^{1,2}(0, d), \quad (3.5)$$

$$p^* = -i\frac{d}{dx}, \quad \text{Dom}(p^*) = W^{1,2}(0, d). \quad (3.6)$$

Tyto operátory mají ve vztahu k operátorům  $-\Delta_N$ , resp.  $-\Delta_D$  následující vlastnosti:

$$pp^* = -\Delta_N, \quad p^*p = -\Delta_D.$$

Dále pro všechna  $n \in \mathbb{N}$  platí

$$p\psi_n^D = -ik_n\psi_n^N, \quad p^*\psi_n^D = ik_n\psi_n^D.$$

### 3.1 Spektrální analýza

Úloha na vlastní čísla  $H_\alpha$  je Helmholtzova úloha na intervalu  $I := (0, d)$  s robinovskými hraničními podmínkami.

$$\begin{aligned} \psi'' &= k^2\psi & \text{na} & \quad (0, d), \\ \psi'(x) + i\alpha\psi(x) &= 0 & \text{v} & \quad \{0, d\}. \end{aligned}$$

Jedná se o obyčejnou diferenciální rovnici druhého řádu. Její obecné řešení je tvaru

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx).$$

Vezmeme-li v úvahu hraniční podmínky, nalezneme spektrum ve tvaru

$$\sigma(H_\alpha) = \{\alpha^2\} \cup \{k_n^2\}_{n=1}^\infty. \quad (3.7)$$

Pro zjednodušení zápisu bude použito značení  $\lambda_0 := k_0^2 := \alpha^2$ . Příslušné vlastní funkce  $H_\alpha$ , resp.  $H_\alpha^*$  jsou  $\psi_n^\alpha$ , resp.  $\phi_n^\alpha$  dané jako

$$\psi_0^\alpha(x) := A_0 e^{-i\alpha x}, \quad \psi_n^\alpha(x) := A_n \left( \psi_n^N(x) - i\frac{\alpha}{k_n} \psi_n^D(x) \right), \quad (3.8)$$

$$\phi_0^\alpha(x) := B_0 e^{i\alpha x}, \quad \phi_n^\alpha(x) := B_n \left( \psi_n^N(x) + i\frac{\alpha}{k_n} \psi_n^D(x) \right). \quad (3.9)$$

Sdružený operátor  $H_\alpha^*$  je realizován jako vzetí záporné hodnoty  $\alpha$ , jinými slovy  $H_\alpha^* = H_{-\alpha}$ .

Spektrum je jednoduché právě tehdy, když  $\alpha \neq k_n$  pro všechna  $n \in \mathbb{Z}$ . Naopak, pokud  $\alpha = k_m$  pro nějaké  $m \in \mathbb{N}$ , pak vlastní hodnota  $\lambda_m$  je algebraické násobnosti dva a geometrické násobnosti jedna. V takovém případě tedy jedna vlastní funkce "chybí" ve smyslu, že operátor  $\Theta$  definovaný jako (2.31) by měl netriviální jádro dimenze jedna a tedy by nebyl invertovatelný. Stěží by pak mohl zajišťovat podobnostní transformaci  $H_\alpha$  ve smyslu poznámky 2.3.2. Abychom se vyřádali s touto situací v budoucích úvahách, zavádíme běžně používaný koncept zobecněného vlastního vektoru, v anglické literatuře [2, Chapter V] také "root vector".

### Poznámka 3.1.1

V budoucích úvahách o vlastnostech operátoru  $H_\alpha$  v kritických bodech  $\alpha = k_m$  budeme  $m$ , bez újmy na obecnosti, uvažovat pouze jako přirozené číslo, tj.  $m \in \mathbb{N}$ .

### Definice 3.1.1 (Zobecněný vlastní vektor)

Bud'  $H$  operátor na  $\mathcal{H}$ ,  $\lambda$  jeho vlastní hodnota s příslušným vlastním vektorem  $\psi$ . Řekneme, že  $\phi \in \text{Dom}(H)$  je zobecněný vlastní vektor operátoru  $H$  příslušný vlastní hodnotě  $\lambda$ , pokud platí

$$(H - \lambda)\phi = \lambda\psi. \quad (3.10)$$

Je zřejmé, že takové  $\phi$  pro daný operátor  $H$  existuje právě tehdy, když je jeho spektrum degenerované. Pro degeneraci  $\alpha = k_m$  je snadné ověřit, že zobecněná vlastní funkce příslušná  $H_\alpha$ , resp.  $H_\alpha^*$  je  $\psi_0^\alpha$ , resp.  $\phi_0^\alpha$  ve tvaru

$$\psi_0^\alpha := A_0 \frac{1}{2k_m} \left( -\frac{1}{2k_m} e^{ik_m x} + ix e^{-ik_m x} \right), \quad \phi_0^\alpha := B_0 \frac{1}{2k_m} \left( -\frac{1}{2k_m} e^{-ik_m x} - ix e^{ik_m x} \right). \quad (3.11)$$

### Věta 3.1.1

Operátor  $H_\alpha$  je  $\mathcal{PT}$ -symetrický, tj.  $[\mathcal{PT}, H_\alpha] = 0$  pro všechna  $\alpha \in \mathbb{R}$ . Přičemž operátor  $\mathcal{P}$ , resp.  $\mathcal{T}$  působí na prostoru  $\mathcal{H}$  jako  $\mathcal{P}\psi(x) := \psi(d-x)$ , resp.  $\mathcal{T}\psi(x) := \bar{\psi}(x)$ .

Navíc pro všechna  $\alpha \in \mathbb{R}$ , jsou vlastní funkce  $H_\alpha$  také vlastní funkce operátoru  $\mathcal{PT}$  a platí

$$\mathcal{PT}\psi_n^\alpha = (-1)^n \psi_n^\alpha \quad \text{pro všechna } n \in \mathbb{N}. \quad (3.12)$$

V případě, že  $\alpha \neq k_m$ , pro všechna  $m \in \mathbb{Z}$ , je  $\psi_0^\alpha$  vlastní funkce  $H_\alpha$  a splňuje

$$\mathcal{PT}\psi_0^\alpha = e^{i\alpha d} \psi_0^\alpha. \quad (3.13)$$

*Důkaz.* Bud'  $\alpha \in \mathbb{R}$  libovolné, potom pro všechna  $\psi \in \text{Dom}(H_\alpha)$  platí

$$[\mathcal{PT}, H_\alpha]\psi(x) = \mathcal{PT}H_\alpha\psi(x) - H_\alpha\mathcal{PT}\psi(x) = -\bar{\psi}''(d-x) - H_\alpha\bar{\psi}(d-x) = 0.$$

Nebot' kdykoliv  $\psi(x) \in \text{Dom}(H_\alpha)$  pak také  $\bar{\psi}(d-x) \in \text{Dom}(H_\alpha)$ , stačí ověřit hraniční podmínky:

$$(\bar{\psi})'(d-x) + i\alpha\bar{\psi}(d-x) = -\bar{\psi}'(d-x) + i\alpha\bar{\psi}(d-x) = -\overline{(\psi'(d-x) + i\alpha\psi(d-x))}.$$

Vlastní čísla operátoru  $\mathcal{PT}$  příslušející  $(\psi_n^\alpha)_{n=0}^\infty$  bychom našli pouhým dosazením.  $\square$

## 3.2 Speciální normalizace

Vzhledem ke skutečnosti, že podobnost operátorů není závislá na volbě normalizace jejich vlastních vektorů, zaměříme se nyní na různé volby normalizačních posloupností vlastních funkcí  $H_\alpha$ , resp.  $H_\alpha^*$ . Následně zvolíme takové normalizace, které nám umožní počínat si v dalších úvahách velmi elegantně. Nejprve uvažme jednoduché spektrum  $H_\alpha$ . V tomto případě, libovolné číselné posloupnosti  $(A_n)_{n=0}^\infty, (B_n)_{n=0}^\infty$  splňující

$$\overline{A_0 B_0} = \frac{\alpha e^{i\alpha d}}{\sin(\alpha d)}, \quad \overline{A_n B_n} = \frac{k_n^2}{k_n^2 - \alpha^2}, \quad (3.14)$$

pro všechna  $n \in \mathbb{N}$ , zajišťují bi-ortonormální relaci posloupností  $(\psi_n^\alpha)_{n=0}^\infty, (\phi_n^\alpha)_{n=0}^\infty$ . Speciálně, volba

$$B_n = 1, \quad A_n = \frac{k_n^2}{k_n^2 - \alpha^2}, \quad (3.15)$$

pro všechna  $n \in \mathbb{N}$ , se ukáže jako velmi výhodná v další části, kde budou zkoumány bazické vlastnosti vlastních funkcí  $H_\alpha^*$ .  $A_0$  a  $B_0$  nechť jsou libovolná nenulová čísla.

V případě, že  $\alpha = k_m$ , pro nějaké  $m \in \mathbb{N}$ , vzhledem k povaze degenerace  $\lambda_m$  není možné zajistit bi-ortonormální normalizaci pro posloupnosti  $(\psi_n^\alpha)_{n=0}^\infty, (\phi_n^\alpha)_{n=0}^\infty$  jako celky. Avšak vyjma případů  $n = m \wedge k = m$  a  $n = 0 \wedge k = m$  nebo naopak, je možné bi-ortonormální relaci

$$(\psi_n^\alpha, \phi_k^\alpha) = \delta_{nk}$$

zajistit volbou

$$B_n = 1, \quad A_n = \frac{k_n^2}{k_n^2 - k_m^2}. \quad (3.16)$$

Hodnoty  $B_0, A_0$  a  $A_m$  pak jistě lze zvolit tak, aby vyhovovali podmínkám

$$(\psi_0^\alpha, \phi_0^\alpha) = 1, \quad (\psi_m^\alpha, \phi_0^\alpha) = 1, \quad (\psi_0^\alpha, \phi_m^\alpha) = 1. \quad (3.17)$$

(Všechny ostatní kombinace dávají nulu.) Proto tak učiníme a v závislosti na hodnotě parametru  $\alpha \in \mathbb{R}$  budeme uvažovat tyto normalizace.

### 3.3 Bazické vlastnosti vlastních funkcí

Tato podkapitola je věnována studiu bazických vlastností posloupnosti  $(\phi_n^\alpha)_{n=0}^\infty$ , které jsou zcela esenciální, co se týče kvazi-hermitovskosti.

#### Věta 3.3.1

*Nechť  $\alpha \neq k_n$ , pro všechna  $n \in \mathbb{Z}$ , potom  $(\phi_n^\alpha)_{n=0}^\infty$ , vlastní funkce  $H_\alpha^*$ , splňující normalizační podmínky (3.15), (3.16), tvoří Barinu bázi prostoru  $\mathcal{H}$ .*

*Pokud  $\alpha = k_m$ , pro nějaké  $m \in \mathbb{N}$ ,  $(\phi_n^\alpha)_{n=0}^\infty$  stále tvoří Barinu bázi, avšak*

*$\phi_0^\alpha := B_0 \frac{1}{2k_m} \left( -\frac{1}{2k_m} e^{-ik_m x} - i x e^{ik_m x} \right)$  je zobecněná vlastní funkce příslušná vlastní hodnotě  $\lambda_m$ .*

#### Poznámka 3.3.1

*Věta 3.3.1 lze alternativně vyslovit ve velmi elegantním znění jako výrok:*

*Pro všechna  $\alpha \in \mathbb{R}$  lze vlastní vektory  $H_\alpha$  a zobecněné vlastní vektory  $H_\alpha$  normalizovat tak, že společně tvoří Barinu bázi.*

*Důkaz.* V závislosti na  $\alpha \in \mathbb{R}$  pro ortonormální bázi  $(\psi_n^N)_{n=0}^\infty$  ověříme definici 2.2.7.

$$r^2 := \sum_{n=0}^{\infty} \|\phi_n^\alpha - \psi_n^N\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \left\| \frac{\alpha}{k_n} \psi_n^D \right\|^2 + \|\phi_0^\alpha - \psi_0^N\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^2}{k_n^2} + \|\phi_0^\alpha - \psi_0^N\|^2 < \infty$$

pro všechna  $\alpha \in \mathbb{R}$ .

Bud'  $(\beta_n)_{n=0}^\infty \subset \mathbb{C}$  libovolná komplexní posloupnost, taková že  $0 = \sum_{n=0}^\infty \beta_n \phi_n^\alpha$ .

- Pro jednoduché spektrum se snadno přesvědčíme, že

$$0 = \lim_{m \rightarrow \infty} (\psi_k^\alpha, \sum_{n=0}^m \beta_n \phi_n^\alpha) = \beta_k$$

pro všechna  $k \in \mathbb{N}_0$ .

- V případě degenerace  $m$ -té vlastní hodnoty  $\lambda_m$

$$0 = \lim_{l \rightarrow \infty} (\psi_k^\alpha, \sum_{n=0}^l \beta_n \phi_n^\alpha) = \beta_k, \quad \forall k \in \mathbb{N}, 0 \neq n \neq m,$$

$$0 = \lim_{l \rightarrow \infty} (\psi_m^\alpha, \sum_{n=0}^l \beta_n \phi_n^\alpha) = \beta_0,$$

$$0 = \lim_{l \rightarrow \infty} (\psi_0^\alpha, \sum_{n=0}^l \beta_n \phi_n^\alpha) = \beta_m + \beta_0 = \beta_m.$$

□

### Důsledek 3.3.1

Operátor  $\Theta_\alpha$ , definovaný na prostoru  $\mathcal{H}$  jako

$$\Theta_\alpha := \sum_{n=0}^\infty \phi_n^\alpha (\phi_n^\alpha, \cdot) \quad (3.18)$$

je pro všechna  $\alpha \in \mathbb{R}$  pozitivní, omezený a s omezenou inverzí.

V případě, že navíc  $\alpha \neq k_n$ , pro všechna  $n \in \mathbb{N}$ , tvoří  $\Theta_\alpha$  metriku pro operátor  $H_\alpha$ .

*Důkaz.* Podle předchozí věty (3.3.1) tvoří posloupnost  $(\phi_n^\alpha)_{n=0}^\infty$  nezávisle na  $\alpha$  Barinu, a tedy i Rieszovu, bázi prostoru  $\mathcal{H}$ . Jsou tedy splněny předpoklady lemmatu 2.2.1 z něhož již dokazované tvrzení plyne.

Pokud má navíc  $H_\alpha$  jednoduché spektrum je posloupnost  $(\phi_n^\alpha)_{n=0}^\infty$  tvořena vlastními vektory  $H_\alpha^*$  a operátor  $H_\alpha$  je tedy podle věty 2.3.1 kvazi-hermitovský. □



### Věta 3.3.2

Operátor  $\Theta_\alpha$  splňující (3.18) lze vyjádřit v uzavřeném tvaru jako

$$\Theta_\alpha = \mathbb{I} + K_\alpha \quad (3.19)$$

Kde  $K_\alpha$  je integrální Hilbert-Schmidtův operátor na  $\mathcal{H}$  s integrálním jádrem  $\mathcal{K}_\alpha$  daným jako

$$\mathcal{K}_\alpha(x, y) = \phi_0^\alpha(x)\overline{\phi_0^\alpha(y)} - \frac{1}{d} + \alpha^2 \mathcal{G}(x, y) - i\alpha \left( \frac{y-x}{d} + \text{sgn}(y-x) \right). \quad (3.20)$$

Kde  $\mathcal{G}(x, y)$  je Greenova funkce dirichletovského laplaciánu na prostoru  $\mathcal{H}$ .

### Poznámka 3.3.2

Příslušná Greenova funkce  $\mathcal{G}(x, y)$  je dána jako

$$\mathcal{G}(x, y) = \frac{x(d-y)}{d}, \quad \text{pro } 0 < x < y < d,$$

pro případ kdy  $y < x$  stačí jejich roli v předpisu zaměnit, neboť  $\mathcal{G}(x, y)$  je ve svých proměnných symetrická.

*Důkaz.* Norma integrálního jádra  $\mathcal{K}_\alpha(x, y)$  v prostoru  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$  je jistě konečná, a proto integrální operátor s tímto jádrem je Hilbert-Schmidtův. Stačí tedy dokázat rovnost (3.19).

Z definice operátoru  $\Theta_\alpha$  máme pro libovolná  $\phi, \psi \in \mathcal{H}$

$$\begin{aligned} (\phi, \Theta_\alpha \psi) &= \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi, \sum_{n=1}^m (\psi_n^N + i \frac{\alpha}{k_n} \psi_n^D) (\psi_n^N + i \frac{\alpha}{k_n} \psi_n^D, \psi) + \phi_0^\alpha (\psi_0^\alpha, \psi)) \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi, \phi_0^\alpha (\phi_0^\alpha, \psi) - \psi_0^N (\psi_0^N, \psi) + \sum_{n=0}^m \psi_n^N (\psi_n^N, \psi) + \alpha^2 \sum_{n=1}^m \psi_n^D (\psi_n^D, \psi) \\ &\quad + i\alpha [\sum_{n=0}^m \frac{\psi_n^D}{k_n} (\psi_n^N, \psi) - \sum_{n=0}^m \frac{\psi_n^N}{k_n} (\psi_n^D, \psi)]) \\ &= (\phi, \phi_0^\alpha (\phi_0^\alpha, \psi) - \psi_0^N (\psi_0^N, \psi) + \psi + \alpha^2 (-\Delta_D)^{-1} \psi + \alpha [p(-\Delta_D)^{-1} - (-\Delta_D)^{-1} p^*] \psi). \end{aligned}$$

Pro všechna  $\psi \in \mathcal{H}$  tedy platí

$$\Theta = \phi_0^\alpha (\phi_0^\alpha, \cdot) - \psi_0^N (\psi_0^N, \cdot) + \psi + \alpha^2 (-\Delta_D)^{-1} \psi + \alpha [p(-\Delta_D)^{-1} - (-\Delta_D)^{-1} p^*] \psi$$

Hledaný operátor  $K_\alpha$  je potom

$$K_\alpha = \phi_0^\alpha (\phi_0^\alpha, \cdot) - \psi_0^N (\psi_0^N, \cdot) + \alpha^2 (-\Delta_D)^{-1} + \alpha [p(-\Delta_D)^{-1} - (-\Delta_D)^{-1} p^*].$$

Je zřejmé, že  $K_\alpha$  je integrální operátor. Zbývá však ještě ukázat tvar posledního členu.

$$\begin{aligned} \tilde{K}_\alpha &:= \alpha [p(-\Delta_D)^{-1} - (-\Delta_D)^{-1} p^*] \psi = -i\alpha \left[ \frac{d}{dx} \int_0^d \mathcal{G}(x, y) \psi(y) dy - \int_0^d \mathcal{G}(x, y) \psi'(y) dy \right] \\ &= -i\alpha \left[ \int_0^d \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{G}(x, y) \psi(y) dy - \int_0^d \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{G}(x, y) \psi(y) dy \right] = -i\alpha \int_0^d \left[ \frac{x-y}{d} + \text{sgn}(y-x) \right] \psi(y) dy \end{aligned}$$

□

**Poznámka 3.3.3**

Připomínáme, že funkce  $\phi_0^\alpha$  nezávisí na  $\alpha$  spojitě. V případě degenerovaného spektra  $H_\alpha$  reprezentuje  $\phi_0^\alpha$  zobecněnou vlastní funkci, ve které vystupují dodatečné členy, viz (3.11). Lze tedy předpokládat, že ani podobné operátory nebudou v těchto kritických bodech záviset na  $\alpha$  spojitě.

**Lemma 3.3.1**

Pro všechna  $\psi \in W^{2,2}(0, d) : \psi = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^N(\psi_n^N, \psi)$  platí

$$\|\psi'\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} k_n^2 |(\psi_n^N, \psi)|^2, \quad \|\psi''\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} k_n^4 |(\psi_n^N, \psi)|^2. \quad (3.21)$$

Kde derivace  $\psi', \psi''$  jsou chápány ve slabém smyslu.

*Důkaz.* Nejprve se podívejme jak vypadá slabá derivace  $\psi'$ , resp.  $\psi''$  v řeči rozkladu  $\psi$  v bázi  $(\psi_n^N)_{n=0}^\infty$ . Pro všechna  $\phi \in C_0^\infty(0, d)$  platí

$$(\phi, \psi') = - \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi', \sum_{n=0}^m \psi_n^N(\psi_n^N, \psi)) = (\phi, \sum_{n=0}^{\infty} (\psi_n^N)'(\psi_n^N, \psi)).$$

Analogicky bychom postupovali i pro  $\psi''$ , celkově tedy máme

$$\psi' = \sum_{n=0}^{\infty} (\psi_n^N)'(\psi_n^N, \psi) \quad \psi'' = \sum_{n=0}^{\infty} (\psi_n^N)''(\psi_n^N, \psi).$$

Konečně, tvrzení lemmatu získáme přímočaře jako

$$\begin{aligned} \|\psi'\|^2 &= \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^m \sum_{i=0}^l \overline{(\psi_n^N, \psi)} (\psi_i^N, \psi) ((\psi_n^N)', (\psi_i^N)') \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^m \sum_{i=1}^l \overline{(\psi_n^N, \psi)} (\psi_i^N, \psi) (-k_n \psi_n^D, -k_i \psi_i^D) = \sum_{n=1}^{\infty} k_n^2 |(\psi_n^N, \psi)|^2. \end{aligned}$$

V případě druhé derivace bychom opět postupovali analogicky. □

### Věta 3.3.3

Definujme  $\Omega := \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^N(\phi_n^\alpha, \cdot)$ , potom  $\Omega^*$ ,  $\Omega^{-1}$  jsou omezené operátory v Sobolevově prostoru  $W^{2,2}(0, d)$  s následujícími mapovacími vlastnostmi:

$$\Omega^{-1} : \text{Dom}(-\Delta_N) \longrightarrow \text{Dom}(H_\alpha), \quad \Omega^* : \text{Dom}(-\Delta_N) \longrightarrow \text{Dom}(H_\alpha^*). \quad (3.22)$$

Dále, vzhledem k parametru  $\alpha$  jsou operátory  $\Omega^*$ ,  $\Omega^{-1}$  realizovány jako

$$\Omega^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^\alpha(\psi_n^N, \cdot), \quad \Omega^* = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n^\alpha(\psi_n^N, \cdot), \quad (3.23)$$

pokud je spektrum jednoduché a jako

$$\Omega^{-1} = \sum_{n=2}^{\infty} \psi_{\sigma(n)}^\alpha(\psi_{\sigma(n)}^N, \cdot) + \psi_m^\alpha(\psi_0^N, \cdot) + \psi_0^\alpha(\psi_m^N, \cdot) - \psi_m^\alpha(\psi_m^N, \cdot), \quad \Omega^* = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n^\alpha(\psi_n^N, \cdot), \quad (3.24)$$

pokud  $\alpha = k_m$ , pro nějaké  $m \in \mathbb{N}$ .

$\sigma : \mathbb{N}_0 \longrightarrow \mathbb{N}_0$  je bijekce definovaná jako transpozice prvního a  $m$ -tého prvku.

*Důkaz.* Platnost výrazů (3.23), (3.24) je zřejmá, je jednoduché je ověřit využitím skalárního součinu na  $\mathcal{H}$ .

Co se týče mapovacích vlastností, stačí ukázat omezenost zmíněných operátorů na prostoru  $W^{2,2}(0, d)$  a ověřit hraniční podmínky jejich příslušných obrazů. Provedeme důkaz pro  $\Omega^{-1}$  v případě jednoduchého spektra. Platnost věty v ostatních případech bude pak již zřejmá. Pro účel tohoto důkazu bude norma v prostoru  $W^{2,2}(0, d)$  označena jako  $\|\cdot\|_{2,2}$ .

Uvažujme tedy operátor  $\Omega^{-1}$  pro jednoduché spektrum. Nejprve se podívejme, že operátor  $\Omega^{-1}$  (a tedy analogicky i  $\Omega^*$ ) lze vyjádřit jako  $\Omega^{-1} = A + \lambda B$ , kde  $B$  je Hilbert-Schmidtův operátor na  $W^{2,2}(0, d)$ .

$$\begin{aligned} \Omega^{-1} &= \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^\alpha(\psi_n^N, \cdot) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(\psi_n^N - i\frac{\alpha}{k_n}\psi_n^D)(\psi_n^N, \cdot) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} A_n\psi_n^N(\psi_n^N, \cdot) - A_0[\psi_0^\alpha - \psi_0^N](\psi_0^N, \cdot) - i\alpha \sum_{n=1}^{\infty} A_n\frac{\psi_n^D}{k_n}(\psi_n^N, \cdot) \\ &=: A - A_0[\psi_0^\alpha - \psi_0^N](\psi_0^N, \cdot) - i\alpha\tilde{B}. \end{aligned}$$

- Pro operátor  $A$  máme

$$\begin{aligned} \|A\psi\|_{2,2}^2 &= \left\| \sum_{n=0}^{\infty} A_n\psi_n^N(\psi_n^N, \psi) \right\|^2 + \left\| \sum_{n=1}^{\infty} A_n k_n \psi_n^D(\psi_n^N, \psi) \right\|^2 + \left\| \sum_{n=0}^{\infty} A_n k_n^2 \psi_n^N(\psi_n^N, \psi) \right\|^2 \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} |A_n|^2 |(\psi_n^N, \psi)|^2 + \sum_{n=1}^{\infty} |A_n|^2 k_n^2 |(\psi_n^N, \psi)|^2 + \sum_{n=0}^{\infty} |A_n|^2 k_n^4 |(\psi_n^N, \psi)|^2. \end{aligned}$$

V závislosti na  $\alpha$  vždy existuje  $n_0 \in \mathbb{N}$ , tak že platí

$$A_n = \frac{k_n^2}{k_n^2 - \alpha^2} \leq \frac{k_{n_0}^2}{k_{n_0}^2 - \alpha^2} = A_{n_0}, \quad \text{pro všechna } n \in \mathbb{N}.$$

S využitím této skutečnosti a lemmatu 3.3.1 pro libovolné  $\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^N(\psi_n^N, \psi) \in W^{2,2}(0, d)$  získáme následující horní odhad.

$$\begin{aligned} \|A\psi\|_{2,2}^2 &\leq C^2 \left( \sum_{n=0}^{\infty} |(\psi_n^N, \psi)|^2 + \sum_{n=0}^{\infty} k_n^2 |(\psi_n^N, \psi)|^2 + \sum_{n=0}^{\infty} k_n^4 |(\psi_n^N, \psi)|^2 \right) \\ &= C^2 (\|\psi\|^2 + \|\psi'\|^2 + \|\psi''\|^2) = C^2 \|\psi\|_{2,2}^2, \end{aligned}$$

kde  $C := \max\{A_{n_0}, |A_0|\}$ .

• Pro výpočet Hilbert-Schmidtovy normy  $\|\tilde{B}\|_{HS}$  v prostoru  $W^{2,2}(0, d)$ , zvolíme ortonormální bázi  $(e_n)_{n=0}^{\infty}$  prostoru  $W^{2,2}(0, d)$ , definovanou jako  $e_n := \frac{\psi_n^N}{\sqrt{1+k_n^2+k_n^4}}$ , pro všechna  $n \in \mathbb{N}_0$ .

$$\|\tilde{B}\|_{HS}^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \|\tilde{B}e_n\|_{2,2}^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k_n^2 C^2}{1+k_n^2+k_n^4} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C^2}{1+k_n^2+k_n^4} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{k_n^2} \frac{C^2}{1+k_n^2+k_n^4} < \infty.$$

• Skutečnost, že integrální operátor  $A_0[\psi_0^\alpha - \psi_0^N](\psi_0^N, \cdot)$  je také Hilbert-Schmidtův v  $W^{2,2}(0, d)$  je zřejmé, neboť jeho jádro je třídy  $C^\infty$ .

• K ověření mapovacích vlastností stačí nyní ověřit hraniční podmínky. Skutečně, pro  $\psi \in \text{Dom}(-\Delta_N)$  platí

$$\phi := \Omega^{-1}\psi \in \text{Dom}(H_\alpha) \Leftrightarrow \left( \phi \in W^{2,2}(0, d) \wedge \phi'(0) + i\alpha\phi(0) = 0 = \phi'(d) + i\alpha\phi(d) \right),$$

$$(\Omega^{-1}\psi)' + i\alpha(\Omega^{-1}\psi)|_{x=0,d} = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^m ((\psi_n^\alpha)' + i\alpha\psi_n^\alpha)|_{x=0,d} (\psi_n^N, \psi) = 0.$$

V případě  $\Omega^*$  bychom postupovali analogicky.

Pro zobecněný tvar  $\Omega^{-1}$  bychom na nekonečnou sumu aplikovali stejný postup jako jsme to udělali v případě jednoduchého spektra. Pro zbylou konečnou lineární kombinaci integrálních operátorů je tvrzení triviální, neboť jejich jádra jsou třídy  $C^\infty$  a jsou tedy Hilbert-Schmidtovy ve  $W^{2,2}(0, d)$  a splňují hraniční podmínky.  $\square$

#### Poznámka 3.3.4

Z tvaru operátorů  $\Omega, \Omega^*$  je zřejmé, že splňují  $\Theta_\alpha = \Omega^*\Omega$ , pro  $\Theta_\alpha$  definované jako (3.18).

# Kapitola 4

## Podobnostní transformace

Konečně samotná podobnostní transformace na (ne)samosdružený operátor  $h_\alpha$ . Vzhledem k důsledku 3.3.1 nyní rozdělíme případ jednoduchého a degenerovaného spektra v závislosti na  $\alpha$ . V obou případech provedeme podobnostní transformaci generovanou neumannovskou ortonormální bází, neboť jak uvidíme, tato volba vede na uzavřený explicitní tvar podobného operátoru  $h_\alpha$ , a následně podobnostní transformaci generovanou dirichletovskou bází pomocí unitární transformace (viz 4.2).

### 4.1 Jednoduché spektrum

Nechť  $\alpha \neq k_n$ , pro všechna  $n \in \mathbb{Z}$ . Díky větě 3.3.3 pro všechna  $\phi, \psi \in \text{Dom}(-\Delta_N)$  mají následující úpravy dobrý smysl a platí

$$\begin{aligned}(\phi, h_\alpha^N \psi) &= (\phi, \Omega H_\alpha \Omega^{-1} \psi) \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} (H_\alpha^* \Omega^* \phi, \sum_{n=0}^m \psi_n^\alpha (\psi_n^N, \psi)) = \lim_{m \rightarrow \infty} (\Omega^* \phi, \sum_{n=0}^m k_n^2 \psi_n^\alpha (\psi_n^N, \psi)) \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{l \rightarrow \infty} (\sum_{k=0}^l \phi_k^\alpha (\psi_k^N, \phi), \sum_{n=0}^m k_n^2 \psi_n^\alpha (\psi_n^N, \psi)) = \lim_{m \rightarrow \infty} (\phi, \sum_{n=0}^m k_n^2 \psi_n^N (\psi_n^N, \psi)) \\ &= (\phi, \sum_{n=0}^{\infty} k_n^2 \psi_n^N (\psi_n^N, \psi)) = (\phi, (-\Delta_N) \psi + \alpha^2 \psi_0^N (\psi_0^N, \psi)).\end{aligned}$$

Poslední krok plyne z důsledku spektrálního teorému 2.1.1. Protože neumannovský laplacián je hustě definovaný v  $\mathcal{H}$ , dostáváme

$$(\phi, h_\alpha^N \psi) = (\phi, (-\Delta_N) \psi + \alpha^2 \psi_0^N (\psi_0^N, \psi)),$$

pro všechna  $\phi \in \mathcal{H}$ . Tudíž pro všechna  $\psi \in \text{Dom}(-\Delta_N)$  máme následující rovnost:

$$h_\alpha^N \psi = (-\Delta_N) \psi + \alpha^2 \psi_0^N (\psi_0^N, \psi). \quad (4.1)$$

Je zřejmé, že  $\text{Dom}(-\Delta_N)$  je největší množina (ve smyslu inkluze), kde  $h_\alpha^N$  může být definován. Jinými slovy  $\text{Dom}(h_\alpha^N) = \text{Dom}(-\Delta_N)$ .

K výpočtu podobnostní transformace generované dirichletovskou bází zavádíme unitární operátor  $U$  definovaný jako

$$U := \sum_{n=0}^{\infty} \psi_{n+1}^D(\psi_n^N, \cdot). \quad (4.2)$$

Jinými slovy  $U : \psi_n^N \mapsto \psi_{n+1}^D$ . Je jasné, že  $U$  je unitární operátor na  $\mathcal{H}$ , protože zobrazuje jednu ortonormální bází na druhou. Tím pádem pro něj platí  $\Omega_D = U\Omega_N$ , kde

$$\Omega_D := \sum_{n=0}^{\infty} \psi_{n+1}^\infty(\phi_n^\alpha, \cdot). \quad (4.3)$$

Ze stejného důvodu také platí  $U : \text{Dom}(-\Delta_N) \longrightarrow \text{Dom}(-\Delta_D)$  a tedy  $\Omega_D : \text{Dom}(H_\alpha) \longrightarrow \text{Dom}(-\Delta_D)$ . Samosdružený operátor  $h_\alpha^D$  je potom dán následovně:

$$\begin{aligned} h_\alpha^D &= \Omega_D H_\alpha (\Omega_D)^{-1} = U \Omega_N H_\alpha (\Omega_N)^{-1} U^{-1} \\ &= U(-\Delta_N)U^{-1} + \alpha^2 U \psi_0^N(\psi_0^N, U^{-1} \cdot) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} k_n^2 \psi_{n+1}^D(\psi_{n+1}^D, \cdot) + \alpha^2 \psi_1^D(\psi_1^D, \cdot), \end{aligned}$$

kde pro sumu v poslední rovnosti platí

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} k_n^2 \psi_{n+1}^D(\psi_{n+1}^D, \cdot) &= \sum_{n=1}^{\infty} k_{n-1}^2 \psi_n^D(\psi_n^D, \cdot) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} k_n^2 \psi_n^D(\psi_n^D, \cdot) - 2k_1 \sum_{n=1}^{\infty} k_n \psi_n^D(\psi_n^D, \cdot) + k_1^2 \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n^D(\psi_n^D, \cdot) \\ &= (-\Delta_D) - 2k_1 (-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} + k_1^2 \mathbb{I} = [(-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} - k_1 \mathbb{I}]^2. \end{aligned}$$

V posledním řádku jsme opět využili pro nekonečné sumy důsledek 2.1.1. Celkově tedy získáváme  $h_\alpha^D$  v uzavřeném tvaru:

$$h_\alpha^D = [(-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} - k_1 \mathbb{I}]^2 + \alpha^2 \psi_1^D(\psi_1^D, \cdot). \quad (4.4)$$

S odkazem na [13, Chap. V, (3.45)], lze odmocninu dirichletovského laplaciánu získat jako

$$(-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} \psi = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \lambda^{-\frac{1}{2}} (-\Delta_D + \lambda)^{-1} (-\Delta_D) \psi \, d\lambda. \quad (4.5)$$

Výraz (4.5) lze dále zjednodušit pomocí spektrální teorému, resp. jeho důsledku 2.1.1, do následujícího tvaru:

$$(-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} \psi = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty [\lambda^{-\frac{1}{2}} - \lambda^{\frac{1}{2}} (-\Delta_D + \lambda)^{-1}] \psi \, d\lambda. \quad (4.6)$$

V literatuře se lze setkat z různými způsoby jak vyjádřit operátor  $(-\Delta_D)^{\frac{1}{2}}$  ve formě integrálního operátoru, pro určitost odkazujeme na článek [8]. Bylo však ukázáno [30], že takový operátor "není stejný" jako ten získaný pomocí spektrálního teorému výše, ve smyslu odlišných spektrálních vlastností.

Zbývá zodpovědět otázku, jak vypadá definiční obor  $\text{Dom}(h_\alpha^D)$ . Ze tvaru

$$h_\alpha^D = (-\Delta_D) - 2k_1 (-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} + k_1^2 \mathbb{I} + \alpha^2 \psi_1^D (\psi_1^D, \cdot)$$

však vidíme, že  $\text{Dom}(h_\alpha^D) = \text{Dom}(-\Delta_D) \cap \text{Dom}(-\Delta_D)^{\frac{1}{2}}$ , kde

$$\text{Dom}(-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} = \{\psi \in \mathcal{H} \mid (-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} \psi \in \mathcal{H}\}.$$

Ze spektrálního teorému pak máme

$$(-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} \psi = \sum_{n=1}^{\infty} k_n \psi_n^D (\psi_n^D, \psi)$$

a tedy

$$\|(-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} \psi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} k_n^2 |(\psi_n^D, \psi)|^2 = \|\psi'\|^2 < \infty \Leftrightarrow \psi \in W^{1,2}(0, d).$$

Celkově tedy máme  $\text{Dom}(h_\alpha^D) = \text{Dom}(-\Delta_D)$ .

## 4.2 Degenerované spektrum

Nechť  $\alpha = k_m$ , pro nějaké  $m \in \mathbb{N}$ . V případě degenerovaného spektra budeme postupovat formálně stejně, jen je třeba uvažovat zobecněný tvar  $\Omega^{-1}$  v souladu s (3.24). Avšak opět podle věty 3.3.3 díky příslušným mapovacím vlastnostem dostáváme pro všechna  $\phi, \psi \in \text{Dom}(-\Delta_N)$ :

$$\begin{aligned} (\phi, h_m^N \psi) &= (\phi, \Omega H_m \Omega^{-1} \psi) \\ &= \lim_{l \rightarrow \infty} (H_m^* \Omega^* \phi, \sum_{n=2}^l \psi_{\sigma(n)}^\alpha (\psi_{\sigma(n)}^N, \psi) + \psi_m^\alpha (\psi_0^N, \psi) + \psi_0^\alpha (\psi_m^N, \psi) - \psi_m^\alpha (\psi_m^N, \psi)) \\ &= \lim_{l \rightarrow \infty} (\Omega^* \phi, \sum_{n=2}^l k_{\sigma(n)}^2 \psi_{\sigma(n)}^\alpha (\psi_{\sigma(n)}^N, \psi) + k_m^2 \psi_m^\alpha (\psi_0^N, \psi) \\ &\quad + k_m^2 \psi_0^\alpha (\psi_m^N, \psi) + k_m^2 \psi_m^\alpha (\psi_m^N, \psi) - k_m^2 \psi_m^\alpha (\psi_m^N, \psi)) \\ &= \lim_{l \rightarrow \infty} (\phi, \sum_{n=2}^l k_{\sigma(n)}^2 \psi_{\sigma(n)}^N (\psi_{\sigma(n)}^N, \psi) + k_m^2 \psi_m^N (\psi_m^N, \psi) \\ &\quad + k_m^2 \psi_0^N (\psi_0^N, \psi) + k_m^2 \psi_0^N (\psi_m^N, \psi)) \\ &= \lim_{l \rightarrow \infty} (\phi, \sum_{n=0}^l k_n^2 \psi_n^N (\psi_n^N, \psi) + k_m^2 \psi_0^N [(\psi_0^N, \psi) + (\psi_m^N, \psi)]) \\ &= (\phi, (-\Delta_N) \psi + k_m^2 \psi_0^N [(\psi_0^N, \psi) + (\psi_m^N, \psi)]). \end{aligned}$$

Stejně jako jsme argumentovali v případě jednoduchého spektra, z hustoty množiny  $\text{Dom}(-\Delta_N)$  v  $\mathcal{H}$ , máme pro každé  $\psi \in \text{Dom}(-\Delta_N)$  následující vztah pro operátor  $h_m^N$  z důsledku 2.1.1:

$$h_m^N \psi = (-\Delta_N) \psi + k_m^2 \psi_0^N \left[ (\psi_0^N, \psi) + (\psi_m^N, \psi) \right] \quad (4.7)$$

s definičním oborem  $\text{Dom}(h_m^N) = \text{Dom}(-\Delta_N)$ .

Pro dirichletovskou bázi dostaneme pomocí unitárního operátoru  $U$ , definovaného v (4.2), podobný operátor  $h_m^D$  ve tvaru

$$h_m^D = U h_m^N U^{-1} = U(-\Delta_N)U^{-1} + U k_m^2 \psi_0^N \left[ (\psi_0^N, U^{-1} \cdot) + (\psi_m^N, U^{-1} \cdot) \right] \quad (4.8)$$

$$= \left[ (-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} - k_1 \right]^2 + k_m^2 \psi_1^D \left[ (\psi_1^D, \cdot) + (\psi_m^D, \cdot) \right] \quad (4.9)$$

s definičním oborem  $\text{Dom}(h_m^D) = \text{Dom}(-\Delta_D)$ .

Povšimněme si jak explicitně je informace o spektru a příslušných vlastních funkcích obsažena ve formuli pro  $h_m^N$ , resp.  $h_m^D$ , zobecněná vlastní funkce je reprezentována funkcí  $\psi_m^N$ , resp.  $\psi_m^D$ .



# Závěr

V této bakalářské práci jsme uvedli teorii bází v Hilbertových prostorech a matematické aspekty kvazi-hermitovských operátorů. Dále jsme definovali jednorozměrný  $\mathcal{PT}$ -symetrický operátor  $H_\alpha$  na Hilbertově prostoru  $\mathcal{H} := L^2(0, d)$ :

$$H_\alpha \psi := -\psi'', \quad (4.10)$$

$$\text{Dom}(H_\alpha) := \{\psi \in W^{2,2}(0, d) \mid \psi'(0) + i\alpha\psi(0) = 0 = \psi'(d) + i\alpha\psi(d)\}. \quad (4.11)$$

Tento model jsme studovali z hlediska existence podobnostních transformací na samosdružený operátor v prostoru  $\mathcal{H}$ . Podařilo se nám zobecnit výsledky D. Krejčířika, P. Siegla a J. Železného [21] ve dvou bodech. Pro nedegenerované spektrum operátoru  $H_\alpha$  jsme našli alternativní podobnostní transformaci na samosdružený operátor  $h_\alpha^D$  příslušející ortonormální bázi tvořenou vlastními funkcemi dirichletovského laplaciánu  $-\Delta_D$  v  $\mathcal{H}$ :

$$h_\alpha^D = [(-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} - k_1 \mathbb{I}]^2 + \alpha^2 \psi_1^D(\psi_1^D, \cdot), \quad \text{kde} \quad \psi_1^D(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{\pi x}{d}\right).$$

Oproti  $h_\alpha$ , podobnému operátoru odpovídajícímu ortonormální bázi tvořené vlastními funkcemi neumannovského laplaciánu  $-\Delta_N$ :

$$h_\alpha := -\Delta_N + \alpha^2 \psi_0^N(\psi_0^N, \cdot), \quad \text{kde} \quad \psi_0^N(x) := \sqrt{\frac{1}{d}},$$

je operátor  $h_\alpha^D$  realizován pomocí nelokálního operátoru (odmocniny dirichletovského laplaciánu). Na druhou stranu, analogicky jako v případě  $h_\alpha$ , obsahuje operátor  $h_\alpha^D$  projektor na jednorozměrný podprostor  $\mathcal{H}$ .

Pro degenerované spektrum operátoru  $H_\alpha$ , tj. pro hodnoty  $\alpha = \frac{m\pi}{d}$ ,  $m \in \mathbb{Z}$  se nám podařilo najít zobecněnou podobnostní transformaci doplněním vlastních funkcí o zobecněnou vlastní funkci příslušnou degenerované vlastní hodnotě. Příslušné podobné operátory odpovídající neumannovské, resp. dirichletovské bázi jsou dány jako

$$h_m^N = -\Delta_N + k_m^2 \psi_0^N [(\psi_0^N, \cdot) + (\psi_m^N, \cdot)], \quad \text{kde} \quad \psi_m^N(x) := \sqrt{\frac{2}{d}} \cos\left(\frac{m\pi}{d} x\right),$$

resp.

$$h_m^D = [(-\Delta_D)^{\frac{1}{2}} - k_1]^2 + k_m^2 \psi_1^D [(\psi_1^D, \cdot) + (\psi_{|m|}^D, \cdot)], \quad \text{kde} \quad \psi_m^D(x) := \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{m\pi}{d} x\right).$$

Porovnáním těchto operátorů s podobnými operátory odpovídající jednoduchému spektru vidíme, že mezi nimi neexistuje žádná spojitá závislost v  $\alpha$ . V kritických bodech  $\alpha = \frac{m\pi}{d}$ ,  $m \in \mathbb{Z}$  však dochází k závažným změnám bazických vlastností vlastních funkcí.

# Literatura

- [1] Ph. Ambichl, K. G. Makris, L. Ge, Y. Chong, D. Stone, and S. Rotter, *Breaking of  $\mathcal{PT}$ -symmetry in bounded and unbounded scattering systems*, Phys. Rev. X **3** (2013), 041030.
- [2] F. Bagarello, J.-P. Gazeau, F. H. Szafraniec, and M. Znojil (eds.), *Non-selfadjoint operators in quantum physics: Mathematical aspects*, Wiley-Interscience, 2015, 432 pages.
- [3] A.-S. Bonnet-Ben Dhia, L. Chesnel, and V. Pagneux, *Trapped modes and reflectionless modes as eigenfunctions of the same spectral problem*, Proc. Royal Soc. A - Math. Phys. Eng. Sci. **474** (2018), 20180050.
- [4] D. Borisov and D. Krejčířík,  *$\mathcal{PT}$ -symmetric waveguides*, Integ. Equ. Oper. Theory **62** (2008), 489–515.
- [5] ———, *The effective Hamiltonian for thin layers with non-Hermitian Robin-type boundary conditions*, Asympt. Anal. **76** (2012), 49–59.
- [6] S. Boettcher C. M. Bender, *Real spectra in non-Hermitian Hamiltonians having  $\mathcal{PT}$  symmetry*, Phys. Rev. Lett. **80** (1998), 5443 – 5246.
- [7] O. Christensen, *An introduction to frames and Riesz bases*, Springer, New York, 2003.
- [8] P. Garbaczewski and V. A. Stephanovich, *Fractional Laplacians in bounded domains: Killed, reflected, censored and taboo Lévy flights*, Phys. Rev. E **99** (2019), 042126.
- [9] I. C. Gohberg, M. G. Krein, and A. Feinstein, *Introduction to the theory of nonselfadjoint operators in Hilbert space*, AMS, Providence, 1969.
- [10] D. Dast G. Wunner H. Cartarius, D. Haag, *Nonlinear Schrödinger equation for a  $\mathcal{PT}$ -symmetric delta-functions double well*, J. Phys. A: Math. Theor. **45** (2012), 444008.
- [11] H. Hernandez-Coronado, D. Krejčířík, and P. Siegl, *Perfect transmission scattering as a  $\mathcal{PT}$ -symmetric spectral problem*, Phys. Lett. A **375** (2011), 2149–2152.
- [12] M. Havlíček J. Blank, P. Exner, *Linéární operátory v kvantové fyzice*, Karolinum, Praha, 1993.
- [13] T. Kato, *Perturbation theory for linear operators*, Springer-Verlag, New York, 1976.
- [14] D. Kochan, D. Krejčířík, R. Novák, and P. Siegl, *The Pauli equation with complex boundary conditions*, J. Phys. A: Math. Theor. **45** (2012), 444019.

- [15] D. Krejčířík, *Mathematical aspects of quantum mechanics with non-self-adjoint operators*, 2017, Habilitation Thesis.
- [16] D. Krejčířík, *Calculation of the metric in the Hilbert space of a  $\mathcal{PT}$ -symmetric model via the spectral theorem*, J. Phys. A: Math. Theor. **41** (2008), 244012.
- [17] D. Krejčířík, *Geometrical aspects of spectral theory*, 2021, Dostupné na: <http://nsa.fjfi.cvut.cz/david/other/gspec21.pdf>.
- [18] D. Krejčířík, H. Bíla, and M. Znojil, *Closed formula for the metric in the Hilbert space of a  $\mathcal{PT}$ -symmetric model*, J. Phys. A **39** (2006), 10143–10153.
- [19] D. Krejčířík, V. Lotoreichik, and M. Znojil, *The minimally anisotropic metric operator in quasi-Hermitian quantum mechanics*, Proc. Royal Soc. A - Math. Phys. Eng. Sci. **474** (2018), 20180264.
- [20] D. Krejčířík and P. Siegl,  *$\mathcal{PT}$ -symmetric models in curved manifolds*, J. Phys. A: Math. Theor. **43** (2010), 485204.
- [21] D. Krejčířík, P. Siegl, and Železný, *On the similarity of Sturm-Liouville operators with non-Hermitian boundary conditions to self-adjoint and normal operators*, Complex Anal. Oper. Theory **8** (2014), 255–281.
- [22] D. Krejčířík and M. Tater, *Non-Hermitian spectral effects in a  $\mathcal{PT}$ -symmetric waveguide*, J. Phys. A: Math. Theor. **41** (2008), 244013.
- [23] S. Longhi, *Bloch Oscillations in Complex Crystals with PT Symmetry*, Phys. Rev. Lett. **103** (2009), 123601.
- [24] V. Lotoreichik and P. Siegl, *Spectra of definite type in waveguide models*, Proc. Amer. Math. Soc. **145** (2017), 1231–1246.
- [25] A. Mostafazadeh, *Pseudo-Hermiticity versus PT symmetry: II. A complete characterization of non-Hermitian Hamiltonians with a real spectrum*, J. Math. Phys. **43** (2002).
- [26] ———, *Pseudo-Hermiticity versus PT symmetry: III. Equivalence of pseudo-Hermiticity and the presence of antilinear symmetries*, J. Math. Phys. **43** (2002).
- [27] ———, *Pseudo-Hermiticity versus PT symmetry: The necessary condition for the reality of the spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian*, J. Math. Phys. **43** (2002).
- [28] P. Šťovíček, *Přednášky z funkcionální analýzy v akademickém roce 2019/2020*, CTU FN-SPE, 2019/2020.
- [29] F. G. Scholtz, H. B. Geyer, and F. J. W. Hahne, *Quasi-Hermitian operators in quantum mechanics and the variational principle*, Ann. Phys **213** (1992), 74–101.
- [30] R. Servadei and E. Valdinoci, *On the spectrum of two different fractional operators*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A **144** (2014), 831–855.

[31] L. Skála, *Úvod do kvantové mechaniky*, Karolinum, Praha, 2012.

[32] L. Tartar, *An introduction to sobolev spaces and interpolation spaces*, Springer, Berlin, 2007.