

Operátory energie (1)

Kromě případů polohy a hybnosti, se kterými jsme se celkem důkladně seznámili, a spinu, jehož popis je dán maticemi a proto ve všech našich ohledech celkem nezajímavý, je nejdůležitější pozorovatelnou Hamiltonián, tedy operátor energie. Pro částice typicky nabývá tvaru

$$H: \psi(\mathbf{x}) \mapsto -\Delta\psi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) \quad (1)$$

na oboru, který postupně vyšetříme. Dnešní hodinu budeme věnovat jednorozměrnému případu, tedy

$$H: \psi(x) \mapsto \ell[\psi](x) = -\psi''(x) + V(x)\psi(x). \quad (2)$$

O funkci V budeme předpokládat, že je *reálná* a L^1_{loc} -*integrabilní* na nějakém intervalu $I := (a, b)$, kde umožníme $-\infty \leq a < b \leq +\infty$.

Vyšetříme nejprve zřejmá omezení. Stejně jako u diferenciálního $-i d/dx$ obecně rovnice

$$\int_a^b \ell[\varphi](x)^* \psi(x) dx \stackrel{?}{=} \int_a^b \varphi(x)^* \ell[\psi](x) dx \quad (3)$$

nemá žádný důvod platit u funkcí, které neumožňují integrovat per partes. Jsme nuceni začlenit podmínku absolutní spojitosti, a to do první derivace, aby výrazy vůbec šlo touto cestou porovnat. Označme pro interval I

$$AC^1(I) = \{f: I \rightarrow \mathbb{C} \mid f \text{ i } f' \text{ jsou absolutně spojitě v } I\} \quad (4)$$

(nejedná se o ustálené označení). Na této množině lze pro rovnici (3) říci

$$\int_c^d (\ell[\varphi](x)^* \psi(x) - \varphi(x)^* \ell[\psi](x)) dx = \int_c^d (\varphi''(x)^* \psi(x) - \varphi(x)^* \psi''(x)) dx = \int_c^d ((\varphi'(x)^* \psi(x))' - (\varphi(x)^* \psi'(x))') dx \quad (5)$$

a protože součin absolutně spojitých funkcí v obou závorkách napravo je absolutně spojitý, je

$$\int_c^d (\ell[\varphi](x)^* \psi(x) - \varphi(x)^* \ell[\psi](x)) dx = [\varphi'(x)^* \psi(x) - \varphi(x)^* \psi'(x)]_c^d \quad (6)$$

pro všechny podintervaly $\langle c, d \rangle \subset (a, b)$.

Rozšíření validity rovnosti (6) i do některého z krajních bodů, například $d = b$, je možné za podmínky, že

- tento krajní bod je konečný,
- že funkce $V(x)$ je až do této meze integrabilní,
- že funkce φ, ψ a jejich derivace bereme spojitě i v tomto bodě.

Krajní bod splňující první dvě podmínky se nazývá *regulární* a třetí bod můžeme zapsat tak, že $\varphi, \psi \in AC^1(\tilde{I})$, kde \tilde{I} značí I rozšířený o své regulární krajní body. Rovnice (6) pak platí pro všechna $\langle c, d \rangle \subset \tilde{I}$.

Pro singulární krajní body levá ani pravá strana (6) nemusejí existovat ani ve smyslu limit $c \rightarrow a_+$, resp. $d \rightarrow b_-$, ale existence je *zaručena*, pokud doplníme obor $AC^1(\tilde{I})$ o požadavek L^2 -integrability ve tvaru

$$\tilde{D} := \{\psi \in AC^1(\tilde{I}) \cap L^2(I) \mid \ell[\psi] \in L^2(I)\}, \quad (7)$$

protože potom funkce na levé straně (6) je L^1 -integrabilní na (a, b) . Dá se také odvodit, že pro funkce $\psi \in \tilde{D}$ integrál

$$\int_I (V(x)|\psi(x)|^2 + |\psi'(x)|^2) dx \quad (8)$$

konverguje, což v případě $V(x)$ **zespoda omezené** také implikuje $\psi' \in L^2(\mathbb{R})$. Potom můžeme psát \tilde{D} jako podmnožinu $H^2(I)$ vymezenou podmínkou $\ell[\psi] \in L^2(I)$ – zejména pro $V = 0$ je $\tilde{D} \equiv H^2(I)$ a operátor $H: \psi \mapsto -\psi''$ definovaný na tomto prostoru je jednoduše P^2 . Zajímat nás více budou situace s nenulovým potenciálem.

Operátor \tilde{H} definovaný předpisem (2) na oboru $D(\tilde{H}) = \tilde{D}$ je obecně nesymetrický; stejně jako u snahy definovat P na $H^1(I)$, $I \subsetneq \mathbb{R}$ narážíme na to, že pravé strany (6) mohou být nenulové. Hlavním rozdílem je, že ani $I = \mathbb{R}$ nemusí zaručit maximalitu.

Uvedeme si zde hlavní výsledky kapitoly 8.5.

Pro zkoumání možností nalezení samosdruženého operátoru s předpisem (2) je výchozím bodem opět konstrukce symetrického zúžení \tilde{H} , které má stále \tilde{H} za sdružený operátor. Za jeho definiční obor můžeme podobně jako dříve brát

$$D(\tilde{H}) := \{\psi \in D(\tilde{H}) \mid \text{supp } \psi \text{ je kompaktní uvnitř } (a, b)\}. \quad (9)$$

Platí pro něj

Věta (8.5.5). Pro libovolný interval (a, b) a funkci V splňující naše základní předpoklady určuje výraz

$$\tilde{H}: D(\tilde{H}) \rightarrow \mathcal{H}: \psi(x) \mapsto \ell[\psi](x) \quad (10)$$

symetrický operátor splňující $(\tilde{H})^* = \tilde{H}$. Jeho indexy defektu jsou $n_+(\tilde{H}) = n_-(\tilde{H}) = n$, kde $n \in \{0, 1, 2\}$.

Postup odvození, že podmínka pro sdružený operátor dává operátor \tilde{H} , je podobný jako v případě derivace prvního řádu (hybnosti), ale vstupuje do něj dosazení řešení η rovnice $\ell[\eta] = \varphi$ (vzpomeňte si, že při hledání sdruženého operátoru \tilde{P} jsme také museli integrovat!), které je mimo rámec našeho předmětu.

Zajímavý je výsledek zmiňující indexy defektu, protože ty mají okamžitý význam pro naši teorii symetrických rozšíření. Jakmile ale máme $(\tilde{H})^*$, jejich předpověď ale je snadnou částí důkazu, proto ji ve zkratce zreplicujeme:

- Hodnoty $n_\pm(\tilde{H})$ udávají počet lineárně nezávislých řešení $(\tilde{H} \pm iI)\psi = \psi$ v prostoru \tilde{D} , což je rovnice $\psi''(x) = (V(x) \pm i)\psi(x)$.
- Bez dodatečných podmínek $\psi \in L^2(I)$, $\ell[\psi] \in L^2(I)$ jdou lineárně nezávislá řešení takové rovnice najít právě dvě: vycházející z nějakého bodu $c \in (a, b)$ je vytknou počáteční podmínky například $\psi_1(c) = 1$, $\psi_1'(c) = 0$ a $\psi_2(c) = 0$, $\psi_2'(c) = 1$.
- Pro řešení ψ této rovnice je $\ell[\psi] \in L^2(I)$ právě tehdy, kdy $\psi \in L^2(I)$, stačí tedy zkoumat jednodušší z podmínek. Dodatečná podmínka způsobí, že jen některá řešení „platí“, a proto n_\pm může být i méně než 2.
- Je-li ψ řešením $\psi''(x) = (V(x) \pm i)\psi(x)$, je ψ^* současně řešením $\psi''(x)^* = (V(x)^* \mp i)\psi(x)^*$ a L^2 -integrabilitu komplexní sdružení neovlivňuje. Rovnice s $+i$ má tedy stejný počet řešení v \tilde{D} jako s $-i$, odkud plyne rovnost $n_- = n_+$.

O indexech defektu můžeme v některých případech říci i více.

- V případě obou krajů a, b **regulárních** (tj. omezený interval $I = (a, b)$ s $V \in L^1(I)$) jsou indexy defektu \tilde{H} rovny $(2, 2)$. To je proto, že podmínka $\psi \in L^2((a, b))$ je pro $\psi \in AC^1((a, b))$ automaticky splněna. (8.5.4)
- Pokud je **jeden** krajní bod **singulární**, mohou indexy defektu být $(2, 2)$ nebo $(1, 1)$. (8.5.9)

Abychom získali představu, jakým směrem se budou ubírat symetrická rozšíření \tilde{H} , podívejme se na jeho uzávěr. Jamile máme k \tilde{H} sdružený operátor a symetrii, najde se už celkem snadno:

$$\begin{aligned} \varphi \in \overline{D(\tilde{H})} = \overline{D((\tilde{H}^*)^*)} = \overline{D((\tilde{H})^*)} &\Leftrightarrow \varphi \in \tilde{D} \wedge \forall \psi \in D(\tilde{H}): (\varphi, \tilde{H}\psi) = (\tilde{H}\varphi, \psi) \\ &\Leftrightarrow \varphi \in \tilde{D} \wedge \forall \psi \in \tilde{D}: [\varphi'(x)^*\psi(x) - \varphi(x)^*\psi'(x)]_a^b = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

Zde jsme využili toho, že již nemusíme psát $\exists \eta \in \mathcal{H}$: pokud existuje, jedná se o obraz φ při $(\tilde{H})^*$, tím je ale $\tilde{H}\varphi$ ($\tilde{H} \subset \tilde{H} \Rightarrow \tilde{H} \supset (\tilde{H})^*$). A pro dvojici funkcí z \tilde{D} pak již platí (6), a to včetně krajních bodů a a b .

Definiční obor uzávěru $H = \overline{\tilde{H}}$ je tedy určen předpisem

$$D(H) = \{\varphi \in \tilde{D} \mid \forall \psi \in \tilde{D}: [\varphi'(x)^*\psi(x) - \varphi(x)^*\psi'(x)]_b - [\varphi'(x)^*\psi(x) - \varphi(x)^*\psi'(x)]_a = 0\}. \quad (12)$$

Pro každý **regulární** krajní bod, řekněme a , se odpovídající část (12) zjednoduší na

$$\varphi(a) = 0 \wedge \varphi'(a) = 0 \quad (13)$$

díky nezávislé možnosti volby $\psi(a)$ a $\psi'(a)$, ale podmínka

$$\forall \psi \in \tilde{D}: [\varphi'(x)^* \psi(x) - \varphi(x)^* \psi'(x)]_b = 0 \quad (14)$$

pro **singulární** krajní bod může a nemusí být pro φ omezující, podle vlastností potenciálu $V(x)$ (může se stát, že je splněna již samotnou náležitostí φ do \tilde{D}). To je, zjednodušeně řečeno, důvodem, proč defektní prostory mohou pro různá $V(x)$ za jinak stejných podmínek být různě velké. Od tohoto momentu dále může skutečně rozhodnout až řešení konkrétních diferenciálních rovnic.

Zvláštní výjimku tvoří – ve fyzice celkem běžná – situace, kdy potenciál $V(x)$ je **zdola omezená funkce**. Zde, jak jsme zmínili dříve, z podmínky $\psi \in \tilde{D}$ plynou ještě vlastnosti

$$\int_I V(x) |\psi(x)|^2 dx < \infty, \quad \int_I |\psi'(x)|^2 dx < \infty \quad (\text{tedy } \psi' \in L^2(I)). \quad (15)$$

Funkce $\varphi'(x)^* \psi(x) - \varphi(x)^* \psi'(x)$, kde $\varphi, \psi \in \tilde{D}$ pak náleží do $L^1(I)$ a jakožto taková splňuje

$$\int_I |\varphi'(x)^* \psi(x) - \varphi(x)^* \psi'(x)| dx < \infty. \quad (16)$$

V žádném **nekonečném** krajním bodě potom není jiná možnost, než že limita $\varphi'(x)^* \psi(x) - \varphi(x)^* \psi'(x)$ je nulová, a *každá* funkce $\varphi \in \tilde{D}$ potom splňuje odpovídající podmínku (14) (v bodě a nebo b). Proto pro zdola omezený potenciál $V(x)$ na \mathbb{R} není rozdíl mezi $D(H)$ a $D(\tilde{H})$ a dostáváme tak *automaticky samosdružený operátor* $H = \tilde{H}$ na oboru

$$D(H) = \tilde{D} = \{\psi \in H^2(\mathbb{R}) \mid \ell[\psi] \in L^2(\mathbb{R})\}. \quad (17)$$

Příkladem tohoto silného závěru je (jednorozměrná, připomeňme) volná částice i lineární harmonický oscilátor.

Samosdružená rozšíření v regulárním případě

V případě regulárního intervalu, tj. *konečného* $I = (a, b)$, na němž je $V(x) \in L^1(I)$ (nejen L^1_{loc}), můžeme samosdružená rozšíření H charakterizovat pomocí *okrajových podmínek*. V knize je tomu věnována značná část kapitoly 8.6, ale my jsme již dva příklady toho, jak se rozšíření projeví podmínkami pro hodnoty či derivace funkcí v krajních bodech, viděli již na cvičení, a můžeme tak apelovat na analogii a říci pouze hlavní výsledky.

Každé samosdružené rozšíření H' operátoru H je v tomto případě určeno dvojicí lineárně nezávislých vektorů η_1, η_2 z $K := K_- + K_+$, které se rozhodneme k definičnímu oboru $D(H)$ přidat skrz druhou von Neumannovu formuli

$$D(H') = D(H) + (I - V)K_- \quad (\subset \tilde{D}) \quad (18)$$

prostřednictvím volby $V: K_- \rightarrow K_+$. Tyto funkce nepatří do $D(H)$ a jakožto takové mají nenulové hodnoty a /nebo derivace v bodech a, b . Lze však o nich říci následující, a tím efektivně konstrukci s V obejít:

- Čtveřice hodnot $(\eta(a), \eta'(a), \eta(b), \eta'(b))$ získaných pro η_1 a pro η_2 jsou lineárně nezávislé. Pokud by tomu tak nebylo, uvažujme netriviální lineární kombinaci $\alpha_1 \eta_1 + \alpha_2 \eta_2$, pro kterou by se hodnoty i derivace současně vynulovaly. Taková funkce ovšem patří do $D(H)$, což je spor s jednoznačností rozkladu (18).
- Abychom přidáním η_1, η_2 neporušili symetričnost rozšířeného operátoru, musejí splňovat

$$[\eta_j'(x)^* \eta_k(x) - \eta_j(x)^* \eta_k'(x)]_a^b = 0, \quad j, k \in \{1, 2\}. \quad (19)$$

(Každá z nich s každou funkcí z $D(H)$ toto splňuje, ale funkce z K vzájemně mezi sebou obecně ne. Dokonce ani η_1 či η_2 sama se sebou by tuto závorku nemusela mít nulovou, jedná se po rozpisu o hodnotu $2i \operatorname{Im} (\eta_j(b) \eta_j'(b)^* - \eta_j(a) \eta_j'(a)^*)$).

- Soustava rovnic

$$[\eta'_k(x)^* \varphi(x) - \eta_1(x)^* \varphi'(x)]_a^b = 0, \quad k = 1, 2 \quad (20)$$

je nyní (spolu se základním předpokladem $\varphi \in \tilde{D}$) nutnou a postačující podmínkou pro $\varphi \in D(H')$ a hodnotu $H'\varphi$ jednoznačně vymezuje $H' \subset \tilde{H}$.

Poslední rovnice (20) je ale dvojicí lineárních podmínek tvaru

$$\alpha_k \varphi(a) - \beta_k \varphi'(a) = \gamma_k \varphi(b) - \delta_k \varphi'(b), \quad k = 1, 2, \quad (21)$$

kde $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ reprezentují patřičné hodnoty a derivace funkcí η_1, η_2 v komplexním sdružení.

Každé samosdružené rozšíření je tedy určeno nějakou vazbou mezi hodnotami a derivacemi $\varphi(x)$ v bodech a a b . Podívejme se, jaké všechny takové vazby je takto možné získat. Pro tento účel do (21) dosadíme za φ samotné η_1 a η_2 , protože podle (19) pro ně musí být také splněny. Různými kombinacemi dostáváme tři nezávislé podmínky

$$\begin{aligned} \alpha_1 \beta_1^* - \beta_1 \alpha_1^* &= \gamma_1 \delta_1^* - \delta_1 \gamma_1^* \\ \alpha_1 \beta_2^* - \beta_1 \alpha_2^* &= \gamma_1 \delta_2^* - \delta_1 \gamma_2^* \\ \alpha_2 \beta_2^* - \beta_2 \alpha_2^* &= \gamma_2 \delta_2^* - \delta_2 \gamma_2^* \end{aligned} \quad (22)$$

Tyto podmínky jsou tedy nutné, ale dá se ukázat, že i postačující: každá dvojice lineárních vazeb tvaru (21) splňující (22) je indukována nějakými η_1, η_2 (věta 8.6.4).

Jedním příkladem takových podmínek je *periodická okrajová podmínka* $\varphi(a) = \varphi(b), \varphi'(a) = \varphi'(b)$, spojující body a a b topologicky do kružnice, a její úprava tvaru $\varphi(a) = e^{i\alpha} \varphi(b), \varphi'(a) = e^{i\theta} \varphi'(b)$, rozšiřující podmínku nalezenou pro P na konečném intervalu. V těchto případech při $V = 0$ skutečně $H = P_\alpha^2$. Samosdružených Hamiltoniánů je ale více a existují i takové, které neodpovídají druhé mocnině žádného operátoru hybnosti.

Speciální místo mezi podmínkami takového tvaru mají *separované okrajové podmínky*, které dávají zvlášť omezení pro bod a a zvlášť pro b . Jsou tedy tvaru

$$\begin{aligned} \alpha_1 \varphi(a) - \beta_1 \varphi'(a) &= 0, \\ 0 &= \gamma_2 \varphi(b) - \delta_2 \varphi'(b) \end{aligned} \quad (23)$$

s nepoužitými koeficienty nulovými. Dosazením do (22) dostáváme omezení

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 \beta_1^* - \beta_1 \alpha_1^* &= 0, \\ \gamma_2 \delta_2^* - \delta_2 \gamma_2^* &= 0 \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \frac{\alpha_1}{\beta_1}, \frac{\gamma_2}{\delta_2} \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}. \quad (24)$$

Jedná se tedy v každém z krajních bodů o podmínky závislosti mezi hodnotou a derivací $\varphi(x)$ s reálnými koeficienty. Krajními případy jsou vazby $\varphi(a) = 0$ (Dirichletova podmínka – „pevný konec“) nebo $\varphi'(a) = 0$ (Neumannova podmínka – „volný konec“), mezi kterými můžeme vybírat z kontinua předpisů odpovídajícím různým odrazům vlny od kraje.

Ačkoli jsme tyto výsledky uvedli pro případ $I = (a, b)$ s oběma konci regulárními, poslední zjištění lze uzpůsobit i pro $I = (a, +\infty)$ s regulárním bodem a , pokud dokážeme zajistit indexy defektu $(1, 1)$, například omezeností potenciálu (věta 8.6.7). Samosdružené Hamiltoniány na polopřímce jsou tedy vzájemně jednoznačně vymezeny jednou odrazovou podmínkou tvaru $\alpha \varphi(a) = \beta \varphi'(a)$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ ve svém regulárním konci a .