České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra fyziky
Obor: Matematické inženýrství - Matematická fyzika

Kvantové systémy se smíšenou dimenzionalitou

Quantum systems of mixed dimensionality

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Vypracoval:	Jiří Kolář
Vedoucí práce:	Ing. Matěj Tušek, Ph.D
Rok:	2022

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
FAKULTA JADERNÁ A FYZIKÁLNĚ INŽENÝRSKÁ
PRAHA 1 - STARÉ MĚSTO, BŘEHOVÁ 7 - PSČ 115 19

Katedra: fyziky *Akademický rok:* 2021/2022

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student: Jiří Kolář

Studijní program: Aplikace přírodních věd

Obor: Matematické inženýrství, zaměření Matematická fyzika

Název práce: (česky) Kvantové systémy se smíšenou dimenzionalitou

Název práce: (anglicky) Quantum system of mixed dimensionality

Pokyny pro vypracování:

1) Seznámit se s základními poznatky o neomezených lineárních operátorech s důrazem na konstrukci samozdružených rozšíření.
2) Prostudovat články [3][4][5].
3) Zrekonstruovat výsledky obdržené pro takzvanou "kvantovou anténu" v článku [5].
4) Pokusit se zobecnit model kvantové antény.

Doporučená literatura:

[1] Teschl: Mathematical Methods in Quantum Mechanics, American Mathematical Society, 2014

[2] Blank, Exner, Havlicek: Lineamí operátory v kvantové fyzice, Karolinum, 1993

[3] P. Exner: The von Neumann way to treat systems of mixed dimensionality. Rep. Math. Phys. 55, 79 (2005)

[4] P. Exner, J. Lipovský: Resonances on hedgehog manifolds. Acta Polytechnica 53, 416 (2013)

[5] P. Exner, P. Šeba: Resonance statistics in a microwave cavity with a thin antenna. Phys. Lett. A 228, 146 (1997)

Jméno a pracoviště vedoucího bakalářské práce:

Ing. Matěj Tušek, Ph.D.

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze, Katedra matematiky

Datum zadání bakalářské práce: 20.10.2021

Termín odevzdání bakalářské práce: 07.07.2022

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

....

garant oboru

....

vedoucí katedry *děkan*

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
- 1 -

V Praze dne 20.10.2021

Prohlášení

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

V Praze dne ....

Jiří Kolář

Poděkování

Děkuji Ing. Matěji Tuškovi, Ph.D. za ochotu a trpělivost při vedení mé bakalářské práce a za praktické rady, které ji směřovaly správným směrem.

Jiří Kolář

Název práce:
Kvantové systémy se smíšenou dimenzionalitou

Autor: Jiří Kolář

Studijní program: Aplikace přírodních věd
Obor: Matematické inženýrství - Matematická fyzika
Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: Ing. Matěj Tušek, Ph.D
Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze

Konzultant:

Abstrakt: Tato práce se zabývá řešením problému spektrální teorie lineárních diferenciálních operátorů na Hilbertově prostoru kvadraticky integrabilních funkcí. Účelem je přiřadit fyzikální interpretaci vlastním číslům. Bude se jednat hlavně o direktní součet dvourozměrné lineární variety a polopřímky.
Klíčová slova: Kvantová mechanika, Hilbertův prostor, Diferenciální rovnice

Title:
Quantum systems of mixed dimensionality

Author: Jiří Kolář

Abstract: The thesis deals with the issue of spectral theory for linear differential operators on Hilbertspace of square-integrable functions. The purpose is to assgin physical interpretation to eigenvalues. The main focus is going to be on direct sum of two-dimentional linear manifold and a halfline.
Key words: Quantum mechanics, Hilbert space, Diferential equation

Obsah

Značení

symbol	význam
$\langle .\vert . \rangle$	skalární součin na Hilbertově prostoru
A^*	sdružení operátoru
$\mathbb{C}$	komplexní čísla
$\mathbb{R}$	reálná čísla
$\mathbb{Z}$	celá čísla
$AC^k(J)$	prostor funkcí, jejichž derivace do k-tého řádu jsou absolutně spojité na J
$C_0^\infty(J)$	prostor testovacích funkcí
$C_0^{'\infty}(J)$	prostor zobecněných distribucí na testovacích funkcích
$L^k(J)$	normovaný prostor funkcí integrabilních v k-té mocnině
$L^k_{loc}(J)$	prostor lokálně integrabilních funkcí v k-té mocnině
$\Vert \cdot \Vert_k$	k norma
$Ker(.)$	jádro operátoru
$\rho(.)$	resolventní množina operátoru
$\sigma(.)$	spektrum operátoru
$\mathrm{Re}(.)$	reálná část komplexního čísla
$\mathrm{Im}(.)$	imaginární část komplexního čísla
$W_x(.,.)$	Wronskián v bodě x
$Span(.)$	lineární obal
$Ran(.)$	obor hodnot operátoru
$\overline{z}$	komplexní sdružení
$\simeq$	asymptotické přiblížení
$\bigoplus$	direktní tenzorový součet
$\bigotimes$	direktní tenzorový součin

Úvod

Díky enormnímu pokroku minulých dekád v oblasti nano-technologií se aktuálně nacházíme téměř na hranici jejich možností. Klasickým příkladem jsou křemíkové destičky počítačových čipů, na kterých jsou v dnešní době obvody huštěny tak blízko k sobě, že dochází ke kvantovému tunelování a to ničí užitečnost těchto součástek. Proto pro další pokrok je potřeba prohloubit naše znalosti v kvantové mechanice. Kvantová mechanika je fyzikální teorie zabývající se jevy vyskytujícími se hlavně na atomární a subatomární úrovni. I přes to, že základy kvantové mechaniky byly položeny Maxem Planckem již před více než sto lety, konečné pochopení zdá se býti pořád v nedohlednu. Ba dokonce při každém dalším jednom kroku vpřed, odkrývá se deset dalších otázek. Jedním z důvodů je neintuitivnost. „Svět“ velmi malých objektů se chová úplně jinak, než na co jsme při běžném pozorování reality zvyklí. (Pravda je taková, že kvantová mechanika ovlivňuje veškerou hmotu vesmíru. Je to omezenost našich vjemů, která nám brání vnímat svět „kvantově“.)

Jeden rozdíl kterým se liší klasická a kvantová mechanika je, že kvantová mechanika není deterministická. Místo jasné predikce, co bude kvantová částice za daných podmínek dělat, můžeme pouze předpovědět co se může dít a s jakou pravděpodobností se to stane. Mohlo by se zdát, že tak kvantová fyzika není dobrá teorie a existuje lepší popis, ale proběhlo již mnoho experimentů, které ukazují,že tento fakt není důsledkem naší neznalosti, ale je fundamentální vlastností vesmíru. Odlišnost těchto teorií implikuje i potřebu různých matematických aparátů.

V klasické mechanice je stav částice dán polohou a hybností. Ty jsou matematicky reprezentovány vektory $(\vec{x}, \vec{p}) \in \mathbb{R}^6$. Pozorovatelné jsou poté reprezentovány reálnými funkcemi $(\vec{x}, \vec{p}) \to P(\vec{x}, \vec{p})$ a měřitelné hodnoty jsou funkce vyčísleny v určitém stavu. Ve kvantové mechanice je stav prvkem takzvaného Hilbertova prostoru, jehož přesná definice se zavádí například v [1]. V našem případě budeme jako Hilbertův prostor brát prostor kvadraticky integrabilních funkcí $L^2(M)$, kde $M \subset \mathbb{R}^n$. V takovémto případě je pozorovatelná $\hat{A}$ dána samosdruženým operátorem $\hat{A} : \mathscr{D}(\hat{A}) \subset L^2(M) \to L^2(M)$, tento pojem upřesníme později v textu. Měřitelné hodnoty jsou poté dány body spektra těchto operátorů, ty jsou pro samosdružené operátory reálná čísla [1].

Je-li M varieta, operátor polohy se postuluje

$$\hat{Q}_j = x_j,$$

jakožto násobení funkcí x_j a operátory hybnosti

$$\hat{P}_j = -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial x_j},$$

kde $\hbar$ je takzvaná redukovaná Planckova konstanta $\hbar \approx 1,05 \times 10^{34} J \times s$. V operátoru hybnosti budeme ignorovat násobení $\hbar$, to fyzikálně odpovídá změně jednotek. Ostatní operátory se konstruují podle principu korespondence. To znamená, je-li v klasické mechanice pozorovatelná $A = F(\vec{x}, \vec{p})$, bereme kvantový ekvivalent $\hat{A} = F(\hat{Q}, \hat{P})$. Problém je, že takto definované operátory nemusejí být samosdružené. Proto v tomto textu uvedeme jak tento problém řešit pomocí takzvaných samosdružených rozšíření. Ty poté budeme konstruovat pro vybrané Hamiltoniany, které bereme z principu korespondence takto:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}_j\hat{P}_j + \hat{V} = -\frac{1}{2m}\sum\frac{\hat{d}^2}{x_j} + V(\hat{Q}),$$

kde m je hmotnost částice. Opět můžeme změnit fyzikální jednotky a $\frac{1}{2m}$ ignorovat. Jak uvidíme ne vždy musí být M varieta, pokud je M alespoň složením několika pod-variet můžeme jako Hilbertův prostor přiřadit direktní součet Hilbertových prostorů jednotlivých pod-variet. Tak tomu i bude v kapitole „Volná částice na ploše spojené s kolmicí“.

Kapitola 1

Základní definice a věty

Pro kompaktní značení se nám bude hodit pojem Wronskiánu.

Definice 1.0.1. Nechť $f, g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$ jsou diferencovatelné v bodě $x \in \mathbb{R}^n$. Poté definujeme Wronskián v bodě x jako determinant

$$W_x(f,g) = \begin{vmatrix} f(x) & g(x) \\ f^{'}(x) & g^{'}(x) \end{vmatrix}$$

Věta 1 (Lagrangeova formule)**.** Nechť $J = (a,b)$ je interval na $\mathbb{R}$ a $\hat{L}$ je diferenciální výraz ve tvaru

$$\hat{L} = -\tfrac{\hat{d^2}}{dx^2} + V(x), \text{ kde } V \in L^1_{loc},\ V(x) \in \mathbb{R}.$$

Bod a (b) nazýváme regulární konec právě tehdy, když $a > -\infty$ ($b < \infty$) a V je integrabilní na nějakém pravém (levém) okolí a, (b). J_l značí sjednocení J a množiny regulárních konců. Poté pro libovolný uzavřený interval $[c,d] \in J_l$ a funkce $f, g \subset AC^1(J_l)$ máme rovnost

$$\int_c^d (\hat{L}(f)g - f\hat{L}(g))dx = W_d(f,g) - W_c(f,g). \tag{1.1}$$

Vzorec (1.1) nazýváme Lagrangeova formule.

Důkaz. Pro $f, g \in AC^1(J_l)$ je funkce $x \to W_x(f,g) \in AC(J_l)$ a platí

$$W_x^{'}(f,g) = f(x)g^{''}(x) - f^{''}(x)g(x) =$$
$$f(x)(g^{''}(x) + V(x)g(x)) - g(x)(f^{''}(x) + V(x)f(x)).$$

Integrací obou stran od c do d získáme rovnost (1.1).

□

Tvrzení 1. Nechť $f, V \in L^2_{loc}(J)$ a $g \in L^1_{loc}(J)$. Pokud $f^{''} + Vf = g$ v $C_0^{'\infty}(J)$, poté $f \in AC^1(J)$.

Důkaz. K nalezení v [7] jako Corollary A.4. □

1.1 Sdružený operátor

V této kapitole budeme všude uvažovat hustě definované operátory.

Definice 1.1.1 (Sdružený operátor)**.** Nechť $\hat{A}$ je lineární operátor na Hilbertově prostoru $\mathscr{H}$ působící na svém definičním oboru $\mathscr{D}(\hat{A})$. Poté k $\hat{A}$ definujeme sdružený operátor $\hat{A}^*$ s definičním oborem

$$\mathscr{D}(\hat{A}^*) = \{\psi \in \mathscr{H} | \exists \rho \in \mathscr{H}, \left\langle \psi \middle| \hat{A}\phi \right\rangle = \langle \rho | \phi \rangle \, \forall \phi \in \mathscr{D}(\hat{A})\}$$

působící následovně:

$$\hat{A}^* \psi = \rho.$$

Definice 1.1.2 (Omezený operátor)**.** Lineární operátor $\hat{A}$ nazveme omezeným právě, když existuje $\alpha \in \mathbb{R}$ takové, že:

$$\sup_{\psi \in \mathscr{D}(\hat{A}), \|\psi\|=1} \left\| \hat{A}\psi \right\| < \alpha.$$

Poznámka. Každý omezený hustě definovaný operátor lze jednoznačně rozšířit na celý prostor. Běžně se pak pracuje s tímto tzv. spojitým rozšířením, které se značí stejným písmenem.

Značení Máme-li lineární operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$, takové, že $\mathscr{D}(\hat{A}) \subset \mathscr{D}(\hat{B})$ a $\hat{A} = \hat{B}$ na $\mathscr{D}(\hat{B})$. Poté značíme

$$\hat{A} \subset \hat{B}.$$

Definice 1.1.3 (Symetrický operátor)**.** Lineární operátor nazveme symetrický právě, když

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

Definice 1.1.4 (Samosdružený operátor)**.** Lineární operátor $\hat{A}$ nazveme samosdružený právě, když

$$\hat{A} = \hat{A}^*.$$

Definice 1.1.5 (V podstatě samosdružený)**.** Operátor nazveme v podstatě samosdružený, je-li symetrický a jeho uzávěr je samosdružený.

Věta 2. Každý omezený operátor je samosdružený právě, když platí:

$$\left\langle \psi \middle| \hat{A}\phi \right\rangle = \left\langle \hat{A}\psi \middle| \phi \right\rangle,$$

pro všechna $\psi,\phi \in \mathscr{H}$.

Důkaz. Stačí zvolit $\rho = \hat{A}\psi$, $\forall \psi \in \mathscr{H}$.

Příklad 1. Mějme operátor $(\hat{Q}\psi)(x) = x\psi(x)$ s definičním oborem: $\mathscr{D}(\hat{Q}) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) | x\psi \in L^2(\mathbb{R})\}$. Bude nás zajímat, zda je samosdružený.
Nejdříve ukážeme, že $\mathscr{D}(\hat{Q}) \subset \mathscr{D}(\hat{Q}^*)$: Vezmeme tedy $\psi \in \mathscr{D}(\hat{Q})$. Poté pro každý $\phi \in \mathscr{D}(\hat{Q})$ platí:

$$\left\langle \psi \middle| \hat{Q}\phi \right\rangle = \textstyle\int_{\mathbb{R}} \overline{\psi} \; x\phi dx = \int_{\mathbb{R}} \overline{x\psi} \; \phi dx = \langle x\psi | \phi \rangle .$$

To znamená že, za naše ρ z definice $\mathscr{D}(\hat{Q}^*)$ můžeme brát $\rho = x\psi$. Nyní nám chybí opačná inkluze. Vezměme $\psi \in \mathscr{D}(\hat{Q}^*)$. Ten pro všechna $\phi \in \mathscr{D}(\hat{Q})$ splňuje:

$$\left\langle \psi \middle| \hat{Q}\phi \right\rangle = \langle \rho|\phi \rangle .$$

To můžeme přepsat na:

$$\textstyle\int_{\mathbb{R}} \overline{\psi}\ x\phi dx = \int_{\mathbb{R}} \overline{\rho}\ \phi dx.$$

A převést vše na jednu stranu.

$$\textstyle\int_{\mathbb{R}} \overline{(\psi x - \rho)}\phi dx = 0.$$

Nabízí se tuto podmínku přepsat opět na skalární součin. To ale naneštěstí nemůžeme udělat, protože nevíme zda $x\psi \in L^2$. Namísto toho berme $\phi = \chi_{(-n,n)}\widetilde{\phi}$ pro všechna přirozená n. Kde: $\widetilde{\phi} \in \mathscr{D}(\hat{Q})$ a $\chi_{(-n,n)}$ je charakteristická funkce intervalu $(-n, n)$. To nám upraví podmínku na:

$$\textstyle\int_{-n}^{n} \overline{(\psi x - \rho)}\widetilde{\phi} = 0 \ (\forall n \in \mathbb{N}\ ,\ \forall \widetilde{\phi} \in \mathscr{D}(\hat{Q})).$$

To už můžeme přepsat pomocí skalárního součinu na:

$$\left\langle x\psi - \rho \middle| \widetilde{\phi} \right\rangle = 0\ ,\ \forall \widetilde{\phi} \in \mathscr{D}(\hat{Q})).$$

Na prostorech $L^2(-n, n)$. Protože množina $\mathscr{D}(\hat{Q})$ je hustá, splňuje zde tuto rovnost jedině nulový vektor $0 = x\phi - \rho$ všude na $(-n, n)$. Navíc $\mathbb{R} = \bigcup_{n=1}^{\infty}(-n, n)$ a $\rho \in L^2(\mathbb{R})$ podle předpokladu. Získáváme tak:

$$x\psi = \rho \in L^2(\mathbb{R}),$$

což jsme chtěli ukázat. Závěrem tedy můžeme říct, že $\hat{Q} = \hat{Q}^*$. Operátor $\hat{Q}$ je tedy samosdružený.

Věta 3 (Vlastnosti sdružených operátorů)**.** Nechť $\hat{A}$, $\hat{B}$ jsou lineární operátory na Hilbertově prostoru $\mathscr{H}$, $\hat{A}^*$ a $\hat{B}^*$ jsou k nim příslušná sdružení. Poté platí

1. $\alpha \in \mathbb{C}$ poté: $\overline{\alpha}\hat{A}^*$ je sdružený k $\alpha\hat{A}$. Zapisujeme: $(\alpha\hat{A})^* = \overline{\alpha}\hat{A}^*$
2. $\hat{A} \subset \hat{B} \Rightarrow \hat{B}^* \subset \hat{A}^*$
3. $\hat{A} \subset \hat{A}^{**}$
4. $\hat{A}^* + \hat{B}^* \subset (\hat{A} + \hat{B})^*$

Důkaz. 1. Pro $\alpha = 0$ je tvrzení triviální. Vezmeme proto $\alpha \neq 0$ $\psi \in \mathscr{D}(\overline{\alpha}\hat{A}^*)$ a $\phi \in \mathscr{D}(\hat{A})$. Pro ně můžeme napsat a upravit:

$$\left\langle \psi \middle| \alpha\hat{A}\phi \right\rangle = \alpha \left\langle \psi \middle| \hat{A}\phi \right\rangle = \alpha \left\langle \hat{A}^*\psi \middle| \phi \right\rangle = \left\langle \overline{\alpha}\hat{A}^*\psi \middle| \phi \right\rangle .$$

Tím jsme ukázali, že $\mathscr{D}(\overline{\alpha}\hat{A}^*) \subset \mathscr{D}((\alpha\hat{A})^*)$ a že na $\mathscr{D}(\overline{\alpha}\hat{A}^*)$ mají stejnou akci. Ještě potřebujme opačnou inkluzi.

$$\mathscr{D}((\alpha\hat{A})^*) = \mathscr{D}(\tfrac{1}{\overline{\alpha}}(\alpha\hat{A})^*) \subset \mathscr{D}((\tfrac{\alpha}{\alpha}\hat{A})^*) = \mathscr{D}(\overline{\alpha}\hat{A}^*).$$

2. $\mathscr{D}(\hat{B}^*) = \{\psi \in \mathscr{H} | \exists\rho \in \mathscr{H}, \left\langle \psi \middle| \hat{B}\phi \right\rangle = \langle \rho|\phi \rangle\ \ \forall\phi \in \mathscr{D}(\hat{B})\} \subset \{\psi \in \mathscr{H} | \exists\rho \in \mathscr{H}, \left\langle \psi \middle| \hat{B}\phi \right\rangle = \langle \rho|\phi \rangle\ \ \forall\phi \in \mathscr{D}(\hat{A})\} = \{\psi \in \mathscr{H} | \exists\rho \in \mathscr{H}, \left\langle \psi \middle| \hat{A}\phi \right\rangle = \langle \rho|\phi \rangle\ \ \forall\phi \in \mathscr{D}(\hat{A})\} = \mathscr{D}(\hat{A}^*)$. Kde jsme využili faktu ,že na $\mathscr{D}(\hat{A})$ působí $\hat{A}$ a $\hat{B}$ stejně.

3. Vezmeme $\psi \in \mathscr{D}(\hat{A})$ a $\phi \in \mathscr{D}(\hat{A}^*)$

$$\left\langle \psi \middle| \hat{A}^*\phi \right\rangle = \overline{\left\langle \hat{A}^*\phi \middle| \psi \right\rangle} = \overline{\left\langle \phi \middle| \hat{A}\psi \right\rangle} = \left\langle \hat{A}\psi \middle| \phi \right\rangle$$

   $\rho = \hat{A}\psi$.

4. Vezmeme $\psi \in \mathscr{D}(\hat{A}^* + \hat{B}^*) = \mathscr{D}(\hat{A}^*) \cap \mathscr{D}(\hat{B}^*)$ a $\phi \in \mathscr{D}(\hat{A} + \hat{B}) = \mathscr{D}(\hat{A}) \cap \mathscr{D}(\hat{B})$, to ale z definice znamená, že existují ρ_1, $\rho_2 \in \mathscr{H}$ takové, že : $\left\langle \psi \middle| \hat{A}\phi \right\rangle = \langle \rho_1 | \phi \rangle$ a $\left\langle \psi \middle| \hat{B}\phi \right\rangle = \langle \rho_2 | \phi \rangle$. Proto

$$\left\langle \psi \middle| (\hat{A} + \hat{B})\phi \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{A}\phi \right\rangle + \left\langle \psi \middle| \hat{B}\phi \right\rangle = \langle \rho_1 | \phi \rangle + \langle \rho_2 | \phi \rangle = \langle \rho_1 + \rho_2 | \phi \rangle = \left\langle (\hat{A}^* + \hat{B}^*)\psi \middle| \phi \right\rangle.$$

   Na $\mathscr{D}(\hat{A}^* + \hat{B}^*)$ tedy působí $(\hat{A} + \hat{B})^*$ a $\hat{A}^* + \hat{B}^*$ stejně.

$\square$

1.2 Samosdružená rozšíření

Ne každý operátor získaný principem korespondence je automaticky samosdružený. Naštěstí existuje řešení v podobě samosdruženého rozšíření. Pro hledání samosdruženého rozšíření budeme používat takzvanou druhou Von Neumanovu formuli, kterou abychom mohli vyslovit, budeme muset definovat ještě několik pojmů a vyslovit několik vět, jejichž důkazy se dají dohledat například v [1].

Definice 1.2.1 (Cayleyova transformace)**.** Zobrazení $\hat{V} : Ran(\hat{A}+i) \to Ran(\hat{A}-i)$ působící jako:

$$\hat{V} = (\hat{A} - i)(\hat{A} + i)^{-1}$$

nazýváme Cayleyova transformace.

Věta 4. $\hat{A}$ je ,samosdružený právě když Cayleyova transformace $\hat{V}$ je unitární.

Definice 1.2.2 (indexy defektu)**.** Nechť $\hat{A}$ je uzavřený symetrický operátor. Poté

$$d_{\pm} = Dim(Ker(\hat{A}^* \mp i))$$

nazýváme indexy defektu a $Ker(\hat{A}^* \mp i) := \mathscr{K}_{\pm}$ defektní prostory.

Věta 5. (První Von-Neumanova formule) Nechť A je uzavřený, symetrický operátor. Poté pro každé $x \in \mathscr{D}(A^*)$ existuje jednoznačný rozklad

$$x = x_0 + x_+ + x_-,$$

kde $x_0 \in \mathscr{D}(A)$, $x_{\pm} \in \mathscr{K}_{\pm}$.

Nyní můžeme vyslovit větu, která nám bude dávat návod, jak hledat samosdružené rozšíření, pokud budeme mít pouze symetrický operátor.

Věta 6 (Druhá Von-Neumanova formule)**.** Nechť $\hat{A}$ je symetrický, uzavřený operátor. Samosdružené rozšíření pro $\hat{A}$ existuje, právě tehdy když:

$$d_+ = d_-.$$

Nechť nadále $\hat{A}^1$ je samosdružené rozšíření pro $\hat{A}$ a $\hat{V}^1 : \mathscr{K}_+ \to \mathscr{K}_-$ unitární zobrazí. Poté:

$$\mathscr{D}(\hat{A}^1) = \{\psi + \phi_+ - \hat{V}^1\phi_+ | \psi \in \mathscr{D}(\hat{A}), \phi_+ \in \mathscr{K}_+\}$$

$$\hat{A}^1(\psi + \phi_+ - \hat{V}^1\phi_+) = \hat{A}\psi + i\phi_+ + i\hat{V}^1\phi_+.$$

1.3 Hraniční trojice

V této sekci zavedeme objekt, který se v anglické literatuře vyskytuje pod názvem „boundary triples“. Pro jednotnost jazyka textu budeme používat pojmenování „Hraniční trojice“. Tento matematický aparát nám umožní přepsat definiční obory samosdružených rozšíření do takzvaných hraničních podmínek, které mnohdy bývají praktičtější pro další výpočty.

Definice 1.3.1 (Hraniční trojice)**.** Nechť $\hat{A}$ je uzavřený lineární operátor na Hilbertově prostoru $\mathscr{H}$ s definičním oborem $\mathscr{D}(\hat{A})$, $\mathscr{G}$ je Hilbertův prostor. Trojici $\mathscr{G}$ a dvě lineárná zobrazení: $\Gamma_0, \Gamma_1 : \mathscr{D}(\hat{A}) \to \mathscr{G}$ splňující:

$$\left\langle f \middle| \hat{A}g \right\rangle - \left\langle \hat{A}f \middle| g \right\rangle = \langle \Gamma_0 f | \Gamma_1 g \rangle - \langle \Gamma_1 f | \Gamma_0 g \rangle ,$$

pro všechna $f, g \in \mathscr{D}(\hat{A})$, zobrazení $(\Gamma_1, \Gamma_2) : \mathscr{D}(\hat{A}) \to \mathscr{G} \bigoplus \mathscr{G}$ je surjektivní a množina $ker(\Gamma_0, \Gamma_1)$ je hustá v $\mathscr{H}$, nazýváme Hraniční trojici pro A. Γ_0, Γ_1 nazýváme hraničními operátory.

Věta 7. Nechť $\hat{A}$ je uzavřený, hustě definovaný symetrický operátor. Pokud $(\mathscr{G}, \Gamma_0, \Gamma_1)$ je hraniční trojice pro $\hat{A}^*$, poté existuje jedna ku jedné korespondence mezi všemi samosdruženými lineárními relacemi Λ v $\mathscr{G}$ a všemi samosdruženými rozšířeními A, dané $\Lambda \leftrightarrow A_\Lambda$, kde A_Λ je zúžení A^* na vektory $f \in \mathscr{D}(\hat{A})$ splňující $(\Gamma_0 f, \Gamma_1 f) \in \Lambda$.

Důkaz. K nalezení v [3]. □

Věta 8. Lineární relace Λ v $\mathscr{G}$ je samosdružená právě, když existuje unitární operátor U v $\mathscr{G}$, zvaný Cayleyova transformace Λ takový, že:

$$\Lambda = \{(x_1, x_2) \in \mathscr{G} \bigoplus \mathscr{G} : i(I + U)x_1 = (I - U)x_2\}.$$

Důkaz. K nalezení v [3]. □

Kapitola 2

Vybrané kvantové modely

2.1 Volná částice na polopřímce

Podívejme se nyní na operátor $\hat{H} = -\frac{\hat{d}^2}{dx^2}$ s definičním oborem $\mathscr{D}(\hat{H}) = C_0^\infty(\mathbb{R}^+)$. Takto definovaný operátor není samosdružený. Je ale symetrický. Opravdu pro $\psi, \phi \in \mathscr{D}(\hat{H})$:

$$\left\langle \psi \middle| \hat{H}\phi \right\rangle = \textstyle\int_0^\infty -\overline{\psi}\phi'' dx. = -[\phi\overline{\psi'}]_0^\infty + [\phi'\overline{\psi}]_0^\infty + \int_0^\infty -\overline{\psi''}\phi dx.$$

Protože testovací funkce v nule a nekonečnu vymizí, platí:

$$\left\langle \psi \middle| \hat{H}\phi \right\rangle = \left\langle \hat{H}\psi \middle| \phi \right\rangle .$$

Naneštěstí není uzavřený, proto abychom mohli najít samosdružené rozšíření pomocí Von Neumanovi formule, budeme nejdříve potřebovat uzávěr. Víme, že $\overline{\hat{H}} = \hat{H}^{**}$. Podle definice sdruženého operátoru máme:

$$\mathscr{D}(\hat{H}^*) = \{\psi \in L^2(R^+) | \exists \rho \in L^2(R^+), \left\langle \psi \middle| \hat{H}\phi \right\rangle = \langle \rho | \phi \rangle, \forall \phi \in \mathscr{D}(\hat{H})\}.$$

Ten přepíšeme do tvaru:

$$\mathscr{D}(\hat{H}^*) = \{\psi \in L^2(R^+) | \psi'' \in L^2(R^+) \text{ jako slabá derivace}\}.$$

Skutečně podle definice slabé derivace je ρ druhá slabá derivace ψ právě když:

$$\left\langle \psi \middle| \phi'' \right\rangle = \langle \rho | \phi \rangle ,$$

pro všechna testovací ϕ. Máme tedy akci $\hat{H}^* = -\frac{\hat{d}^2}{dx^2}$.

Tvrzení 2. Má - li $\psi \in L^2(\mathbb{R}^+)$ druhou slabou derivaci $\psi'' \in L^2(R^+)$, poté i $\psi' \in L^2(R^+)$.

Důkaz. Dodefinujme $\psi(x) = 0$, pro $x \leq 0$ a vezměme standardní vyhlazovací funkci $\eta_\epsilon \in C_0^\infty(\mathbb{R}^+)$, $\epsilon > 0$. Potom plati $\eta_\epsilon * \psi' \to \psi'$ na $L^2(\mathbb{R})$.

$$(\forall \delta > 0)(\exists \epsilon_0 > 0)(\forall \epsilon < \epsilon_0)(\left| \left\| \psi' * \eta_\epsilon \right\|_2 - \left\| \psi' \right\| \right|_2 < \delta).$$

Protože $\mathscr{F}(\eta_\epsilon)$ je omezená, existuje $C > 0$ takové že $|\mathscr{F}(\eta_\epsilon)| \leq C$

$$\left\| \eta_\epsilon * \psi' \right\|_2 = \left\| \mathscr{F}(\eta_\epsilon * \psi') \right\|_2 = \left\| \mathscr{F}(\eta_\epsilon)\mathscr{F}(\psi') \right\| \leq C \left\| \mathscr{F}(\psi') \right\|_2.$$

Také platí

$$\left\|\mathscr{F}(\psi')\right\|_2 = \|\xi\mathscr{F}(\psi)\|_2 = \int_{-\infty}^{\infty}\xi^2|\mathscr{F}(\psi)|^2 d\xi.$$

a dále můžeme odhadnout

$$0 \leq (\xi^2-1)^2 = \xi^4 - 2\xi^2 + 1 \Rightarrow \xi^2 \leq \tfrac{1+\xi^4}{2}.$$

Proto

$$\left\|\mathscr{F}(\psi')\right\|_2 \leq C\int_{-\infty}^{\infty}(1+\xi^4)|\mathscr{F}(\psi)|^2 d\xi = C(\|\mathscr{F}(\psi)\|_2 + \|\xi^2\mathscr{F}(\psi)\|_2) =$$
$$C(\|\psi\|_2 + \left\|\psi''\right\|_2) < \infty.$$

Zvolíme-li například $\delta = 1$ poté máme nějaké ϵ_0, pro které platí $\left|\left\|\psi' * \eta_{\epsilon_0}\right\|_2 - \left\|\psi'\right\|\right|_2 < 1$. Z toho můžeme říct $\left\|\psi'\right\|_2 < 1 + \left\|\psi' * \eta_{\epsilon_0}\right\|_2 < \infty$.

□

Tvrzení 3. Nechť V je omezené na (a,∞) pro nějaké $a \in \mathbb{R}^+$, $f \in L^2(\mathbb{R}^+) \cap AC^1(\mathbb{R}^+)$, $(f'' + Vf) \in L^2(\mathbb{R}^+)$. Poté

$$\lim_{x\to\infty} f(x) = \lim_{x\to\infty} f'(x) = 0. \tag{2.1}$$

Důkaz. K nalezení v [7] □

Dále pokračujeme na:

$$\mathscr{D}(\hat{H}^{**}) = \{\psi \in L^2(R^+) | \exists\rho \in L^2(R^+), \left\langle\psi\middle|\hat{H}^*\phi\right\rangle = \langle\rho|\phi\rangle, \forall\phi \in \mathscr{D}(\hat{H}^*)\}.$$

Jak jsme již ukázali, $\hat{H}$ je symetrický, platí tak

$$\hat{H}^{**} \subset \hat{H}^*.$$

Z čehož víme, že akce $\hat{H}^{**}$ je $-\frac{d^2}{dx^2}$. Tudíž se můžeme při hledání omezit na $\psi \in \mathscr{D}(\hat{H}^*)$. Pošleme-li d v (1.1) limitně do nekonečna dostaneme rovnost

$$\left\langle\psi\middle|-\phi''\right\rangle - \langle-\psi''|\phi\rangle = W_0(\overline{\psi},\phi) - W_\infty(\overline{\psi},\phi),\ \forall\phi \in \mathscr{D}(H^*).$$

Navíc z (1) a (2.1) plyne $W_\infty(\overline{\psi},\phi) = 0$, proto konečně dostáváme

$$\mathscr{D}(\hat{H}^{**}) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^2) | \exists\psi'' \in L^2(\mathbb{R})^+ \text{ jako slabá derivace, } \psi(0) = \psi'(0) = 0\}.$$

Nyní můžeme najít indexy defektu. K tomu potřebujeme defektní prostory:

$$\psi \in Ker[\hat{H}^* \pm i] \iff \hat{H}^*\psi = \mp i\psi.$$

Pro $\psi \in \mathscr{D}(\hat{H}^*)$. To nám dává diferenciální rovnici:

$$\psi'' = \mp i\psi.$$

Řešení hledáme ve tvaru $\psi = \mathrm{e}^{\lambda x}$.
Nejprve uvažujme kladné znaménko v rovnici a dosaďme.

$$\lambda^2\mathrm{e}^{\lambda x} = i\mathrm{e}^{\lambda x}.$$

Vyřešením pro λ dostaneme funkce:

$$A\mathrm{e}^{\sqrt{i}x} + B\mathrm{e}^{-\sqrt{i}x},$$

kde komplexní větev volíme tak aby $\sqrt{i} = \mathrm{e}^{i\frac{\pi}{4}}$. Navíc požadujeme, aby funkce byly z $L^2(R^+)$ (podmínka existence druhých slabých derivací je určitě splněna již z jejich konstrukce). $\mathrm{e}^{\sqrt{i}x}$ není v $L^2(\mathbb{R}^+)$ zato $\mathrm{e}^{-\sqrt{i}x}$ je. Proto $\psi \in L^2(\mathbb{R}^+) \Leftrightarrow A = 0$. Dostáváme tak

$$Ker[\hat{H}^* - i] = Span[\mathrm{e}^{-\sqrt{i}x}].$$

Ekvivalentním způsobem se dá odvodit:

$$Ker[\hat{H}^* + i] = Span[\mathrm{e}^{i\sqrt{i}x}].$$

Indexy defektu jsou stejné, a proto můžeme pomocí druhé Von Neumanovi formule konstruovat samosdružená rozšíření, které budeme značit $\hat{H}_s$.

Začneme nalezením unitárního zobrazení V_1. Báze našich prostorů, mezi kterými zobrazuje V_1, jsou tvořeny navzájem komplexně sdruženými vektory, mají tak stejnou normu. Z tohoto faktu a z toho že V_1 má být unitární plyne, že $\exists\theta \in \mathbb{R}$ takové

$$V_1(\mathrm{e}^{-\sqrt{i}x}) = \mathrm{e}^{i\theta}\mathrm{e}^{i\sqrt{i}x}.$$

Použijeme nyní vzorec pro definiční obor $\hat{H}_s$, z (6), který nám definiční obor třídy samosdružených rozšíření takto

$$\mathscr{D}(\hat{H}_{s,\theta}) = \{\psi(x) + A(\mathrm{e}^{-\sqrt{i}x} - \mathrm{e}^{i\theta}\mathrm{e}^{i\sqrt{i}x})|\psi \in \mathscr{D}(\overline{\hat{H}})\}.$$

Využijme faktu, že pro tyto funkce platí:

$$\frac{\psi'(0)}{\psi(0)} = \frac{\mathrm{e}^{i\theta}i\sqrt{i}+\sqrt{i}}{\mathrm{e}^{i\theta}-1} = \frac{\mathrm{e}^{i\theta}i\sqrt{i}+\sqrt{i}}{\mathrm{e}^{i\theta}-1}\frac{\mathrm{e}^{-i\theta}-1}{\mathrm{e}^{-i\theta}-1} = \frac{\sqrt{2}(cos(\theta)+sin(\theta)-1)}{2(1-cos(\theta))}.$$

Označme nyní tuto funkci Θ a zkoumejme její obor hodnot. Upravíme tuto funkci na tvar $\Theta = (-1 + \frac{sin(\theta)}{1-\cos(\theta)})\frac{1}{\sqrt{2}}$. S využitím rozvoje do mocninné řady dostaneme

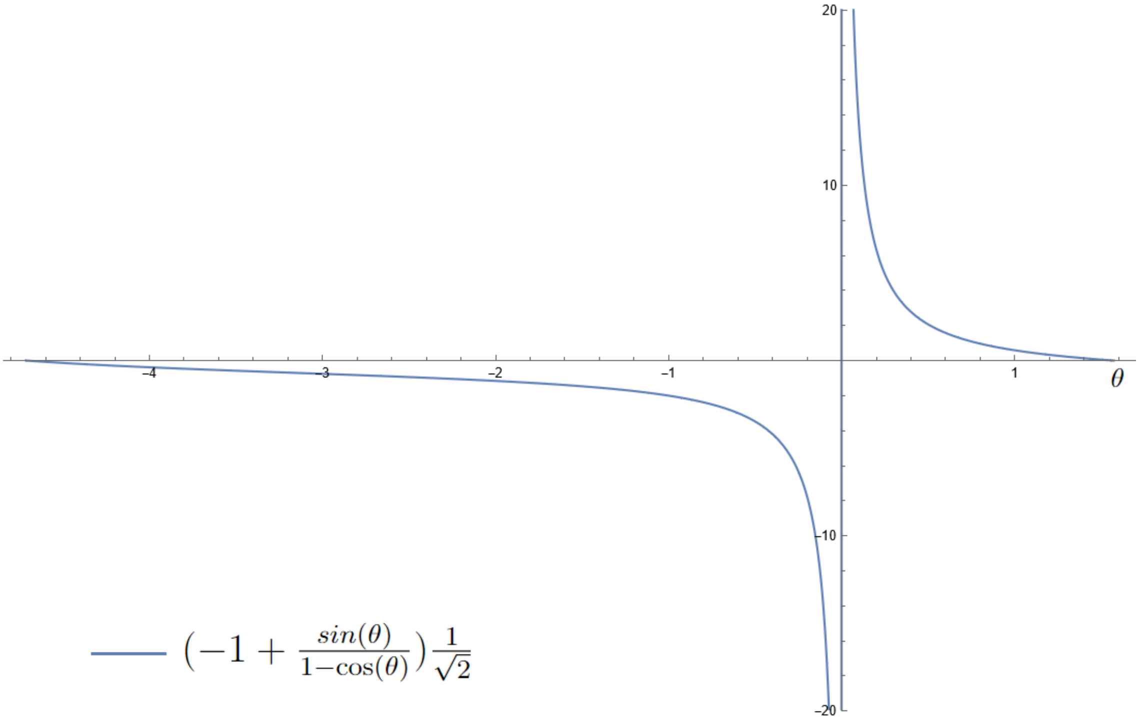
$$\frac{\sin(\theta)}{1-\cos(\theta)} = \frac{\theta + O(\theta^3)}{\frac{\theta^2}{2} + O(\theta^4)},$$

z čehož plyne

$$\lim_{\theta\to 0^+} \Theta = \infty$$

$$\lim_{\theta\to 0^-} \Theta = -\infty.$$

Protože $\Theta(\frac{\pi}{2}) = \Theta(\frac{-3\pi}{2}) = 0$ a na intervalu $(-\frac{-3\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ má pouze jednu nespojitost, je její obor hodnot celé $\mathbb{R}$.



Obrázek 2.1: Graf funkce Θ

Tím jsme ukázali že platí

$$\mathscr{D}(\hat{H}_{s,\theta}) \subset \{\psi \in L^2(R^+) | \exists \psi'' \text{jako slabá derivace}, \psi(0)' = \alpha\psi(0)\} := \mathscr{D}(\hat{H}_{s,\alpha}),$$

kde $\alpha \in \mathbb{R}$. Naopak platí $\mathscr{D}(\hat{H}_{s,\alpha}) \subset \mathscr{D}(\hat{H}^*)$. Můžeme tak libovolnou $\psi \in \mathscr{D}(\hat{H}_{s,\alpha})$ napsat jako

$$\psi = f + \mathrm{e}^{-\sqrt{i}r} + \beta \mathrm{e}^{i\sqrt{i}r},$$

až násobení konstantou, kde $f \in \mathscr{D}(\overline{\hat{H}})$. Musí platit

$$\frac{\psi'(0)}{\psi(0)} = \frac{i\sqrt{i} - \sqrt{i}\beta}{1+\beta} = \alpha.$$

Dosadíme za $\alpha = \frac{\mathrm{e}^{i\theta} i\sqrt{i} + \sqrt{i}}{e^{\theta} - 1}$ a vyjádříme β dostaneme tak

$$\psi = f + \mathrm{e}^{-\sqrt{i}r} - \mathrm{e}^{i\theta}\mathrm{e}^{i\sqrt{i}r}.$$

Z toho již plyne, že definiční obory třídy samosdružených rozšíření jsou

$$\mathscr{D}(H_{s,\alpha}) = \{\psi \in L^2(R^+) | \exists \psi'' \text{jako slabá derivace}, \psi(0)' = \alpha\psi(0)\}.$$

Příklad 2. Vezměme samosdružený operátor, který jsme našli v předchozím příkladě a zkoumejme jeho spektrum. Začneme nalezením rezolventní množiny:

$$\rho(\hat{H}_{s,\alpha}) = \{\lambda \in \mathbb{C} | (\forall f \in L^2(\mathbb{R}^+))(\exists_1 \psi \in \mathscr{D}(\hat{H}_{s,\alpha}))((\hat{H}_{s,\alpha} - \lambda)\psi = f)\}.$$

Protože je daný operátor samosdružený, a tím pádem je spektrum podmnožina reálných čísel, omezíme se na reálná čísla. Problém resolventy vede na vyřešení diferenciální rovnice:

$$-\psi'' - \lambda\psi = f. \tag{2.2}$$

Rozdělíme postup na tři části: $\lambda > 0, \lambda < 0, \lambda = 0$ a vyřešíme pomocí variace konstant.

Uvažujme nejprve kladná λ a označme búno. $\lambda = k^2$, $k \in \mathbb{R}^+$. Fundamentální systém této rovnice je: $\{\sin(kx), \cos(kx)\}$. Snadno se dá přesvědčit, že obecné řešení s nenulovou pravou stranou má tvar:

$$\psi(x) = (A - \tfrac{1}{k}\textstyle\int_0^x f(t)\sin(kt)dt)\cos(kx) + (B + \tfrac{1}{k}\int_0^x f(t)\cos(kt)dt)\sin(kx).$$

Z podmínky $\psi \in \mathscr{D}(\hat{H}_{s,\alpha})$ plyne: $\frac{\psi'(0)}{\psi(0)} = \frac{kB}{A} = \alpha$. Zvolíme-li nyní $f \in L^2(\mathbb{R}^+)$ takovou, aby $f(x)\sin(kx) \in L^1(\mathbb{R}^+)$ i $f(x)\cos(x) \in L^1(\mathbb{R}^+)$. Vidíme, že pro $x \to \infty$ platí:

$$\psi(x) \simeq (A - \tfrac{1}{k}\textstyle\int_0^\infty f(t)\sin(kt)dt)\cos(kx) + (\tfrac{\alpha}{k}A + \tfrac{1}{k}\int_0^\infty f(t)\cos(kt)dt)\sin(kx).$$

A protože funkce $K_1\sin(x) + K_2\cos(x) \in L^2(\mathbb{R}^+) \Leftrightarrow K_1 = K_2 = 0$, zvolíme tak $A = \frac{1}{k}\int_0^\infty f(t)\sin(kt)dt$. Nadále musí platit:

$$\tfrac{1}{k^2}\textstyle\int_0^\infty f(t)(\alpha\sin(kt) + k\cos(kt))dt = 0.$$

Konkrétně pro funkci $f(x) = \chi_{(\frac{3\pi}{2k},\frac{5\pi}{2k})}$ získáme spor:

$$\tfrac{1}{k^2}\textstyle\int_0^\infty f(t)(\alpha\sin(kt) + k\cos(kt))dt = \tfrac{1}{k^2}\int_{\frac{3\pi}{2k}}^{\frac{5\pi}{2k}}(\alpha\sin(kt) + k\cos(kt))dt = \tfrac{2}{k^2} > 0.$$

Proto není v rezolventní množině žádné kladné λ.

Nyní se podívejme na $\lambda < 0$. Označme $\lambda = -k^2$, $k \in \mathbb{R}^+$. V takovém případě vezmeme za fundamentální systém: $\{e^{kt}, e^{-kt}\}$. Obecné řešení má tvar:

$$\psi(x) = (A + \tfrac{1}{k}\textstyle\int_0^x f(t)e^{-kt}dt)e^{kx} + (B - \tfrac{1}{k}\int_0^x f(t)e^{kt}dt)e^{-kx}.$$

Opět hledáme pro danou funkci $f(x)$ řešení $\psi \in L^2(\mathbb{R}^+)$. Aby toho vůbec mohlo být dosaženo, musíme položit $A = -\frac{1}{k}\int_0^\infty f(t)e^{-kt}dt$, jinak by měla funkce v nekonečnu exponenciální chování. Dosazením získáme:

$$\psi(x) = (-\tfrac{1}{k}\textstyle\int_x^\infty f(t)e^{-kt}dt)e^{kx} + (B - \tfrac{1}{k}\int_0^x f(t)e^{kt}dt)e^{-kx}.$$

Také máme znovu podmínku $\frac{\psi'(0)}{\psi(0)} = \frac{-B+A}{B+A}k = \alpha$, která nám určuje konstantu B. Ta má po vyjádření tvar:

$$B = \tfrac{k-\alpha}{k+\alpha}A.$$

Pro $k \neq -\alpha$. V tomto případě máme jednoznačné řešení a to je, jak teď ukážeme, v $L^2(\mathbb{R}^+)$. Roznásobením převedeme funkci do tvaru:

$$\psi(x) = -\tfrac{1}{k}(\textstyle\int_x^\infty f(t)e^{-kt}dt)e^{kx} + \int_0^x f(t)e^{kt}dt)e^{-kx}) + Be^{-kx}.$$

e^{-kx} je zajisté v $L^2(\mathbb{R}^+)$ a zbytek můžeme upravit následujícím způsobem:

$$\tfrac{1}{k}(\textstyle\int_x^\infty f(t)e^{-kt}dt)e^{kx} + \tfrac{1}{k}(\int_0^x f(t)e^{kt}dt)e^{-kx} = \tfrac{1}{k}\int_x^\infty f(t)e^{-kt+kx}dt + \tfrac{1}{k}\int_0^x f(t)e^{kt-kx}dt = \tfrac{1}{k}\int_0^\infty f(t)e^{-k|x-t|}dt.$$

Dodefinujeme-li $f(t)$ na záporné ose nulou, poté tento výraz odpovídá definici konvoluce.

$$\textstyle\int_0^\infty f(t)e^{-k|x-t|}dt = f * e^{-k|x|}.$$

Pro tu máme k dispozici Youngovu nerovnost:

$$(\int_0^\infty |f*g|^2)^{\frac{1}{2}} \leqslant \|f\|_2 \|g\|_1.$$

[5] f je z $L^2(\mathbb{R})$ z předpokladu a $g = \mathrm{e}^{-k|x|}$ je v $L^1(\mathbb{R})$, takže i $f*g$ je v $L^2(\mathbb{R})$. Navíc součet kvadraticky integrabilních funkcí je opět kvadraticky integrabilní, proto $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, až na výjimku $k = -\alpha$, pro $\alpha < 0$. $\psi^{''} \in L^2(\mathbb{R}^+)$ plyne z konstrukce funkce pomocí rovnice(2.2) a $\psi^{'} \in L^2(\mathbb{R}^+)$ z tvrzení (2). Pro $k = -\alpha$, $\alpha < 0$ musí být $A = 0$ a ψ má v nekonečnu exponenciální chování.

Už nám zbývá pouze případ $\lambda = 0$. Fundamentální systém je $\{1, x\}$ a obecné řešeni tak:

$$\psi(x) = Ax + B + x\int_0^x f(t)dt - \int_0^x tf(t)dt.$$

Pro volbu f $L^2(\mathbb{R}^+)$ takovou, že i $xf \in L^2(\mathbb{R}^+)$ má asymptotické chování v nekonečnu:

$$\psi(x) \simeq Ax + B + x\int_0^\infty f(t)dt - \int_0^\infty tf(t)dt.$$

Dosadíme-li konkrétně : $f(t) = \chi_{(0,1)}$, dostaneme asymptotické chování:

$$\psi(x) \simeq (A+1)x + (B + \tfrac{1}{2}),$$

které není kvadraticky integrabilní.

Souhrně můžeme říct, že operátor $\hat{H}_{s,\alpha}$ má rezolventní množinu:

$$\rho(\hat{H}_{s,\alpha}) = \mathbb{C}\backslash([0,\infty) \cup \{-\alpha^2\}),$$

pro $\alpha < 0$.

$$\rho(\hat{H}_{s,\alpha}) = \mathbb{C}\backslash([0,\infty),$$

pro $0 \leq \alpha$.

Následné tak i spektrum:

$$\sigma(\hat{H}_{s,\alpha}) = [0,\infty) \cup \{-\alpha^2\},$$

pro $\alpha < 0$

$$\sigma(\hat{H}_{s,\alpha}) = [0,\infty),$$

pro $0 \leq \alpha$.

Pro záporné α odpovídá $-\alpha^2$ vlastnímu číslu. Z definice vlastního čísla, $-\alpha^2 \in \sigma_p(\hat{H}_{s,\alpha}) \Leftrightarrow Ker(\hat{H} + \alpha^2 I) \neq \{0\}$, plyne, že budeme řešit diferenciální rovnici

$$\psi^{''} = \alpha^2\psi,$$

s okrajovou podmínkou $\psi^{'}(0) = \alpha\psi(0)$ a $\psi \in L^2(\mathbb{R}^+)$. Obecné řešení vypadá takto:

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}.$$

Z podmínky $\psi^{'}(0) = \alpha\psi(0)$ dostaneme $A - B = A + B \Rightarrow B = 0$. Výsledné řešení je tak $\psi(x) = A\mathrm{e}^{\alpha}$, které je pro $\alpha < 0$ v $L^2(\mathbb{R}^+)$. To znamená, že

$$Ker(\hat{H}_{s,\alpha} + \alpha^2 I) = Span(\mathrm{e}^{\alpha x}).$$

2.2 Volná částice na ploše s bodovou interakcí

Uvažujme volnou kvantovou částici vázanou na plochu $\mathbb{R}^2$. Hilbertův prostor stavů této částice vezmeme

$$\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^2).$$

Začneme s Hamiltonianem

$$\hat{H} = -\tfrac{\partial^2}{\partial y^2} - \tfrac{\partial^2}{\partial z^2},$$

s definičním oborem $\mathscr{D}(\hat{H}) = C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \backslash \{0\})$. Ten, jak uvidíme později, není samosdružený a tak budeme konstruovat samosdružené rozšíření. Přejděme do polárních souřadnic

$$y = r\cos(\phi)$$

$$z = r\sin(\phi).$$

$L^2(\mathbb{R}^2 \backslash \{0\})$ rozložíme následujícím způsobem:

$$L^2(\mathbb{R}^2, dxdy) = L^2(\mathbb{R}^+, rdr) \bigotimes L^2((0, 2\pi), d\phi).$$

Pro $L^2((0, 2\pi), d\phi)$ máme ortonormální bázi $\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{im\phi}|m \in \mathbb{Z}\}$, to nám dohromady dává rozklad:

$$L^2(\mathbb{R}^2, dxdy) = \bigoplus_{-\infty}^{\infty} L^2(\mathbb{R}^+, rdr) \bigotimes \{\tfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{im\phi}\}.$$

Převedením operátoru $\hat{H}$ do polárních souřadnic dostaneme:

$$\hat{H} = \tfrac{\partial^2}{\partial r^2} + \tfrac{1}{r}\tfrac{\partial}{\partial r} + \tfrac{1}{r^2}\tfrac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

Jelikož $\frac{\partial^2}{\partial \phi}\mathrm{e}^{im\phi} = -m^2\mathrm{e}^{im\phi}$. Působí na našem rozloženém prostoru operátor $\hat{H}$ takto:

$$\hat{H} = \bigoplus_{-\infty}^{\infty} -\tfrac{\partial^2}{\partial r^2} - \tfrac{1}{r}\tfrac{\partial}{\partial r} + \tfrac{m^2}{r^2}$$

$$\mathscr{D}(\hat{H}) = \bigoplus_{-\infty}^{\infty} C_0^\infty(\mathbb{R}^+).$$

Označíme $h_m = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{m^2}{r^2} \bigotimes I$, $\mathscr{D}(h_m) = C_0^\infty(\mathbb{R}^+)$ a transformujeme tento operátor pomocí unitární transformace $V : L^2(\mathbb{R}^+, rdr) \to L^2(\mathbb{R}^+, dr), Vf(r) = \sqrt{r}f(r)$ takto:

$$\tilde{h_m} = Vh_mV^{-1} = -\tfrac{\partial^2}{\partial r^2} + \tfrac{-1/4+m^2}{r^2}.$$

Indexy defektu pro h_m a $\tilde{h_m}$ jsou stejné viz (2.7) . Zkoumejme tedy jaké jsou. Pro $m \neq 0$ má tento operátor tvar Hamiltoniánu s kladným, spojitým potenciálem $\frac{3}{4r^2} \leq \hat{V}_m(r)$, pro ten z [6] víme, že je v podstatě samosdružený. Otázkou tedy zůstává $\tilde{h_0} = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{4r^2}$. Hledejme tedy jeho indexy defektu.

Tvrzení 4. Sdružení $\tilde{h_0}$ má tvar $\tilde{h_0^*} = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{-1/4+m^2}{r^2}$. s definičním oborem

$$\mathscr{D}(\tilde{h_0^*}) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^+) | \psi \in AC^1(\mathbb{R})^+, (-\psi'' - \tfrac{1}{4r^2}\psi) \in L^2(\mathbb{R}^+, dr)\}.$$

Důkaz. Ukažme tedy že tomu tak opravdu je. Z definice:

$$\tilde{h_0^*} = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^+) | (\exists \rho \in L^2(\mathbb{R}^+))(\forall \phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^+))(\left\langle \tilde{h}_0\psi \middle| \phi \right\rangle = \langle \rho | \phi \rangle)\}.$$

Z toho můžeme vyjádřit

$$\begin{aligned} \psi \in \tilde{h_0^*} &\Leftrightarrow (\exists \rho \in^2 (\mathbb{R}^+))(\forall \phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^+))(\left\langle -\psi'' - \tfrac{1}{4r}\psi \middle| \phi \right\rangle = \langle \rho | \phi \rangle) \\ &\Leftrightarrow (\exists \rho \in L^2(\mathbb{R}^+))((-\psi'' - \tfrac{1}{4r^2}\psi) = g \text{ v } C_0^{\prime\infty}(\mathbb{R}^+)). \end{aligned}$$

Z (1) plyne že

$$\psi \in \tilde{h_0^*} \Rightarrow \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^+, dr) | \psi \in AC^1(\mathbb{R})^+, (-\psi'' - \tfrac{1}{4r^2}\psi) \in L^2(\mathbb{R}^+, dr)\} = M.$$

Naopak, vezmeme li $\psi \in M$, poté z (1.1) $\forall \psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^+)$

$$\left\langle \psi \middle| \tilde{h}_0\phi \right\rangle - \left\langle -\psi'' - \tfrac{1}{4r^2}\psi \middle| \phi \right\rangle = W_0(\overline{\psi}, \phi) - W_\infty(\overline{\psi}, \phi) = 0 - 0.$$

Tím pádem $\mathscr{D}(\tilde{h_0^*}) = M = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^+, dr) | \psi \in AC^1(\mathbb{R})^+, (-\psi'' - \frac{1}{4r^2}\psi) \in L^2(\mathbb{R}^+)\}$.

□

Tvrzení 5. Uzávěr operátoru $\tilde{h}_0$ je dán

$$\overline{\tilde{h}_0} = -\tfrac{d^2}{dr^2} - \tfrac{1}{4r^2}$$
$$\mathscr{D}(\overline{\tilde{h}_0}) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^+, dr) | f \in AC^1(\mathbb{R}^+), (-f'' - \tfrac{1}{4r^2}) \in L^2(\mathbb{R}^+, dr), W_0(g, f) = W_0(\overline{g}, f) = 0\}, \text{ kde } g, \overline{g} \text{ jsou nenulová řešení rovnice (2.3).}$$

Důkaz. Jelikož je $\tilde{h}_0$ symetrický

$$\psi \in \mathscr{D}(\overline{\tilde{h}_0}) = \mathscr{D}(\tilde{h}_0^{**}) \Leftrightarrow \psi \in L^2(\mathbb{R}^+) \wedge (\forall \phi \in \mathscr{D}(\tilde{h_0}^*)(\left\langle \psi \middle| \tilde{h_0^*}\phi \right\rangle) = \left\langle \tilde{h}_0^*\psi \middle| \phi \right\rangle.$$

Z (5) můžeme napsat $\phi = f + ag + b\overline{g}$, kde $f \in \mathscr{D}(\overline{\tilde{h}_0})$. Následně tak

$$\begin{aligned} \psi \in \mathscr{D}(\overline{\tilde{h}_0}) &\Leftrightarrow \left\langle \psi \middle| \tilde{h}_0^*(f + ag + b\overline{g}) \right\rangle - \left\langle \tilde{h}_0^*\psi \middle| f + ag + b\overline{g} \right\rangle = 0 \\ \Leftrightarrow (\left\langle \psi \middle| \tilde{h}_0^* f \right\rangle - \left\langle \tilde{h}_0^*\psi \middle| f \right\rangle) &+ a(\left\langle \psi \middle| \tilde{h}_0^* g \right\rangle - \left\langle \tilde{h}_0^*\psi \middle| g \right\rangle) + b(\left\langle \psi \middle| \tilde{h}_0^* \overline{g} \right\rangle - \left\langle \tilde{h}_0^*\psi \middle| \overline{g} \right\rangle) = 0. \end{aligned}$$

$\forall a, b \in \mathbb{R}$. První závorka je rovna nule a pro zbytek použijeme (1.1).

$$\left\langle \psi \middle| \tilde{h}_0^* g \right\rangle - \left\langle \tilde{h}_0^*\psi \middle| g \right\rangle = W_0(\overline{\psi}, g)$$
$$\left\langle \psi \middle| \tilde{h}_0^* \overline{g} \right\rangle - \left\langle \tilde{h}_0^*\psi \middle| \overline{g} \right\rangle = W_0(\overline{\psi}, \overline{g}).$$

Celkem tedy $\psi \in \mathscr{D}(\overline{\tilde{h}_0}) \Leftrightarrow \psi \in \mathscr{D}(\tilde{h}_0) \cap \{\psi | 0 = W_0(\overline{\psi}, \overline{g}) = W_0(\overline{\psi}, g)\}$.

□

V dalším kroku Von Neumanovy formule potřebujeme najít řešení rovnice:

$$\tilde{h_0^*} g = -g'' - \frac{1}{4r^2} g = \pm i g. \tag{2.3}$$

Pro $g \in \mathscr{D}(\tilde{h_0^*})$.

Nejdříve pro kladné znaménko zavedeme substituci $g(r) = \sqrt{r} f(r)$, aby nám přešel výraz na :

$$irf(r) + f'(r) + rf''(r) = 0. \text{ Další substitucí } r = \tfrac{\omega}{\sqrt{i}} \text{ dostaneme rovnici:}$$

$$\omega^2 F''(\omega) + \omega F'(\omega) + \omega^2 F(\omega) = 0,$$

která vede na takzvané Hankelovi funkce $\{H_0^1(\omega), H_0^2(\omega)\}$. Řešení původní rovnice je tedy:

$$g(r) = A\sqrt{r}H_0^1(\sqrt{i}r) + B\sqrt{r}H_0^2(\sqrt{i}r). \tag{2.4}$$

Navíc $g(r)$ musí být kvadraticky integrabilní. Asymptotický rozvoj pro $z \to \infty$ pro tyto funkce vypadá podle [4] takto :

$$H_0^1(z) = \mathrm{e}^{-i\pi/4}\mathrm{e}^{iz}(\sqrt{\tfrac{2}{\pi z}}) + O(z^{-\frac{3}{2}}) \Rightarrow \sqrt{r}H_0^1(\sqrt{i}r) = K\mathrm{e}^{-x/\sqrt{2}+ix/\sqrt{2}} + O(1/r)$$
$$H_0^2(z) = \mathrm{e}^{i\pi/4}\mathrm{e}^{-iz}(\sqrt{\tfrac{2}{\pi z}}) + O(z^{-\frac{3}{2}}) \Rightarrow \sqrt{r}H_0^2(\sqrt{i}r) = K\mathrm{e}^{x/\sqrt{2}-ix/\sqrt{2}} + O(1/r).$$

Z toho zatím můžeme usoudit, že $B = 0$. Ještě musíme zkontrolovat kvadratickou integrabilitu na okolí nuly. Protože $\hat{H}_0^1$ je definovaná takto

$$H_0^1 = J_0 + iY_0$$

a asymptotické rozvoje pro tyto funkce kolem okolí nuly jsou

$$Y_0(z) = \tfrac{2}{\pi}(ln(z/2) + \gamma_c) + O(z^2) + \mathrm{O}$$
$$J_0 = 1 + O(z^2),$$

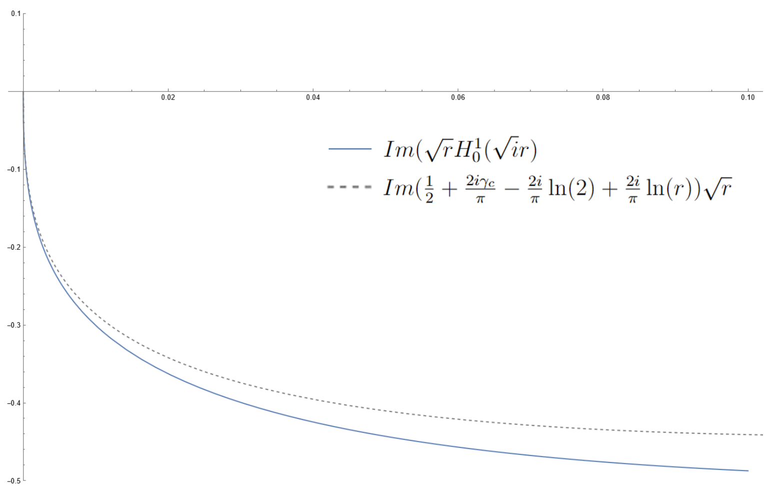
kde γ_c je Eulerova konstanta. Dohromady máme aproximaci H_0^1

$$H_0^1(\sqrt{i}r) = (\frac{1}{2} + \frac{2i\gamma_c}{\pi} - \frac{2i}{\pi}\ln(2)) + \frac{2i}{\pi}\ln(r) + O(r^{\frac{5}{2}}). \tag{2.5}$$

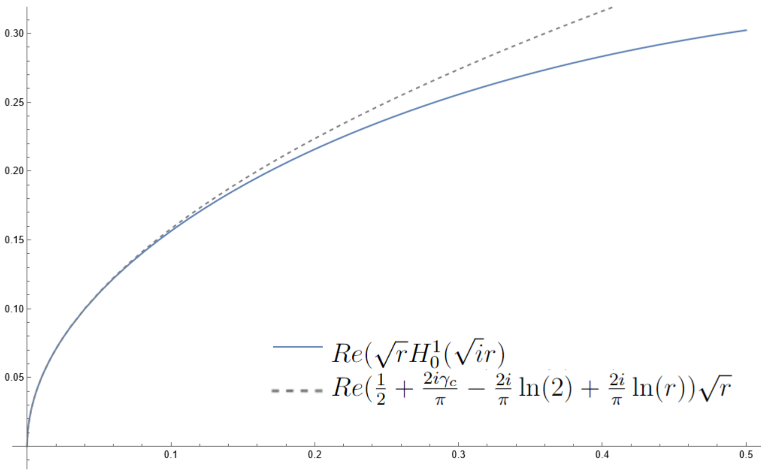
Dosadíme-li do g a přeznačíme-li $\delta = \frac{1}{2} + \frac{2i\gamma_c}{\pi} - \frac{2i}{\pi}\ln(2)$, $\gamma = \frac{2i}{\pi}$, dostaneme

$$g(r) = \gamma\sqrt{r}\ln(r) + \delta\sqrt{r} + O(r^{\frac{5}{2}}). \tag{2.6}$$

Ta se dokonce dá dodefinovat spojitě nulou a je tak na okolí počátku lokálně kvadraticky integrabilní. Dohromady můžeme říct , že $g(r) \in L^2(\mathbb{R}^+)$, právě když $B = 0$.



Obrázek 2.2: porovnání reálné části g s jejím asymptotickým rozvojem



Obrázek 2.3: porovnání imaginární části g s jejím asymptotickým rozvojem

Nyní vyřešíme rovnici s záporným znaménkem. S uvědoměním si, že náš operátor $\tilde{h}_0^*$ je čistě reálný, můžeme obě strany rovnosti komplexně sdružit a získat tak rovnost:

$$\tilde{h}_0^*\overline{g} = -i\overline{g}.$$

Ta nám dává řešení $g(r) = \sqrt{r}\overline{H_0^1}(\sqrt{i}r)$. Vzhledem k tomu, že $-g'' - \frac{1}{4r^2}g = \pm ig \in L^2(\mathbb{R}^+, dr)$ a (1), je $g \in \mathscr{D}(\tilde{h}_0^*)$ a jsou tedy dimenze vektorových prostorů řešení rovnice (2.3) (1,1). Indexy defektu jsou tak opravdu $d_\pm(\hat{H}) = \sum_{-\infty}^{+\infty} d_\pm(h_m) = (1, 1)$.

Poznámka. Pro funkce z $\mathscr{K}_\pm(\tilde{h}_0)$ je nutné si uvědomit, že pokud platí $Uh_mU^{-1}\psi = \pm i\psi$, platí i

$$h_mU^{-1}\psi = \pm iU^{-1}\psi. \tag{2.7}$$

Závěrem s nahlédnutím do (2.7) dosadíme do Von Neumanovy formule a získáme tak samosdružené rozšíření

$$\mathscr{D}(h_0^s) = \{f + a(H_0^1(\sqrt{i}r) - e^{i\theta}\overline{H}_0^1(\sqrt{i}r))|f \in \mathscr{D}(\overline{h_0})\}, \text{ kde } \theta \in \mathbb{R}$$
$$h_0^s(f + a(H_0^1(\sqrt{i}r) - e^{i\theta}\overline{H}_0^1(\sqrt{i}r))) = -f'' - \frac{1}{4r^2} + ia(\hat{H}_0^1(\sqrt{i}r) + e^{i\theta}\overline{H}_0^1(\sqrt{i}r)).$$

Poskládáním zpět dohromady máme konečný výsledek:

$$\hat{H}_{s,\alpha} = h_0^s \bigoplus\nolimits_{m\in\mathbb{Z}\setminus 0} \overline{h_m} \otimes I.$$

2.3 Volná částice na ploše spojené s kolmicí

V této kapitole budeme zkoumat chování kvantové částice vázané na varietu složenou ze dvou částí. Dvoudimenzionální plochy a polopřímky, která vede kolmo z počátku. Hilbertův prostor takového modelu je dán následujícím způsobem:

$$\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \bigoplus L^2(\mathbb{R}^+).$$

Nyní zkonstruujme Hamiltonián volné částice jako:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{0,2} \bigoplus \hat{H}_{0,1},$$

kde:

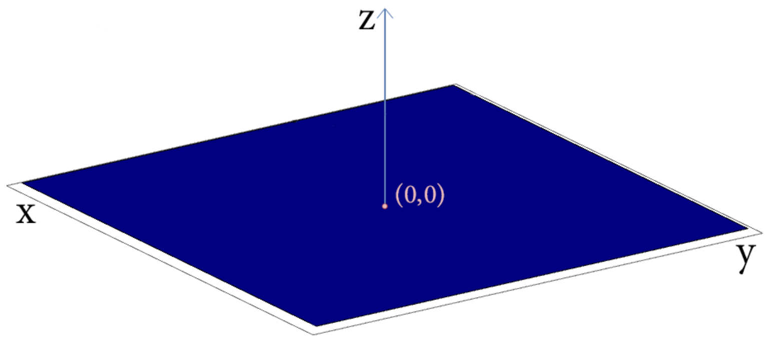
$$\hat{H}_{0,1} = -\frac{\hat{d}^2}{dx^2}$$

$$\hat{H}_{0,2} = -\frac{\hat{d}^2}{dy^2} - \frac{\hat{d}^2}{dz^2}.$$

S definičními obory:

$$\mathscr{D}(\hat{H}_{0,1}) = C_0^\infty(\mathbb{R}^+\backslash\{0\})$$

$$\mathscr{D}(\hat{H}_{0,2}) = C_0^\infty(R^2\backslash\{0\}).$$



Obrázek 2.4: plocha spojená s kolmicí

Nahlédneme-li nyní do předchozích sekcí (2.1) a (2.2), zjistíme, že většinu práce již máme za sebou. Známe totiž defektní prostory pro jednotlivé podsystémy a následně i tak jejich indexy defektu.

Samosdružené rozšíření $\hat{H}_S$ celkového operátoru $\hat{H}_0$ má tedy tvar:

$$\hat{H}_s = K_s \bigoplus \overline{h},$$

kde K_s je samosdružené rozšíření operátoru $K_0 = -\frac{d^2}{dx^2} \bigoplus h_0 \bigotimes I$ a $h = \bigoplus_{m\in\mathbb{Z}\backslash\{0\}} h_m \bigotimes I$. Dohromady s předchozími výsledky máme defektní prostory:

$$\mathscr{K}_+(K_0) = Span\{\sqrt{2}(\mathrm{e}^{-\sqrt{i}x}, 0), 2\sqrt{\pi}(0, \hat{H}_0^1(\sqrt{i}r))\}$$

$$\mathscr{K}_-(K_0) = Span\{\sqrt{2}(\mathrm{e}^{i\sqrt{i}x}, 0), 2\sqrt{\pi}(0, \overline{H}_0^1(\sqrt{i}r))\},$$

kde jsme bazické funkce zvolili tak, aby měly stejnou normu. Všechna unitární zobrazení $\mathbb{M} : \mathscr{K}_+ \to \mathscr{K}_-$ jsou reprezentovány unitárními maticemi 2×2. Označíme-li tuto třídu:

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}.$$

Poté podle Von Neumanovi formule je $K_{(s,M)}$ dáno následovně:

$$\mathscr{D}(K_{(s,M)}) = \{\psi = f + (a\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\sqrt{i}r}, b2\sqrt{\pi}H_0^1(\sqrt{i}r)) - (m_{11}a\sqrt{2}\mathrm{e}^{i\sqrt{i}r} + bm_{12}2\sqrt{\pi}\overline{H}_0^1(\sqrt{i}r), m_{21}a\sqrt{2}\mathrm{e}^{i\sqrt{i}r} + bm_{22}2\sqrt{\pi}\overline{H}_0^1(\sqrt{i}r)) | f \in \mathscr{D}(K_0)\}$$
$$K_{(s,M)}\psi = K_0 f + i(a\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\sqrt{i}x}, b2\sqrt{\pi}H_0^1(\sqrt{i}r)) + i(m_{11}a\sqrt{2}\mathrm{e}^{i\sqrt{i}x} + bm_{12}2\sqrt{\pi}\overline{H}_0^1(\sqrt{i}r), m_{21}a\sqrt{2}\mathrm{e}^{i\sqrt{i}x} + bm_{22}2\sqrt{\pi}\overline{H}_0^1(\sqrt{i}r)).$$

To je ale nepraktické pro další výpočty. Podívejme se proto, zda nedosáhneme lepších výsledků pomocí hraniční trojice.

2.3.1 Hraniční trojice pro K_0^*

Pro $\hat{H}_{0,1}^*$ vezmeme funkce $\psi, \phi \in \mathscr{D}(\hat{H}_{0,1}^*)$ velmi jednoduše získáme

$$\left\langle \hat{H}_{0,1}^*\psi \middle| \phi \right\rangle - \left\langle \psi \middle| \hat{H}_{0,1}^*\phi \right\rangle = \int_0^\infty \overline{\psi}^{''}\phi - \overline{\psi}\phi'' dr = \overline{\psi(0)}\phi'(0) - \overline{\psi'(0)}\phi(0).$$

Hraniční operátory můžeme proto v definici (1.3.1) zvolit takto: $\Gamma_0 \equiv \Gamma_0^1(f) = f(0)$, $\Gamma_1 \equiv \Gamma_1^1(f) = f^{'}(0)$, $\mathscr{G} = \mathbb{C}$ se standardním skalárním součinem.

Pro funkce $\psi, \phi \in \mathscr{D}(\tilde{h}_0^*)$ obdobně z (1.1) a (2.1) získáme

$$\left\langle \tilde{h}_0^*\psi \middle| \phi \right\rangle - \left\langle \psi \middle| \tilde{h}_0^*\phi \right\rangle = W_0(\overline{\psi}, \phi).$$

Z první Von Neumanovy formule dostaneme:

$$\begin{aligned} \psi &= f + ag + b\overline{g} \\ \phi &= \tilde{f} + \tilde{a}g + \tilde{b}\overline{g}. \end{aligned}$$

Kde $f \in \mathscr{D}(\overline{\tilde{h}_0})$. Dosazením do Wronskianu a upravením pomocí linearity a vlastností $f, \tilde{f}, g$ dostaneme:

$$W_0(\overline{f} + \overline{ag} + \overline{b}g, f + \tilde{a}g + \tilde{b}\overline{g}) = W_0(\overline{f}, \tilde{f}) + W_0(\overline{b}g + \overline{ag}, \tilde{a}g + \tilde{b}\overline{g}) = (\overline{a}\tilde{a} - \overline{b}\tilde{b})W_0(\overline{g}, g).$$

Ukažme, že opravdu $W_0(f, \overline{f}) = 0$. Z rovnosti $W_0(f, g) = W_0(f, \overline{g}) = 0$ plyne

$$\lim_{r\to 0^+} Re(g^{'})f - Re(g)f^{'} = 0$$

$$\lim_{r\to 0^+} Im(g^{'})f - Im(g)f^{'} = 0.$$

Dosazením za g z (2.6), $g^{'} = \frac{\gamma}{2}\frac{\ln(r)}{\sqrt{r}} + O(\frac{1}{\sqrt{r}})$ a upravením získáme rovnosti

$$\lim_{r\to 0^+} f(r)(\frac{1}{\sqrt{r}} + O(\sqrt{r})) = 0$$

$$\lim_{r\to 0^+} f^{'}(r)(\sqrt{r} + O(r^{\frac{5}{2}}\sqrt{r})) = 0.$$

Z těchto dále plyne

$$\lim_{r\to 0^+} \frac{f}{\sqrt{r}} = \lim_{r\to 0^+} \sqrt{r}f^{'} = 0.$$

A konečně i

$$W_0(\overline{f}, \tilde{f}) = \lim_{r\to 0^+} \frac{\overline{f}}{\sqrt{r}}\sqrt{r}\tilde{f}^{'} - \frac{\tilde{f}}{\sqrt{r}}(\sqrt{r})\overline{f}^{'} = 0.$$

Navíc $W_0(\overline{g}, g) = \overline{g}(0)g^{'}(0) - g^{'}(0)\overline{g}(0) = 2Img(\overline{g}(0)g^{'}(0))$. Dosadíme do ψ, ϕ za g asymptotický rozvoj.

$$\begin{aligned} \psi(r) &= f + (a\gamma + b\overline{\gamma})\sqrt{r}\ln(r) + (a\gamma + b\overline{\gamma})\sqrt{r} + O(r^{\frac{5}{2}}) \\ \phi(r) &= \tilde{f} + (\tilde{a}\gamma + \tilde{b}\overline{\gamma})\sqrt{r}\ln(r) + (\tilde{a}\gamma + \tilde{b}\overline{\gamma})\sqrt{r} + O(r^{\frac{5}{2}}). \end{aligned}$$

Označme:

$$\begin{aligned} \alpha &= a\gamma + b\overline{\gamma} \\ \beta &= a\delta + b\overline{\delta}. \end{aligned}$$

Obdobně:

$$\begin{aligned}\tilde{\alpha} &= \tilde{a}\gamma + \tilde{b}\overline{\gamma}\\ \tilde{\beta} &= \tilde{a}\delta + \tilde{b}\overline{\delta}.\end{aligned}$$

Inverze nám dá tyto rovnosti:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\gamma\overline{\delta}-\overline{\gamma}\delta}\begin{pmatrix} \overline{\delta} & -\overline{\gamma} \\ -\delta & \gamma \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} \tilde{a} \\ \tilde{b} \end{pmatrix} = \frac{1}{\gamma\overline{\delta}-\overline{\gamma}\delta}\begin{pmatrix} \overline{\delta} & -\overline{\gamma} \\ -\delta & \gamma \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \tilde{\alpha} \\ \tilde{\beta} \end{pmatrix}.$$

Protože:

$$\overline{a}\tilde{a} - \overline{b}\tilde{b} = \begin{pmatrix} \overline{a} & \overline{b} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \tilde{\alpha} \\ \tilde{\beta} \end{pmatrix}.$$

Dosadíme a roznásobíme matice

$$\overline{a}\tilde{a} - \overline{b}\tilde{b} = \frac{1}{\left|\gamma\overline{\delta}-\overline{\gamma\delta}\right|^2}\begin{pmatrix} \overline{\alpha} & \overline{\beta} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -\overline{\gamma}\delta + \gamma\overline{\delta} \\ -\gamma\overline{\delta} + \overline{\gamma}\delta & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \tilde{\alpha} \\ \tilde{\beta} \end{pmatrix}.$$

Nakonec:

$$\overline{a}\tilde{a} - \overline{b}\tilde{b} = \frac{1}{2Img(\overline{\delta}\gamma)}(\overline{\alpha}\tilde{\beta} - \overline{\beta}\tilde{\alpha}).$$

Můžeme proto zvolit $\tilde{\Gamma}_0^{1,2} : \mathscr{D}(\tilde{h_0}^*) \to \mathbb{C}$ takto:

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_0^2(f + \alpha\sqrt{r}\ln(r) + \beta\sqrt{r} + O(r^{\frac{5}{2}})) &= \frac{\alpha}{2Img(\overline{\delta}\gamma)}\\ \tilde{\Gamma}_1^2(f + \alpha\sqrt{r}\ln(r) + \beta\sqrt{r} + O(r^{\frac{5}{2}})) &= \frac{\beta}{2Img(\overline{\delta}\gamma)}.\end{aligned}$$

Kde $f \in \mathscr{D}(\overline{\tilde{h}_0})$. Vrátíme se k původnímu netransformovanému h_0^* pomocí $\psi \to \sqrt{r}\psi$. Tedy

$$\sqrt{r}\psi = \sqrt{r}f + \alpha\sqrt{r}\ln(r) + \beta\sqrt{r} + O(r^{\frac{5}{2}})),\ f \in \mathscr{D}(\overline{h}_0).$$

Můžeme vyjádřit

$$\lim_{r\to 0}\frac{\psi(r)}{\ln(r)} = \alpha + \lim_{r\to 0}\frac{f + \beta + O(r^{\frac{3}{2}})}{\ln(r)}$$

$$\lim_{r\to 0}\psi(r) - \alpha\ln(r) = \beta + \lim_{r\to 0} f(r) + O(r^{\frac{3}{2}}).$$

Protože navíc platí $\lim_{r\to 0} f(r) = 0$, dostaneme hledané hraniční operátory $\Gamma_{0,1}^2 : \mathscr{D}(h_0^*) \to \mathbb{C}$

$$\Gamma_0^1(\psi) = \frac{1}{2Img(\overline{\delta}\gamma)}\lim_{r\to 0}\frac{\psi(r)}{\ln(r)}$$

$$\Gamma_1^2(\psi) = \frac{1}{2Img(\overline{\delta}\gamma)}\lim_{r\to 0}\psi(r) - \alpha\ln(r).$$

Dohromady pro $\psi = (\psi_1, \psi_2)$, $\phi = (\phi_1, \phi_2) \in \mathscr{D}(K_0^*)$ platí:

$$\begin{gathered}\langle K_0^*\psi|\phi\rangle - \langle\psi|K_0^*\phi\rangle = \left\langle \tilde{h}_0^*\psi_1 \middle| \phi_1 \right\rangle - \left\langle \psi_1 \middle| \tilde{h}_0^*\phi_1 \right\rangle + \left\langle H_{0,1}^*\psi_2 \middle| \phi_2 \right\rangle - \left\langle \psi_2 \middle| H_{0,1}^*\phi_2 \right\rangle = \\ \overline{\Gamma}_0^1(\psi_1)\Gamma_1^1(\phi_1) + \overline{\Gamma}_0^2(\psi_2)\Gamma_1^2(\phi_2) - \Gamma_0^1(\phi_1)\overline{\Gamma}_1^1(\psi_1) - \Gamma_0^2(\phi_2)\overline{\Gamma}_1^2(\psi_2) = \\ \begin{pmatrix}\overline{\Gamma}_0^1(\psi_1) & \overline{\Gamma}_0^2(\psi_2)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Gamma_1^1(\phi_1) \\ \Gamma_1^2(\phi_2)\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\overline{\Gamma}_1^1(\psi_1) & \overline{\Gamma}_1^2(\psi_2)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Gamma_0^1(\phi_1) \\ \Gamma_0^2(\phi_2)\end{pmatrix}.\end{gathered}$$

Volíme proto celkové hraniční operátory $(\Gamma_0, \Gamma_1, \mathscr{G})$ takto:

$\Gamma_0(\psi) = (\Gamma_0^1(\psi_1), \Gamma_0^2(\psi_2))$, $\Gamma_1(\psi) = (\Gamma_1^1(\psi_1), \Gamma_1^2(\psi_2))$. Prostor $\mathscr{G} = \mathbb{C}^2$ se standardním skalárním součinem. Věta (8) nám říká, že definiční obor K_s je takového tvaru

$$\mathscr{D}(K_s) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^+) \bigoplus L^2(\mathbb{R}^+) | i(I+U)\begin{pmatrix}\Gamma_0^1(f) \\ \Gamma_0^2(f)\end{pmatrix} = (I-U)\begin{pmatrix}\Gamma_1^1(f) \\ \Gamma_1^2(f)\end{pmatrix}\}.$$

Kde U je unitární matice 2×2. Pro velkou skupinu matic U jsou tyto hraniční podmínky tvořené promícháním hraničních podmínek pro jednotlivé podsystémy. Vzniklý operátor tak nelze napsat jako direktní součet.

Závěr

Tato práce se zaměřila na problematiku samosdružených rozšíření pro symetrické, neomezené operátory v kvantové mechanice. Nejdříve jsou zavedeny základní pojmy týkající se sdružených a symetrických operátorů, které jsou potřebné k Von Neumanovo postupu konstrukce samosdružených rozšíření.

Nadále se hledaly třídy samosdružených rozšíření Hamiltoniánů konkrétních systémů. Nejprve se jednalo o jednoduchý systém kvantové částice vázané na polopřímku. Zde je určeno i spektrum, které pro všechna rozšíření obsahuje všechna kladná čísla a pro některá rozšíření obsahuje právě jedno vlastní číslo. Dále byla uvažována volná částice na ploše s bodovou interakcí v počátku. Zde postup spočíval v převedení problému do sférických souřadnic a rozložení vzniklého systému do jednorozměrných podsystémů. Dále pak nalezení jejich samosdružených rozšíření a poskládání všeho dohromady.

Třetí a nejdůležitější model byl složením předchozích systémů dohromady. Von Neumanova formule dala třídu samosdružených rozšíření generovanou unitárními maticemi 2×2. Navíc novým přínosem této práce bylo využití hraniční trojice k zjednodušenému popisu této třídy rozšíření. Také vyšlo, že popis definičního oboru vzniklého samosdruženého rozšíření je určen mícháním hraničních podmínek jednotlivých podsystémů a nejde tak zapsat jako direktní součin.

V této práci se podařilo dosáhnout stejných výsledků jako ve článku „Quantum motion on a halfline connected to a plane" publikovaném P. Exnerem a P. Šebou [2] a doplnit je o popis pomocí hraničních podmínek.

Pro praktické využití výsledků k popisu skutečných jevů je potřeba určit, která konkrétní matice generuje vhodný Hamiltonián (např. vhodným experimentem.) Pro další zkoumaní tohoto tématu se nabízí modifikace plochy ve třetí kapitole na kruh, který je na rozdíl od nekonečné plochy, k nalezení ve skutečném světě. Další možnost je nahradit polopřímku úsečkou.

Literatura

[1] EXNER, P. a P. ŠEBA. Quantum motion on a half-line connected to a plane. Journal of Mathematical Physics [online]. 1987, 28(2), 386-391 [cit. 2022-06-26]. ISSN 0022-2488. Dostupné z: doi:10.1063/1.527670

[2] EXNER, P. a P. ŠEBA. Quantum motion on a half-line connected to a plane. Journal of Mathematical Physics [online]. 1987, 28(2), 386-391 [cit. 2022-06-26]. ISSN 0022-2488. Dostupné z: doi:10.1063/1.527670

[3] BRÜNING, JOCHEN, VLADIMIR GEYLER a KONSTANTIN PANKRASHKIN. SPECTRA OF SELF-ADJOINT EXTENSIONS AND APPLICATIONS TO SOLVABLE SCHRÖDINGER OPERATORS. Reviews in Mathematical Physics [online]. 2012, 20(01), 1-70 [cit. 2022-06-26]. ISSN 0129-055X. Dostupné z: doi:10.1142/S0129055X08003249

[4] ABRAMOWITZ, M. a I. A. STEGUN. Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. New York: Dover, 1972. Dostupné také z: https://go.exlibris.link/8nkJb1NF

[5] BECKNER, William. Inequalities in Fourier Analysis. The Annals of Mathematics [online]. 1975, 102(1) [cit. 2022-06-26]. ISSN 0003486X. Dostupné z: doi:10.2307/1970980

[6] REED, Michael. Methods of modern mathematical physics. New York: Academic Press, 1972.

[7] TUŠEK, Matěj. Analysis of Two-Dimensional Quantum Models with Singular Potentials. Praha, 2006. Diplomová práce. České vysoké učení technické v Praze. Vedoucí práce Pavel Šťovíček.