

Operátory energie (2)

Na minulé hodině jsme se věnovali operátorům tvaru $-\Delta + V$. V jednorozměrném případě jsme ukázali, že na jistém definičním oboru, který byl zapsán poměrně komplikovaným způsobem, dává tento předpis symetrický operátor, který může a nemusí být samosdružený, ale vždy samosdružené rozšíření má (indexy defektu se shodují).

Ke skutečnosti, že nějaký operátor tvaru volné plus kinetické energie je samosdružený, v mnoha případech lze dospět i jinými cestami, včetně takových, na které teorie z minula nefunguje, zejména na vícerozměrné oblasti. Předvedeme si ve zkratce dvě možné další cesty k tomuto cíli.

Kato–Rellichova věta

Důležitou otázkou v kvantové fyzice je *stabilita samosdruženosti* vůči symetrickým poruchám. Myšlenka ilustrovaná pro Hamiltoniány je jednoduše taková, že $H_0 = P^2$ v jednorozměrném případě, či obecněji

$$H_0 = \sum_{j=1}^n P_j^2, \quad P_j = I \otimes \dots \otimes I \otimes \underbrace{P}_{j\text{-tý člen}} \otimes I \otimes \dots \otimes I \quad (1)$$

na $L^2(\mathbb{R}^n)$ samosdružený je a člen V , jakožto operátor násobení reálnou funkcí $V(x)$, také. Jeho přičtení k H_0 můžeme považovat za poruchu a ptát se, jak velká může být, aniž by součet přestal být samosdružený.

Uvažujme obecněji operátor $A \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$ a poruchu $S \in \mathcal{L}_s(\mathcal{H})$, která má definiční obor alespoň tak velký jako A . První motivační výsledek je jednoduchý: *Je-li S omezený operátor, potom $A + S$ je samosdružený.* Plyne přímo z pravidel pro sdružené operátory, která říkají, že $(A+S)^* \supset A^* + S^*$, a že rovnost nastává, je-li alespoň jeden z operátorů omezený. (Dovětku jsme se příliš nevěnovali, ale již se využíval mimojiné pro $(A - \lambda I)^* = A^* - \lambda^* I$.)

Protože (oboustranně) omezený potenciál je značně silná podmínka, je přirozené ptát se po možných zeslabeních předpokladů. Ukazuje se, že ve skutečnosti stačí, aby S byl takzvaně relativně omezený vůči A (také A -omezený).

Definice. Nechť A a S jsou lineární operátory na \mathcal{H} splňující $D(S) \supset D(A)$. Řekneme, že S je A -omezený s A -mezí $a \geq 0$, pokud existuje $b \geq 0$ takové, že

$$\forall \psi \in D(A): \|S\psi\| \leq a\|A\psi\| + b\|\psi\|. \quad (2)$$

Poznámky:

- a) Tradičně se A -mezí nazývá infimum takových čísel a , ale i toto je vhodná definice.
- b) Podmínka formulovaná s kvadráty norem

$$\exists \tilde{a}, \tilde{b} \geq 0: \forall \psi \in D(A): \|S\psi\|^2 \leq \tilde{a}^2 \|A\psi\|^2 + \tilde{b}^2 \|\psi\|^2 \quad (3)$$

je ekvivalentní v tom smyslu, že infima možných \tilde{a} a \tilde{b} se rovnají.

- c) Nerovnost (3) lze ekvivalentně psát ve tvaru

$$\|S(A - i\tilde{c}I)^{-1}\psi\| \leq \tilde{a}^2 \|\psi\|, \quad (4)$$

kde $\tilde{c} = \tilde{b}/\tilde{a}$, takže S je relativně omezený vůči A právě tehdy, je-li $SR_\mu(A)$ omezený operátor pro nějaké imaginární μ . Takto později definujeme i relativní kompaktnost (v knize komentář k §10.8).

Věta (T. Kato, F. Rellich). Nechť A je samosdružený (resp. v podstatě samosdružený) a S je symetrický, A -omezený operátor s A -mezí ostře menší než 1. Potom $A + S$ je samosdružený (resp. v podstatě samosdružený). Dále je-li A zespoda omezený, je zespoda omezený i $A + S$.

Důkazem se nebudeme zatěžovat, i když není náročný (zájemci viz 7.3.14). Dovětek je v naší učebnici uveden až zvlášť v komentáři k §7.3, kde můžete nalézt i formulaci konkrétního odhadu spodní meze součtu $A + S$.

Ukážeme si raději bezesporu nejpodstatnější aplikaci tohoto teorému.

Coulombův potenciál

Potenciál tvaru $V(\mathbf{x}) = -\alpha/|\mathbf{x}|$, $\alpha > 0$ jistě není omezený, ani zespoda omezený, ukážeme však, že (možná trochu překvapivě) je *relativně* omezený vůči Hamiltoniánu volné trojrozměrné částice, jak vyžaduje Kato–Rellichova věta. Po cestě se poučíme o několika dalších pozorováních.

Lemma 1. Na $L^2(\mathbb{R}^3)$ uvažujme operátor $H_0 = P_1^2 + P_2^2 + P_3^2$. Pak $D(H_0) \subset L^\infty(\mathbb{R}^3) \cap L^2(\mathbb{R}^3)$ a platí

$$\forall a > 0: \exists b > 0: \forall \psi \in D(H_0): \|\psi\|_\infty \leq a\|T\psi\|_2 + b\|\psi\|_2 \quad (5)$$

Důkaz. Operátor H_0 můžeme převést Fourierovou(–Plancherelovou) transformací na operátor násobení funkcí $h(\mathbf{y}) = |\mathbf{y}|^2$ (což potvrzuje i jeho samosdruženost, kterou jsme na začátku ohlásili bez patřičného odůvodnění):

$$H_0 = F_3^{-1}T_hF_3, \quad D(H_0) = F_3^{-1}D_h, \quad D_h = \left\{ \varphi \in L^2(\mathbb{R}^3) \mid \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{y}|^4 |\varphi(\mathbf{y})|^2 d\mathbf{y} < \infty \right\}. \quad (6)$$

Každé $\psi \in D(H_0)$ dokážeme psát jako obraz nějakého $\varphi \in D_h$ při F_3^{-1} , či zpětně $\varphi = F_3\psi \in D_h$. Roznásobme takové φ jednotkou jako

$$\varphi(\mathbf{y}) = \frac{1}{1+h(\mathbf{y})}(1+h(\mathbf{y}))\varphi(\mathbf{y}). \quad (7)$$

Zlomek je L^2 -funkce a zbytek výrazu podle předpokladů také, odsud $\varphi \in L^1(\mathbb{R}^3)$ jakožto součin dvou L^2 funkcí. Potom ovšem platí standardní pravidla Fourierova transformace a $\psi = F_3^{-1}\varphi = \mathcal{F}_3^+\varphi$ je omezená spojitá funkce. Její supremová norma

$$\|\psi\|_\infty \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \|\varphi\|_1 \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \left\| \frac{1}{1+h(\mathbf{y})} \right\|_2 \|(1+h(\mathbf{y}))\varphi(\mathbf{y})\|_2 \leq C(\|\varphi\|_2 + \|T_h\varphi\|_2) = C(\|\psi\|_2 + \|T\psi\|_2), \quad (8)$$

kde v poslední úpravě jsme využili unitaritu F_3 a předpis $F_3^{-1}T_hF_3 = H_0$.

Oproti tvrzení je ještě potřeba doplnit svobodu volby koeficientu před $\|T\psi\|_2$. Za tímto účelem uvažujme funkci

$$\psi_s(\mathbf{x}) := \psi(\mathbf{x}/s), \quad \varphi_s(\mathbf{y}) = (F_3\psi_s)(\mathbf{y}) = s^3\varphi(s\mathbf{y}). \quad (9)$$

Její L^∞ -norma je stejná jako ψ , ale ze substituce v integrálu celkem přímočaře dostaneme pro ostatní normy

$$\|\psi_s\|_2 = s^{3/2}\|\psi\|_2, \quad \|T\psi_s\|_2 = \|T_h\varphi_s\|_2 = s^3s^{-7/2}\|T_h\varphi\|_2 = s^{-1/2}\|T\psi\|_2. \quad (10)$$

Užitím těchto vztahů je možno každý z faktorů před $\|\psi\|_2, \|T\psi\|_2$ v (8) libovolně zmenšovat na úkor druhého. \square

Lemma 2. Operátor násobení T_V libovolnou funkcí $V(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ je relativně omezený vůči H_0 s H_0 -mezí ostře menší než 1.

Důkaz. Uvažujme pro $\psi \in D(H_0)$ funkci $V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$. Podle (5) je to součin L^2 -funkce s funkcí skoro všude omezenou a proto též L^2 . Každou funkci z $D(H_0)$ tedy lze násobit $V(\mathbf{x})$ a neopustit L^2 , proto $D(V) \supset D(H_0)$. Pro normu $T_V\psi$ pak platí

$$\|T_V\psi\|_2 = \sqrt{\int_{\mathbb{R}^3} |V(\mathbf{x})|^2 |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}} \leq \|\psi\|_\infty \sqrt{\int_{\mathbb{R}^3} |V(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}} = \|\psi\|_\infty \|V\|_2, \quad (11)$$

což opět s použitím (5) lze dále odhadnout jako

$$\forall a > 0: \exists b > 0: \|T_V\psi\|_2 \leq (a\|V\|_2)\|T\psi\|_2 + (b\|V\|_2)\|\psi\|_2 \quad (12)$$

a číslo a volit dostatečně malé na to, aby i součin $\|V\|_2 a$ byl stále menší než jedna. \square

Lemma 3. Funkci $V(\mathbf{x}) = -\alpha/|\mathbf{x}|$ lze psát jako součet funkce z $L^2(\mathbb{R}^3)$ a jiné z $L^\infty(\mathbb{R}^3)$.

Důkaz. Rozdělme potenciál na vnitřek a vnějšek jednotkové koule kolem počátku souřadnic. Potom

$$\int_{B_1(0)} V(\mathbf{x})^2 d\mathbf{x} = \int_0^1 \frac{\alpha^2}{r^2} 4\pi r^2 dr = 4\pi\alpha^2, \quad (13)$$

takže singularita v počátku $\propto 1/r$ je (ve **třírozměrném** prostoru) L^2 -integrabilní a $V\chi_{B_1(0)} \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Skutečnost $V\chi_{\mathbb{R}^3 \setminus B_1(0)} \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ je triviální. \square

Potenciálový člen můžeme tedy k Hamiltoniánu volné částice přičíst ve dvou krocích, násobením L^2 -funkcí podle Kato–Rellichovy věty s pomocí lemmatu 2 a násobením L^∞ -funkcí je omezený operátor. Oba kroky zachovávají samosdruženost a spodní omezenost, dostáváme tedy nejen samosdružený Hamiltonián, ale současně víme, že jeho spektrum má spodní mez – toto je podstatný důsledek známý jako argument pro **stabilitu hmoty**.

Protože k H_0 přičítáme vždy operátor s *větším* definičním oborem, v žádném kroku se nezmění a zůstává tak

$$D(H) = D(H_0 + T_V) = D(H_0), \quad (14)$$

který narozdíl od $D(P_f^2)$ dokážeme snadno pojmenovat: je jím $H^2(\mathbb{R}^3)$. Často je praktické pracovat se zúžením na $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ nebo $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$, které jsou oba podmnožinou $D(H)$; na nich je v podstatě samosdružený.

Neomezené seskvilineární formy

Z funkcionální analýzy víte, že na Hilbertových prostorech je jednoznačné zobrazení mezi omezenými operátory B a seskvilineárními formami

$$f_B: \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}: f_B(\varphi, \psi) = (\varphi, B\psi) \quad (15)$$

kde potom f_B je omezená normou $\|B\|$:

$$|f_B(\varphi, \psi)| \leq \|B\| \|\varphi\| \|\psi\|, \quad (16)$$

naopak ke každé omezené seskvilineární formě lze najít operátor B , který k ní má zmíněný vztah.

Stejnou korespondenci zobecníme i mimo doménu omezených operátorů, konkrétně na dualitu mezi *symetrickými, zdola omezenými* operátory a *hustě definovanými, symetrickými, zdola omezenými* formami, tj. seskvilineárními formami $f: D_f \times D_f \rightarrow \mathbb{C}$, kde D_f je hustý podprostor \mathcal{H} a její *číselný obor*

$$\Theta(f) := \{f(\psi, \psi) \mid \psi \in D_f, \|\psi\| = 1\} \quad (17)$$

je podmnožinou \mathbb{R} a má konečné infimum. Množina D_f není definičním oborem f (tím je $D_f \times D_f$), ale občas se tak pro jednoduchost nazývá a značí $D(f)$.

Korespondence mezi formami a operátory je velmi blízká a mnoho vlastností se mezi operátem T a jím generovanou formou $f_T: (\varphi, \psi) \mapsto (\varphi, T\psi)$ se přenáší. Jsou však jisté rozdíly. Ten hlavní spočívá v rozdílné definici, co je uzavřený operátor a uzavřená forma. Uzavřenost symetrické, zdola omezené formy s je definována podmínkou, že zobrazení

$$(\varphi, \psi)_f = (\varphi, \psi) + s_0(\varphi, \psi), \quad (18)$$

kde $s_0(\varphi, \psi) = s(\varphi, \psi) - \inf \Theta_s \cdot (\varphi, \psi)$, určuje skalární součin na \mathcal{H} , vůči němuž je D_s uzavřený.

Do teorie forem nebudeme tolik zabývat, ale někteří autoři ji preferují nad operátory, proto je dobré znát alespoň nejzákladnější body. Středobodem je *věta o reprezentaci*:

Věta (7.5.8 – zkrácená). Nechť s je hustě definovaná, uzavřená, symetrická a zdola omezená forma na \mathcal{H} . Potom existuje **samosdružený** operátor A_s takový, že

- $D(A_s) \subset D_s$, s je uzavěrem formy generované operátorem A_s ,
- operátor A_s je omezený zdola hodnotou $\inf \Theta(s)$.

Mimo to, jestliže jiný operátor A' splňuje podmínky prvního závěru, potom $A' \subset A_s$, tedy samosdružený operátor je jimi určen jednoznačně.

V teorii forem jsou některá odvození snadnější díky možnosti operovat zvlášť na prvním a na druhém argumentu. Například pro symetrický operátor S namísto zkoumání sdruženého operátoru $k S$ a definičního oboru součinu S^*S můžeme jednoduše konstruovat formu $(S\varphi, S\psi)$ na $D(S)$, která automaticky splňuje předpoklady věty o reprezentaci (definiční obor asociovaného operátoru ale bude menší – je jím ve výsledku stejné S^*S !).

Volné Hamiltoniány zpravidla potkáváme v tomto formalizmu jako $(\nabla\varphi, \nabla\psi)$ a potenciálový člen jako $(\varphi, V\psi)$. Tyto dva příspěvky lze pak sečíst ve smyslu forem a uvažovat operátor přiřazený součtu větou o reprezentaci. Je možné najít speciální případy, kdy tento postup dá samosdružený výsledek, i když ani teorie z minula ani Kato–Rellichova věta použít nejdou. Případně je zde možné dokonce uvažovat na místě potenciálu některé (neuzavřené) formy, které odpovídající operátor vůbec nemají. Používá se pak analogie K–R uzpůsobená pro formy, známá jako „KLMN theorem“ podle autorů Kato–Lions–Lax–Milgram–Nelson. My se spokojíme s vědomostí, že něco takového existuje, a detaily přenecháme těm z vás soustředícím se na teorii operátorů ve své studijní specializaci.

Požadavek uzávěru formy je *silnější* než uzavřenost operátoru, a proto teorie forem nabízí vlastní variantu hledání symetrických rozšíření, funkční pro *zdola omezené* operátory, která je založena čistě na provedení tohoto uzávěru.

Věta (Friedrichsovo rozšíření, 7.5.11). Nechť A_0 je symetrický, zdola omezený operátor, nechť s je uzávěr formy generované operátorem A_0 a A_s je samosdružený operátor asociovaný s formou s . Pak

- A_s je samosdruženým rozšířením A_0 , $D(A_0) \subset D(A_s) \subset D_s$,
- $\inf \Theta(A_s) = \inf \Theta(A_0)$.

Princip Friedrichsova rozšíření tak nenabízí volnost nekonečného množství rozšíření daných dříve uvedeným algoritmem (připomeňme, že zdola omezený operátor jistě samosdružená rozšíření má), ale dává z nich pouze jedno, které má mezi nimi jistou speciální pozici. Tou je, že mezi ostatními samosdruženými rozšířeními A_0 je A_s v určitém smyslu maximální. Srovnávat neomezené operátory prostřednictvím \leq je ošidné, ale tato maximalita platí například v následujícím smyslu: pro *pozitivní* A_0 je operátor $(I + A_s)^{-1}$ (což již je omezený, hermitovský operátor) menší nebo roven stejnému výrazu sestavenému pro kterékoli jiné *pozitivní* rozšíření. Pro nepozitivní A_0 bychom si na jeho místě představili A_0 posunutý o $|\inf \Theta(A_0)|$ -násobek identity.

Tímto povídání o hledání *skutečně* samosdružených operátorů pro výrazy, které známe z o2KVAN, opustíme a přejdeme k dalším postulátům kvantové mechaniky.