

## K nekonzervativním systémům

Není mnoho, co by šlo o nekonzervativních systémech říci v takové obecnosti, s jakou máme vysloveny výsledky z minula pro konzervativní. Myšlenkou v podstatě je v nějakém smyslu zintegrovat Schrödingerovu rovnici. Aby taková myšlenka vůbec dávala smysl, budeme potřebovat zavést integrál z vektorové funkce.

### Bochnerův integrál

Myšlenka integrace vektorové funkce podle číselné míry neobsahuje žádné kroky, které jsme neviděli použité již u integrace komplexní funkce podle projektorové míry, postup si tedy jen v rychlosti zopakujeme. I když by šlo pracovat na libovolném měřitelném prostoru  $(X, \mathcal{d}\mu)$ , zůstaneme u  $\mathbb{R}$  a Lebesgueovy míry  $\lambda$ , zobecnění je nasnadě.

Nechť  $\mathcal{X}$  je Banachův prostor. Pro jednoduché (vektorové!) funkce

$$\sigma(x) = \sum_{j=1}^n \chi_{M_j}(x) y_j, \quad (1)$$

kde  $M_j$  jsou vzájemně disjunktní borelovské množiny a  $y_j$  vzájemně různé prvky  $\mathcal{X}$ , definujeme

$$\int_{\mathbb{R}} \sigma(x) dx := \sum_{j=1}^n \lambda(M_j) y_j. \quad (2)$$

Dostáváme tak lineární zobrazení z (lineárního) prostoru jednoduchých funkcí do  $\mathcal{X}$ , splňující

$$\left\| \int_{\mathbb{R}} \sigma(x) dx \right\| \leq \int_{\mathbb{R}} \|\sigma(x)\| dx. \quad (3)$$

Na základě této spojitosti dokážeme integrál rozšířit na funkce  $f(x)$ , ke kterým je možno se blížit posloupností jednoduchých funkcí  $(\sigma_n)_{n \in \mathbb{N}}$  ve smyslu

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sigma_n(t) = f(t) \text{ s.v. na } \mathbb{R} \quad \wedge \quad \int_{\mathbb{R}} \|f(x) - \sigma_n(x)\| dx \rightarrow 0 \quad (4)$$

(pozor na to, že první limita je v topologii  $\mathcal{X}$ ). Množina takových funkcí tvoří lineární prostor, můžeme ji označit  $\Phi_{\mathcal{X}}$ . Pro každé  $f \in \Phi_{\mathcal{X}}$  potom definujeme **Bochnerův integrál** vztahem

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) dx := \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} \sigma_n(x) dx, \quad (5)$$

o kterém se snadno ukáže, že na volbě aproximující posloupnosti  $(\sigma_n)$  nezávisí.

Je jednoduché ukázat, že pro každou borelovskou množinu  $M$  a funkci  $f \in \Phi_{\mathcal{X}}$  je také součin  $f(x)\chi_M(x) \in \Phi_{\mathcal{X}}$ . Pomocí této součinné funkce definujeme Bochnerův integrál na podmnožinách  $\mathbb{R}$  jako

$$\int_M f(x) dx := \int_{\mathbb{R}} f(x)\chi_M(x) dx. \quad (6)$$

**Poznámka:** Pokud porovnáme s konstrukcí integrace podle projektorové míry, nebyl zde potřeba mezikrok odpovídající omezeným funkcím. Zásadní rozdíl je v porovnání vztahů pro normu získaného výrazu, tj. vektoru z  $\mathcal{X}$

$$\left\| \int_{\mathbb{R}} \sigma(x) dx \right\| \leq \int_{\mathbb{R}} \|\sigma(x)\| dx, \quad (7)$$

s podobným odhadem pro integrál číselné funkce  $\sigma(x) = \sum_{j < n} \alpha_j \chi_j$  podle projektorové míry, tj. operátoru

$$\left\| \int_X \sigma(x) dE(x) \right\| = \max_{j < n} |\alpha_j|. \quad (8)$$

Zatímco ve druhém případě odhad zaručuje konvergenci levé strany pro *stejněměrně* konvergující posloupnost jednoduchých funkcí, v prvním postačuje konvergence posloupnosti funkcí  $\|\sigma_n\|$  v  $L$ -prostoru. Současná bodová konvergence hodnot  $\sigma_n(x)$  je požadavkem pro to, aby integrál nezávisel na volbě posloupnosti.

Bochnerův integrál splňuje několik pěkných vlastností:

- jedná se o lineární zobrazení  $\Phi_{\mathcal{X}}$  do  $\mathcal{X}$ ,
- $\left\| \int_{\mathbb{R}} f(x) dx \right\| \leq \int_{\mathbb{R}} \|f(x)\| dx$ ,
- pro omezené lineární zobrazení  $B: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$  platí  $B \circ f \in \Phi_{\mathcal{Y}}$  a

$$\int_{\mathbb{R}} B(f(x)) dx = B\left(\int_{\mathbb{R}} f(x) dx\right). \quad (9)$$

Za prostor  $\mathcal{X}$  můžeme volit například Hilbertův prostor a integrovat vektorové funkce, ale Banachovým prostorem je například také  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  a dostáváme integrál operátorů závislých na  $x$ .

Pro použití Bochnerova integrálu je největší překážkou „kostrbatost“ podmínek (4). Jistě v aplikacích nebudeme chtít každou funkci aproximovat jednoduchými funkcemi. Dá se ukázat, ač trochu náročně, že první požadavek má za postačující podmínku, že funkce  $f(x)$  je spojitá a má vlastní limity v obou nekonečnách (v knize cvičení 3/38). Druhou z podmínek (4) můžeme, pokud první platí, nahradit snadněji ověřitelným požadavkem

$$\int_{\mathbb{R}} \|f(x)\| dx < \infty, \quad (10)$$

tj.  $\|f(x)\| \in L^1(\mathbb{R})$  jakožto funkce  $x$  (3.7.4c). V praxi budeme vždy využívat právě tato alternativní vyjádření.

## Dysonův rozvoj

Právě integrál vektorové funkce nám pomůže vyjádřit unitární propagátor ze Schrödingerovy rovnice s časově závislým Hamiltoniánem.

**Věta** (Dysonův rozvoj, 17.5.1). Nechť  $H: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$  je silně spojitá funkce, jejíž hodnoty jsou hermitovské operátory. Potom existuje unitární propagátor  $U(t, s)$  takový, že pro libovolná  $t, s \in \mathbb{R}$  a  $\varphi \in \mathcal{H}$  má rovnice

$$i \frac{d}{dt} \psi_t = H(t) \psi_t \quad (11)$$

s počáteční podmínkou  $\psi_s = \varphi$  řešení tvaru vektorové funkce  $\psi_t = U(t, s)\varphi$ . Přitom platí

$$\begin{aligned} \psi_t &= \sum_{n=0}^{\infty} U_n(t, s)\varphi, \\ U_0(t, s) &= I, \quad U_n(t, s)\varphi = (-i) \int_s^t H(t') U_{n-1}(t', s)\varphi dt', \quad \forall n \in \mathbb{N}, \end{aligned} \quad (12)$$

přičemž řada takto určených *operátorů*  $\sum_{n=0}^{\infty} U_n(t, s)$  konverguje k  $U(t, s)$  ve smyslu operátorové normy.

**Poznámka:** Potřeba psát rovnice (12) ve formě rovnosti operátorů působících na vektor, přestože jsou všechny omezené, je právě v tom, aby v Bochnerově integrálu vystupovala spojitá funkce získaná akcí *silně* spojitého  $H(t)$  na vektor. Pokud si můžeme dovolit zesílit požadavek na spojitost  $H(t)$  v *operátorové normě*, potom lze rovnici psát pro operátory samotné:

$$U_n(t, s) = (-i) \int_s^t H(t') U_{n-1}(t', s) dt'. \quad (13)$$

Dysonův rozvoj se také potkává v plně rozepsaném tvaru jako

$$U_n(t, s)\varphi = (-i)^n \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \dots \int_s^{t_{n-1}} dt_n (H(t_1) \dots H(t_n)\varphi) \quad (14)$$

a jedná se o jeden ze základních nástrojů kvantové mechaniky.

Při pohledu na vyslovenou větu okamžitě identifikujeme zcela zásadní limitující faktor: požadavek  $H(t) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Kvantové Hamiltoniány zpravidla jsou neomezené operátory a věta potom nelze použít. Je rozsáhlým tématem celé teorie, za jakých podmínek to možné je. Uvedeme jednu myšlenku v tomto směru.

### Převod do Diracova obrazu

Může se stát, že za neomezenost Hamiltoniánu je „zodpovědná“ jeho kinetická část  $P^2$  a potenciál  $V$  již omezený operátor je, přičemž naopak celá časová závislost se skrývá v něm. V takovém případě můžeme využít přechodu do Diracova pojetí časového vývoje, kde za  $H_0$  zvolíme časově nezávislý operátor  $P^2$  a rovnici Schrödingerova tvaru sestavíme s operátorem

$$V^{(D)}(t) = \exp(i(t-s)H_0)V(t)\exp(-i(t-s)H_0) =: U_0(s,t)V(t)U_0(t,s), \quad (15)$$

který již omezený je. Potom, pokud je funkce  $V^{(D)}(t)$  i silně spojitá, Dysonův rozvoj použit již můžeme a získaný průběh  $\psi_t^{(D)}$  převedeme zpět do Schrödingerova obrazu.

Možná komplikace v popsaném postupu je, že časový vývoj může opustit  $D(H_0)$ , takže ač máme řešení rovnice

$$i \frac{d}{dt} \psi^{(D)}(t) = V^{(D)}(t) \psi^{(D)}(t), \quad (16)$$

tvaru

$$\psi^{(D)}(t) = U^{(D)}(t,s) \psi_s, \quad (17)$$

vektorová funkce

$$\psi_t = U_0(t,s) U^{(D)}(t,s) \psi_s \quad (18)$$

nemusí být řešením rovnice

$$i \frac{d}{dt} \psi_t = (P^2 + V) \psi_t \quad (19)$$

a tedy ve skutečnosti nevyhovovat postulátu časového vývoje ve formě, v jaké je vysloven.

Ukazuje se, že postačující podmínkou pro použitelnost Dysonova rozvoje v tomto duchu je, pokud (stále omezený) člen  $V(t)$  má silně spojitou derivaci, tj. pro všechna  $\varphi \in \mathcal{H}$  a všechna  $t$  existuje  $d/dt V(t)\varphi$  a operátorová funkce touto relací definovaná je silně spojitá v parametru  $t$  (17.5.3–5, v knize bez důkazu).

Po rozepsání Dysonova rozvoje v operátoru (15) zpět do Schrödingerova obrazu dle (18), vyhodnocení  $V^{(D)}(t)$  zpět pomocí  $V(t)$  a použití „navazovacích“ vlastností propagátoru dostáváme poměrně známou řadu

$$\begin{aligned} \psi_t &= U_0(t,s) \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_s^t dt_1 \dots \int_s^{t_{n-1}} dt_n V^{(D)}(t_1) \dots V^{(D)}(t_n) \psi_s \\ &= U_0(t,s) \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_s^t dt_1 \dots \int_s^{t_{n-1}} dt_n U_0(s,t_1) V(t_1) U_0(t_1,s) U_0(s,t_2) \dots U_0(t_{n-1},s) U_0(s,t_n) V(t_n) U_0(t_n,s) \psi_s \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_s^t dt_1 \dots \int_s^{t_{n-1}} dt_n U_0(t,t_1) V(t_1) U_0(t_1,t_2) \dots U_0(t_{n-1},t_n) V(t_n) U_0(t_n,s) \psi_s, \end{aligned} \quad (20)$$

kde

$$U_0(t,s) = e^{-i(t-s)H_0}. \quad (21)$$