

Základní propagátory

Volná částice

Uvažujme $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ a Hamiltonián $(2m)^{-1}P^2$, $m > 0$. Z kvantové mechaniky známe propagátor ve tvaru

$$(U(t)\psi)(x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi it}} \int_{\mathbb{R}} e^{im(x-y)^2/(2t)} \psi(y) dy. \quad (1)$$

Podobně jako v jiných případech je tento vzorec ale neoprávněný, pokud $\psi \notin L^1(\mathbb{R})$. Navíc při jeho odvození se zpravidla používá náhrada m za $m + i\varepsilon$ (nebo podobný krok) a limitní přechod. Vzhledem k tomu, že se jedná o poměrně oblíbený trik, bylo by dobré mít představu, jaké je jeho matematické oprávnění.

Funkce

$$U(t) = \exp\left(-it \frac{P^2}{2m}\right) \quad (2)$$

má tvar funkce operátoru P – takové jsme zkoumali, ale podmínkou, aby výsledek šel psát ve tvaru konvolučního operátoru, jak indikuje (1), bylo, aby funkce, do níž se dosazuje, byla L^2 -integrabilní. Právě této podmínky dosáhneme zavedením

$$f_\varepsilon(x) = e^{-i(t-i\varepsilon)x^2/(2m)}, \quad \varepsilon > 0: \quad \int_{\mathbb{R}} |f_\varepsilon(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} e^{-\varepsilon x^2/m} dx < \infty. \quad (3)$$

Pro tyto funkce tedy můžeme psát

$$(f_\varepsilon(P)\psi)(x) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} (Ff_\varepsilon)(y-x) \psi(y) dy \quad (4)$$

Funkce f_ε je současně L^1 -integrabilní a proto můžeme psát

$$(Ff_\varepsilon)(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-iyz} f_\varepsilon(z) dz = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\varepsilon + it}{2m} z^2 - iyz\right) dz = \sqrt{\frac{m}{i(t-i\varepsilon)}} \exp \frac{imy^2}{2(t-i\varepsilon)}. \quad (5)$$

Potom

$$(f_\varepsilon(P)\psi)(x) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t-i\varepsilon)}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{im(y-x)^2}{2(t-i\varepsilon)}\right) \psi(y) dy \quad (6)$$

Bodovou limitou f_ε v $\varepsilon \rightarrow 0_+$ je $e^{-itx^2/(2m)}$, takže operátory $f_\varepsilon(P)$ konvergují k $f(P) = U(t)$ v silné topologii. Proto funkce $f_\varepsilon(P)\psi$, určené vztahem (6), konvergují k $U(t)\psi$ v L^2 -normě. Tato konvergence implikuje existenci posloupnosti $f_{\varepsilon_n}(P)\psi$, $\varepsilon_n \rightarrow 0$, která konverguje bodově skoro všude (poznámka 2.2.2). Pro tuto posloupnost integrandy v (6) splňují předpoklady Lebesgueovy věty (integrabilní majorantou je $|\psi(y)|$) a je tedy možné provést limitu uvnitř integrálu:

$$(U(t)\psi)(x) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \sqrt{\frac{m}{2\pi it}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{im(y-x)^2}{2t}\right) \psi(y) dy \quad (7)$$

(prefaktor konverguje sám). Tím je odvozen vzorec tvaru (1) pro $\psi \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$.

Pro $\psi \in L^2(\mathbb{R}) \setminus L^1(\mathbb{R})$ je možné, podobně jako u Fourier–Plancherelova operátoru, použít aproximaci L^1 -funkcemi a limitu podle středů. K tomuto účelu je možné integrál v (1) zkrátit na omezený interval, jehož konce se budou blížit $\mp\infty$, například $(-n, n)$. Toto odpovídá náhradě $\psi(x)$ za $\psi(x)\chi_{(-n,n)}(x)$. Na místě charakteristické funkce může být výhodné použít nějakou jinou posloupnost funkcí $\eta_n(x)$, které pouze potřebují splňovat

1. $\forall n \in \mathbb{N}: \eta_n(x) \in L^2(\mathbb{R})$,
2. $\forall n \in \mathbb{N}, \forall x \in \mathbb{R}: \eta_n(x) \leq 1$,
3. $\forall x \in \mathbb{R}: \lim_{n \rightarrow \infty} \eta_n(x) = 1$ (stačí s.v.).

Pro získání l.i.m. může být praktické jednotku aproximovat například posloupností hladkých funkcí, zvláště je-li $\psi(x)$ sama hladká. **Prostor funkcí $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ je vůči $U(t)$ invariantní**, což plyne z vyjádření

$$\begin{aligned}(U(t)\psi)(x) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi it}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{im(y-x)^2}{2t}\right) \psi(y) dy \\ &= \sqrt{\frac{m}{it}} e^{imx^2/(2t)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-imxy/t} e^{imy^2/(2t)} \psi(y) dy \\ &= \sqrt{\frac{m}{it}} e(x) \mathcal{F}[e(y)\psi(y)](mx/t); \quad e(x) = e^{imx^2/(2t)},\end{aligned}\tag{8}$$

v němž všechny tři kroky zachovávají $\mathcal{S}(\mathbb{R})$. Je-li tedy třeba hledat limitní vyjádření

$$(U(t)\psi)(x) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi it}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{im(x-y)^2}{2t}\right) \psi(y) \eta_n(y) dy,\tag{9}$$

postačí pro $\psi(x)\eta_n(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ hledat opět mezi hladkými funkcemi, což může výpočet limity výrazně usnadnit.

Harmonický oscilátor

Podobná poznámka jako pro volnou částici platí i pro harmonický oscilátor: vzorec

$$(U(t)\psi)(x) = \begin{cases} \int_{\mathbb{R}} K_t(x, y) \psi(y) dy, & \omega t \in \mathbb{R} \setminus \{n\pi \mid n \in \mathbb{Z}\} \\ K_t(x, y) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi i |\sin(\omega t)|}} \exp\left(\frac{i\omega}{2 \sin(\omega t)} (x^2 \cos(\omega t) - 2xy + y^2 \cos(\omega t)) - \frac{\pi i}{2} \left[\frac{\omega t}{\pi}\right]\right), \\ e^{-i\pi n/2} \psi((-1)^n x) & \text{jinak,} \end{cases}\tag{10}$$

odvozovaný na o2KVANM2, platí (část s integrálem) pouze, pokud $\psi \in L^2(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R})$. Jinak je potřeba psát

$$(U(t)\psi)(x) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} K_t(x, y) \psi(y) \eta_n(y) dy\tag{11}$$

se stejnými požadavky na $\eta_n(x)$ jako u volné částice.

Více rozměrů

Pro $L^2(\mathbb{R}^n)$ a Hamiltonián tvaru součtu operátorů působících pouze v jednotlivých souřadnicích můžeme použít obecnější poučku pro stavové prostory tvaru tenzorového součinu $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$:

Věta. Necht $U_1: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H}_1)$, $U_2: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H}_2)$ jsou SSUG. Pak výraz

$$U: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2): t \mapsto U_1(t) \otimes U_2(t)\tag{12}$$

určuje SSUG na prostoru $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Jsou-li $A_1 \in \mathcal{L}_{\text{sa}}(\mathcal{H}_1)$, $A_2 \in \mathcal{L}_{\text{sa}}(\mathcal{H}_2)$ generátory U_1 , resp. U_2 , je generátorem U operátor

$$A = \overline{A_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes A_2}.\tag{13}$$

Důkaz této užitečné věty (viz 11.1.7) je přímočarý, ale je dobrým procvičením zákonitostí pro tenzorový součin operátorů, které brzy nám přijdou vhod. Provedeme na přednášce.

Poznámka: Pro volnou částici v \mathbb{R}^d můžeme uvítat také přímé zobecnění (9),

$$(U(t)\psi)(\mathbf{x}) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi it}\right)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^n} \exp\left(\frac{im}{2t} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2\right) \psi(\mathbf{y}) \eta_n(\mathbf{y}) d\mathbf{y}\tag{14}$$

kde funkce $\eta_n(\mathbf{y})$ lze volit rovnou v $L^2(\mathbb{R}^d)$, a vyhnout se tak určení l.i.m. d -krát.