

## Poloha a hybnost na vymezených systémech

Na minulé hodině jsme zkoumali, před jaké otázky nás staví otázka samosdruženosti nejzákladnějších operátorů – polohy  $Q$  a hybnosti  $P$ . Viděli jsme, že pro částici na přímce tyto operátory jsou samosdružené, stanovíme-li jejich definiční obory jako

$$D(Q) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid x\psi \in L^2(\mathbb{R})\}, \quad D(P) = H^1(\mathbb{R}) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \psi \text{ absolutně spojitá na } \mathbb{R}, \psi' \in L^2(\mathbb{R})\}. \quad (1)$$

Podívejme se, jaké obecné závěry v tomto směru můžeme učinit o dvou trochu jinak definovaných kvantových systémech, kde poloha částice je vymezena na podinterval  $\mathbb{R}$ , konkrétně z jedné nebo obou stran omezený.

### Polopřímka

Věnujme se systému se stavovým prostorem  $\mathcal{H} = L^2(J)$ ,  $J = \langle 0, \infty \rangle$ . Podobně jako pro volnou částici na přímce bychom zde rádi definovali operátory polohy a hybnosti. Můžeme si troufnout odhadnout, jak by měly vypadat:

$$\begin{aligned} Q_+ : D(Q_+) \rightarrow \mathcal{H} : \psi(x) \mapsto x\psi(x), \quad D(Q_+) &= \{\psi \in \mathcal{H} \mid x\psi \in \mathcal{H}\}, \\ P_+ : D(P_+) \rightarrow \mathcal{H} : \psi(x) \mapsto -\psi'(x), \quad D(P_+) &= H^1(J) = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \psi \text{ absolutně spojitá na } J, \psi' \in L^2(J)\} \end{aligned} \quad (2)$$

Zopakujme velmi v rychlosti ověření jejich samosdruženosti.

Postup, který k tomuto závěru dospěl v případě  $L^2(\mathbb{R})$ , byl u obou operátorů uzpůsobený konkrétní situaci, ale jde vysledovat jisté společné znaky:

1. dokázali jsme symetrii (včetně její nutné podmínky – husté definovanosti),
2. vymezili jsme se na funkce  $\psi$  z  $D(T)$ ,  $T = Q$  nebo  $P$  s kompaktním nosičem (u  $Q$  to znamenalo pouze zúžit  $\psi$  na  $K$ , což jsme ani neoznačovali novým operátorem),
3. ukázali jsme, že operátor  $\hat{T}$  zúžený na tuto množinu je stále symetrický,
4. z oslabené podmínky na vektory  $\psi$  s kompaktním nosičem jsme dokázali částečné podmínky na vektory  $\varphi \in D(\hat{T}^*)$ , jejichž sjednocením se ukázalo, že je opět dána podmínka  $D(T)$ ,
5. z rovnic  $\hat{T} \subset \hat{T}^*$  (symetrie  $\hat{T}$ ),  $\hat{T} \subset T$ ,  $T^* \subset \hat{T}^*$  (obecná pravidla pro  $*$ ),  $T \subset T^*$  (symetrie  $T$ ) a nakonec získané  $T = \hat{T}^*$  jsme dedukovali  $T = T^*$ .

Snadno se ujistíme, že symetrie  $Q_+$  ani  $P_+$  nepřináší žádnou překážku. U operátoru  $Q_+$  nemusíme ve zvoleném postupu dělat doslova žádné změny: v bodu 4 se dozvídáme, že na pevně zvolených kompaktních podintervalech  $K \subset J$  funkce  $\varphi$  z definičního oboru  $Q_+^*$  musejí splňovat

$$(Q_+^* \varphi)(x) - x\varphi(x) \stackrel{\text{s.v.}_K}{=} 0 \quad (3)$$

a jediným rozdílem je, že sjednocením uvažovaných  $K$  není  $\mathbb{R}$ , ale  $J = \langle 0, \infty \rangle$ . Pokud potom  $\varphi$ ,  $Q_+^* \psi$  mají být prvky  $\mathcal{H}$ , pak  $x\varphi$  je prvkem  $\mathcal{H}$  a  $\varphi \in D(Q_+)$ .

Zajímavější je případ  $P_+$ . Zde se první změna projeví již v bodu 1, protože rozpisem

$$(P_+ \varphi, \psi) - (\varphi, P_+ \psi) = i \int_0^\infty (\varphi'(x)^* \psi(x) + \varphi(x)^* \psi'(x)) dx = [\varphi(x)^* \psi(x)]_0^\infty, \quad \varphi, \psi \in D(P_+) \quad (4)$$

dospíváme k dodatečné podmínce na symetrii  $P_+$ : funkce musí v konečném krajním bodě konvergovat k hodnotě 0, aby výraz na pravé straně byl nulový. Obecné vlastnosti funkcí z  $H^1(J)$  pouze zaručují, že tato limita existuje, ale že je nulová, plynulo jen v případě nekonečných krajních bodů. Musíme proto **upravit definici**  $P_+$ :

$$D(P_+) = \{\psi \in H^1(J) \mid \psi(0) = 0\}. \quad (5)$$

S tímto opraveným předpisem pokračujeme v původním postupu. Bod 4 nám opět ukáže, že  $\varphi \in D(\dot{P}_+)$  musí být absolutně spojitá na  $\langle 0, \infty \rangle$ , protože na každém kompaktním  $K \subset J^0$  se musí skoro všude absolutně spojitě funkci rovnat, a předpisem  $\dot{P}_+^*$  je

$$(\dot{P}_+^*\varphi)(x) = -i\varphi' \quad (6)$$

na oboru

$$D(\dot{P}_+^*) = \{\varphi \in L^2(J) \mid \varphi \text{ absolutně spojitá na } J, \varphi' \in L^2(J)\} = H^1(J). \quad (7)$$

Tento definiční obor je jiný než  $D(P_+)$ : funkce z něj nemusí splňovat podmínku nuly v krajním bodě! Vskutku, z podmínek kladených na  $\dot{P}_+^*$  plyne absolutní spojitost a příslušnost derivace do  $L^2(J)$ , ale tato dodatečná podmínka nikoli. Odsud  $D(\dot{P}_+^*) \subset H^1$ . Naopak, každá funkce  $\varphi$  volená z  $H^1(J)$  dá v (4) na pravé straně nulu, protože pro  $[\varphi(x)^*\psi(x)]_0^\infty$  stačí nulovost  $\psi(x) \in D(P_+)$ , takže  $H^1 \subset D(\dot{P}_+^*)$ . Takto získaný operátor, který můžeme označit  $\tilde{P}_+ := \dot{P}_+^*$ , je tedy sdruženým operátorem  $P_+$  a protože má větší definiční obor, operátor  $P_+$  *není samosdružený*.

Co hůře, pro symetrický operátor  $P_+$  **neexistuje žádné** samosdružené rozšíření. To je patrné z rozdílu (7) vůči (5): pokud bychom chtěli k  $P_+$  hledat symetrické rozšíření, znamenalo by to do jeho definičního oboru zahrnout nějaký vektor  $\chi$ , který patří do (7), ale do (5) ne, tedy  $\chi(0) \neq 0$ . Někaké takové vektory by tedy muselo obsahovat i hypotetické samosdružené rozšíření  $\tilde{P}_+$ . Ale potom podle (4)

$$(\tilde{P}_+\chi, \chi) - (\chi, \tilde{P}_+\chi) = i[\chi(x)^*\chi(x)]_0^\infty = -i|\chi(0)|^2 \neq 0. \quad (8)$$

Polopřímka tedy **neumožňuje** samosdružený operátor s předpisem odpovídajícím pozorovatelné hybnosti.

## Úsečka

Obraťme nyní svou pozornost na konečný interval  $J = \langle a, b \rangle$ , opět nechť  $\mathcal{H} = L^2(J)$ .

Operátor

$$Q_J: L^2(J) \rightarrow L^2(J): \psi(x) \mapsto x\psi(x) \quad (9)$$

je nyní zcela bez diskuse, protože je omezený a tedy hermitovský. Nic více k jeho samosdruženosti není třeba.

Uvažujme

$$P_J^{(0)}: \psi(x) \mapsto -i\psi'(x) \quad (10)$$

definovaný na množině

$$D(P_J^{(0)}) = \{\psi \in H^1(J) \mid \psi(a) = \psi(b) = 0\}. \quad (11)$$

Zde jsme již, poučení výsledky z minulé sekce, zvolili v krajních bodech podmínku na nulové hodnoty, aby se neopakovala situace, že  $P_J$  nebude symetrický. Současně jsme použili horní index (0), který vypovídá o tom, že očekáváme, že sdružený operátor k  $P_J^{(0)}$  bude nějaký obecnější operátor obsahující  $P_J^{(0)}$  jako vlastní podmnožinu. Tomu skutečně je tak:

$$(P_J^{(0)})^* = \dot{P}_J^* \stackrel{\text{ozn}}{=} \tilde{P}_J: \varphi(x) \mapsto -i\varphi'(x): \quad D(\tilde{P}_J) = H^1(J), \quad (12)$$

kde  $\tilde{P}_J$  opět značí zúžení  $P_J^{(0)}$  na funkce s kompaktním nosičem patřícím do  $(a, b)$ . Argumentace vedoucí k tomuto závěru je zcela identická jako v případě odpovídajícího výsledku (7) na polopřímce a není třeba ji opakovat.

Máme tedy operátor  $P_J^{(0)}$ , který je symetrický, a jeho sdružení  $\tilde{P}_J$ , které symetrické již není, protože

$$(\tilde{P}_J\varphi, \psi) - (\varphi, \tilde{P}_J\psi) = \dots = i[\varphi(x)^*\psi(x)]_a^b = i(\varphi(b)^*\psi(b) - \varphi(a)^*\psi(a)), \quad (13)$$

což může být libovolné číslo, pokud o funkcích  $\varphi, \psi$  nepožadujeme nulovost v krajních bodech. Otázkou tedy je, jestli nelze najít nějaký operátor  $P_J$  dodefinováním  $P_J^{(0)}$  na *některých* vektorech s nenulovými hodnotami v krajních bodech – jehož sdružení bude nějaká část  $\tilde{P}_J$  – tak, abychom zvětšováním jednoho a zmenšováním druhého dosáhli shody a tedy operátoru samosdruženého:

$$P_J^{(0)} \subsetneq P_J \stackrel{?}{=} P_J^* \subsetneq (P_J^{(0)})^* = \tilde{P}_J. \quad (14)$$

Připomeňme jen stručně, že jde skutečně jen o volbu definičního oboru: vztah  $P_J\psi = -i\psi'$  je vynucen  $P_J \subset \tilde{P}_J$ .

Podívejme se za tímto účelem pečlivěji na (13) a dosadíme dva stejné vektory,  $\varphi = \psi$ . Nuly dosáhneme pouze tak, že  $|\psi(b)|^2 = |\psi(a)|^2$ , tedy vektory, na kterých  $P_J^{(0)}$  má cenu zkoušet dodefinovat, musí tuto podmínku splňovat. Přepíšeme ji jako

$$\psi(a) = e^{i\alpha}\psi(b), \quad \alpha \in \mathbb{R} \quad (15)$$

a zkusme k  $P_J^{(0)}$  přidat právě všechny takové vektory pro nějaké pevně zvolené  $\alpha$ . Označme

$$P_\alpha : D(P_\alpha) \rightarrow \mathcal{H} : \psi(x) \mapsto -i\psi'(x), \quad D(P_\alpha) = \{\psi \in H^1 \mid \psi(a) = e^{i\alpha}\psi(b)\}. \quad (16)$$

Jakmile víme, že sdružený operátor k takovému  $P_\alpha$  je součástí  $\tilde{P}_J$ , dá se již hledat mnohem snáze. Vektor  $\varphi \in H^1(J)$  patří do  $D(P_\alpha^*)$  právě tehdy, když

$$\forall \psi \in D(P_\alpha) : (\varphi, P_\alpha \psi) = (P_\alpha^* \varphi, \psi) = (-i\varphi', \psi). \quad (17)$$

Ale protože  $P_\alpha$  je také podmnožinou  $\tilde{P}_J$ , i levá strana rovnosti lze psát pomocí derivace a znovu využít

$$(\varphi, P_\alpha \psi) - (-i\varphi', \psi) = (\varphi, -i\psi') - (-i\varphi', \psi) = \dots = i[\varphi(x)^* \psi(x)]_a^b = i\varphi(b)^* \psi(b) - i\varphi(a)^* \psi(a). \quad (18)$$

Ovšem o funkcích  $\psi \in D(P_\alpha)$  nyní víme o něco víc, vztah (15), a ten můžeme dosadit:

$$\begin{aligned} \varphi \in D(P_\alpha^*) &\Leftrightarrow \forall \psi \in D(P_\alpha) : i\varphi(b)^* \psi(b) - i\varphi(a)^* (e^{i\alpha}\psi(b)) = 0 \\ &\Leftrightarrow \forall \psi \in D(P_\alpha) : (\varphi(b) - e^{-i\alpha}\varphi(a))^* \psi(b) = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

Ovšem podmínka  $\varphi(b) = e^{-i\alpha}\varphi(a)$  je jen jinak zapsaná (15) pro  $\varphi$ , a proto

$$\varphi \in D(P_\alpha^*) \Leftrightarrow \varphi \in D(P_\alpha). \quad (20)$$

Výsledkem dnešní hodiny tedy je, že zatímco na polopřímce operátor hybnosti nelze definovat, na omezeném intervalu jich **nekonečně mnoho** různých, každý za jednu volbu úhlu  $\alpha$ , je samosdruženými rozšířeními  $P_J^{(0)}$ .

## Fyzikální interpretace

Na skutečnou fyzikální interpretaci je z našeho pojetí ještě velice brzy, ale něco již víme z dřívějších semestrů a můžeme se tak ptát, co získané závěry vyjadřují, prozatím alespoň na intuitivní rovině.

Víme, že samosdruženost operátoru je spjata s jeho možností zastupovat nějakou fyzikálně pozorovatelnou veličinu, a jeho vlastní vektory jsou spojeny se stavy, pro které tato veličina má přesně určenou hodnotu. Pro pozorovatelné se spojitým spektrem vlastní vektory neexistují, ale k vlastnosti  $Tx = \lambda x$  se lze alespoň asymptoticky blížit jednotkovými vektory ve smyslu  $\|Tx - \lambda x\| \rightarrow 0$  – to je vlastnost všech normálních operátorů.

Částice na polopřímce vlastní vektory hybnosti *nemůže mít* v žádném smyslu (ani zobecněném), protože z fyziky volné částice víme, že hybnost je zachovávaná veličinou a takový stav by si svou hybnost musel zachovávat ve všech časech budoucích i minulých. To se ovšem neshoduje s vymezením pohybu částice na polopřímce.

Jak uvidíme zanedlouho, hybnost definovaná samosdruženým operátorem v tomto případě neexistuje, ale její druhá mocnina ano. Je tedy možné mluvit o pozorovatelné  $P^2$  (což je úměrné energii takové částice), případně její odmocnině  $|P|$ . Druhé zmíněné souvisí s faktem, že ač konstantní hybnost si částice na polopřímce zachovávat nemůže, konstantní *absolutní hodnotu* hybnosti ano, protože se na koncovém bodě může elasticky odrazit.

Otázky související s definicí hybnosti na úsečce se opírají o podobný argument. Operátory  $P_\alpha$ , ke kterým jsme dospěli, popisují stavy částice, v nichž vlnová funkce v jednom krajním bodě plynule pokračuje ve druhém (nejvýše získá při „přetečení“  $b \rightarrow a$  pevně určenou dodatečnou fázi  $\alpha$ ). Speciálně pro  $\alpha = 0$  jsme tak konstruktivně dospěli k pozorovatelné, která by byla adekvátní popisu pohybu částice na **kružnici**. Uvědomme si, že ze stavového prostoru samotného toto nelze vyčíst –  $L^2(S^1)$  a  $L^2((a, b))$  jsou izomorfní – toto rozlišení se skutečně skrývá až ve volbě operátorů, které přiřadíme pozorovatelným veličinám.

Pro částici, která by skutečně žila na úsečce a na jejích krajích se odrážela, bychom operátor hybnosti nezaváděli. Tím, že vůbec vyžadujeme, aby zavedený byl, skrz rovnici (15) jejím vlastním vektorům, potažmo vlastním vektorům energie apod., a tak celému uvažovanému systému, periodickou okrajovou podmínku vtiskneme.