

Pár poznámek o konvenci a značení

Budeme se snažit používat podobný formalismus jako funkcionální analýza, občas poněkud uvolněný v místech, kde půjde více o obsah sdělení než o jeho plnou matematickou „neprůstřelnost“.

V celém předmětu bude **bez výjimky** platit

operátor	$\equiv$	lineární operátor,
projektor	$\equiv$	ortogonální projektor,
posloupnost	$\equiv$	nekonečná posloupnost,
spočetný	$\equiv$	spočetně nekonečný.

Některé budoucí otázky výrazně zjednoduší, zavedeme-li několik jednoduchých nástrojů teorie množin.

Ordinální čísla

Nechť $n \in \mathbb{N}_0$. Relací $m < n$, bez další specifikace významu symbolu m , budeme rozumět enumeraci od nuly do $n - 1$. Zavést tuto konvenci (indexaci od nuly) namísto běžnějšího počítání $1 \dots n$ má hlavní výhodu v tom, že jakmile n je první spočetný ordinál ω , tvar výrazů např.

$$\sum_{m < \omega} (\dots), \quad (x_m)_{m < \omega}, \quad \forall m < \omega: \quad \text{apod.} \quad (1)$$

se nemusí nijak změnit, aby fungoval jako součet, seznam, kvantifikace apod. přes všechna přirozená čísla (s nulou). Jestliže v tomto kontextu použijeme (jak je tradiční) symbol ∞ , má stejný význam jako ω . Při sčítání od jedné bychom museli rozlišovat, zda horní mez zahrnout či vyloučit, srovnejte s výrazy:

$$(x_1, \dots, x_n) \text{ vs. } (x_1, x_2, \dots), \quad \forall n \in \{1, 2, \dots, n\} \text{ vs. } \forall n \in \mathbb{N} \quad \text{apod.} \quad (2)$$

Množina $\hat{n} := \{m \mid m < n\}$ obsahuje právě n prvků pro $n \in \mathbb{N}_0$, $\hat{\omega} = \{n \mid n < \omega\} = \mathbb{N}_0$ apod.

Za takovou horní mez potom nemusíme brát jen přirozená čísla s nulou nebo spočetně nekonečno, ale má smysl mluvit o libovolných ordinálních číslech: například

$$(x_n)_{n < \omega.2} = (x_0, x_1, x_2, \dots [\text{nekonečně mnoho členů}], x_\omega, x_{\omega+1}, \dots [\text{ještě jednou nekonečno}]). \quad (3)$$

Relace $<$ má ve von Neumannově konstrukci ordinálních čísel (kde m a $\hat{m}$ jsou též objekt) identický význam jako $\in$, ale hlavní použití bude zůstat pro $n \in \mathbb{N}_0$ nebo $n = \omega$ a v těchto případech je význam $<$ názornější.

Množiny indexované ordinály oceníme například v konstrukci bází Hilbertových prostorů, kdy se může hodit například napojit dva seznamy báze vektorů za sebe a nemuset uvažovat, v jakém pořadí je vyčíslit, jsou-li nekonečné. Ordinály existují libovolně velké (ve smyslu mohutnosti), takže stejná konvence je případně použitelná i pro neseparabilní prostory, jejichž báze jsou nespočetné.

Třída všech ordinálů má dobré uspořádání.

Kardinální čísla

Kardinální čísla budeme brát jako nejmenší ordinál – či minimum všech ordinálních čísel – stejné množinové mohutnosti. Nejčastěji se budeme setkávat opět s přirozenými čísly s nulou nebo se symbolem $\aleph_0 \equiv \omega$, ale necháme otevřené i další (vyšší) možnosti.

Kardinální čísla budou mít hlavní význam jako mohutnost množin a potažmo **dimenze prostorů**. Například všechny separabilní nekonečněrozměrné Hilbertovy prostory mají dimenzi $\aleph_0$. Vzhledem k tomu, že toto číslo

bereme rovné ordinálu ω , má smysl jej také používat jako horní mez ve smyslu první sekce. Tedy například ortonormální bázi prostoru $\mathcal{H}$ zcela libovolné dimenze můžeme zapisovat jako množinu

$$(e_n)_{n < \dim \mathcal{H}}. \quad (4)$$

Součet přes množinu libovolné velikosti

V matematické analýze jste viděli, že jakmile řada

$$\sum_{n=1}^{\infty} x_n \quad (5)$$

splňuje podmínku absolutní konvergence,

$$S := \sum_{n=1}^{\infty} |x_n| < \infty, \quad (6)$$

pak konverguje i (5) a hodnota součtu (limity) nezávisí na pořadí sčítání členů x_n .

Protože v podmínce (6) se sčítají nezáporná čísla, hodnota součtu přes libovolnou konečnou podmnožinu $N \subset \mathbb{N}_0$ je menší nebo rovna než S a hodnotu S lze počítat jako supremum součtů přes takové konečné podmnožiny. Tím se zbavíme závislosti na použití lineárního uspořádání indexové množiny $\mathbb{N}_0$ a není potom velký myšlenkový krok uvažovat o sčítání přes jiné nekonečné množiny, které lineární uspořádání mít již nemusejí či nemohou, ideálně na *nespočetně nekonečné množiny*.

Uvažujme tedy rozšíření definice sumy *nezáporných* čísel jako

$$\sum_{n \in M} |x_n| := \sup \left\{ \sum_{n \in N} |x_n| \mid N \subset M, N \text{ konečná} \right\}. \quad (7)$$

Za podmínku absolutní konvergence $\sum_{n \in M} x_n$ budeme brát, zda tato hodnota je konečná. Jiné než absolutně konvergentní sumy přes obecné nekonečné množiny nebudeme definovat.

Je rychlým, ale zcela klíčovým pozorováním, že aby tato podmínka mohla vůbec nastat, není možné, aby x_n nabývalo nenulové hodnoty na větší než spočetné množině. Platí totiž

$$M_0 := \{n \in M \mid x_n \neq 0\} = \bigcup_{h \in \mathbb{N}_0} \left\{ n \in M \mid |x_n| > \frac{1}{h} \right\} \quad (8)$$

a pro absolutně konvergentní sumu na pravé straně máme spočetné sjednocení *konečných* množin. Pokud by totiž pro některé $h \in \mathbb{N}_0$ množina $M_h = \{n \in M \mid |x_n| > 1/h\}$ byla nekonečná, lze volbou stále větších konečných podmnožin $N \subset M_h$, $|N| = s$ v (7) dosáhnout zařazení hodnot zespoda omezených s/h do suprema, které nemají horní mez.

Důležitý poznatek tedy je, že **ač v principu můžeme uvažovat nespočetně mnoho sčítanců, jen nejvýše spočetně mnoho z nich musí být nenulových**, aby suma absolutních hodnot (7) mohla konvergovat. S podmínkou absolutní konvergence již je definice součtu obecných čísel jednoduchá: po vyřazení všech nenulových členů získáváme

$$\sum_{n \in M} x_n \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n \in M_0} x_n, \quad (9)$$

kde již sčítáme přes spočetnou množinu v libovolné enumeraci, což umíme.

S náhradou absolutní hodnoty za normu lze myšlenku použít i pro sčítání prvků obecného Banachova prostoru, např. Fourierův rozvoj a Parsevalovu rovnost v libovolném Hilbertově prostoru s ortonormální bází $(e_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$ (srv. s komplikacemi komentáře za větou 4.2.8 nevyužívajícím zobecněných sum).

$$x = \sum_{j < \dim \mathcal{H}} (e_j, x) e_j, \quad \|x\|^2 = \sum_{j < \dim \mathcal{H}} |(e_j, x)|^2. \quad (10)$$

Prostory ℓ^2 a L^2

Za prostor ℓ^2 se často uvažuje prostor posloupností komplexních čísel. My budeme ve značení poněkud více explicitní, budeme s nově nabytým nástrojem zobecněných sum používat definici umožňující obecnou indexovou množinu M ,

$$\ell^2(M) := \left\{ (x_n)_{n \in M} \in \mathbb{C}^M \mid \sum_{n \in M} |x_n|^2 < \infty \right\}. \quad (11)$$

(Výraz $\mathbb{C}^M$, obecně X^Y , značí množinu všech funkcí z Y do X , zde tedy všech zobrazení $M \rightarrow \mathbb{C}$.) Tradiční význam ℓ^2 v tomto značení odpovídá $\ell^2(\mathbb{N})$.

Každý takto sestrojený prostor je Hilbertův s dimenzí rovnou mohutnosti M . Můžeme tedy jednotnou konvencí obsáhnout prostory konečné dimenze $\ell^2(\hat{n})$ (které ovšem stačí značit $\mathbb{C}^n$), spočetně rozměrné prostory, jakým je např. $\ell^2(\mathbb{N}_0)$, ale i neseparabilní Hilbertovy prostory.

Příkladem budiž $\mathcal{H}_{\mathbb{R}} := \ell^2(\mathbb{R})$. Jeho prvky jsou funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, nenulové na nejvýše spočetné množině M_f , splňující

$$\sum_{x \in \mathbb{R}} |f(x)|^2 = \sum_{x \in M_f} |f(x)|^2 < \infty. \quad (12)$$

Skalárním součinem v $\mathcal{H}_{\mathbb{R}}$ je

$$(f, g)_{\mathcal{H}_{\mathbb{R}}} := \sum_{x \in \mathbb{R}} f^*(x)g(x) = \sum_{x \in M_f \cap M_g} f^*(x)g(x), \quad (13)$$

snadno se přesvědčíme, že ani limitním přechodem v cauchyovských posloupnostech prostor $\mathcal{H}_{\mathbb{R}}$ neopustíme. Takový prostor můžeme pro účely příkladů považovat za referenční formu Hilbertova prostoru dimenze kontinua stejně, jako $\ell^2(\mathbb{N}_0)$ je izomorfní libovolnému Hilbertovu prostoru spočetné dimenze.

V prostorech L^2 uvažujeme značení $L^2(X, d\mu)$ umožňující obecný měřitelný prostor X a míru μ . Jestliže se jedná o Lebesgueovu míru na $\mathbb{R}^n$ nebo nějaké jeho otevřené podmnožině Ω , používáme $L^2(\Omega, d\mathbf{x})$, pro zvýraznění, že $\mathbf{x}$ obsahuje všechny souřadnice, případně pouze $L^2(\Omega)$. Umožníme také $L^2(X, Y, d\mu)$ apod. pro prostory funkcí z měřitelného prostoru X do nějakého Banachova prostoru Y , analogicky $\ell^2(X, Y)$.

Kompaktní, Hilbert–Schmidtovy a jaderné operátory

Jaderné operátory jsou zvláštní druh *kompaktních* operátorů, připomeneme tedy nejprve, co víme o nich. Všechny poučky případně můžeme najít v B–E–H kap. 6.1 – 6.2.

1. Kompaktní operátory $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ jsou z definice podmnožinou *omezených* operátorů na Hilbertově prostoru.
2. Operátor C je kompaktní $\Leftrightarrow$ zobrazuje omezené posloupnosti na posloupnosti s hromadným bodem.
3. Ekvivalentně: operátor C je kompaktní $\Leftrightarrow$ zobrazuje slabě konvergentní posloupnosti na konvergentní.
4. Množina $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ je podprostorem v $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ a je uzavřená vzhledem ke *stejnomořné* topologii.
5. Množina $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ tvoří v $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ **oboustranný $*$ -ideál**: pro C kompaktní a $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ jsou BC, CB, C^* také kompaktní operátory.
6. Spektrum kompaktních operátorů na *nekonečněrozměrném* $\mathcal{H}$ vždy obsahuje nulu, která může a nemusí být vlastní hodnotou. Všechny *ostatní* body $\sigma(C), C \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ jsou **vlastní hodnoty konečné násobnosti** a nemají žádný jiný hromadný bod než (případně) nulu.
7. Množina vlastních hodnot $C \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ je nejvýše spočetná.
8. Omezený operátor je kompaktní právě tehdy, když existuje posloupnost *konečněrozměrných* operátorů, která k němu konverguje podle normy (tj. *stejnomořně*).
9. Každý *normální* kompaktní operátor má **čistě bodové spektrum**: existuje ortonormální báze $\mathcal{H}$ tvořená pouze jeho vlastními vektory.

Kompaktní operátory jsou tedy *stejnomořným* uzávěrem množiny *konečněrozměrných* operátorů $\mathcal{F}(\mathcal{H})$, daných definicí

$$B \in \mathcal{F}(\mathcal{H}) \Leftrightarrow \dim \operatorname{Ran} B < \infty. \quad (1)$$

Pro *konečněrozměrné* prostory je každý operátor *konečněrozměrný* a tedy řetězec inkluzí

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}) \subset \mathcal{K}(\mathcal{H}) \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}) \quad (2)$$

kolabuje na rovnosti. Pro *nekonečněrozměrné* prostory existují omezené operátory, které nejsou kompaktní – je to zejména příklad jednotkového operátoru! – a existují kompaktní operátory, které nejsou *konečněrozměrné*.

Doplníme větu, kterou jste pravděpodobně neslyšeli:

Věta. Kompaktnost je postačující podmínkou k zavedení **singulárního rozkladu** operátoru $C \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Tedy: pro každý $C \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ existují ortonormální báze $(e_n)_{n < \dim \mathcal{H}}, (f_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$ a nerostoucí zobecněná posloupnost $\mu_n \in \langle 0, \infty \rangle \forall n < \dim \mathcal{H}$ takové, že

$$\forall x \in \mathcal{H} : Cx = \sum_{n < \dim \mathcal{H}} \mu_n(e_n, x)f_n. \quad (3)$$

Posloupnost μ_n přitom splňuje $\forall n \geq \omega : \mu_n = 0$, takže součet lze beze změny hodnoty psát jako konečnou sumu či řadu. Naopak, svými bázemi $(e_n)_{n < \dim \mathcal{H}}, (f_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$ a posloupností $(\mu_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$ je operátor $C \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ plně určen.

Důkaz je založen na *polárním rozkladu* omezeného operátoru $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ (kterou jste doufám slyšeli!):

Věta (5.5.9). Ke každému $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ existuje právě jedna *parciální izometrie* W_B na $\mathcal{H}$ taková, že $B = W_B|B|$ a $\operatorname{Ker} W_B = \operatorname{Ker} B$. Platí $\operatorname{Ran} W_B = \operatorname{Ran} B$.

Tu dokazovat nebudeme a přejdeme k důkazu *singulárního rozkladu*.

Důkaz. Uvažujme absolutní hodnotu $|C| = \sqrt{C^*C}$ a *parciální izometrii* W_C takovou, že $W_C|C| = C$. Operátor $|C|$ je také kompaktní, protože $|C| = W_C^*C$ a jestliže obraz slabě konvergentní posloupnosti $(x_n)_{n=0}^\infty$ při C je konvergentní posloupnost $(Cx_n)_{n=0}^\infty \rightarrow y$, pak obraz při $|C|$ je $(W_C^*Cx_n)_{n=0}^\infty \rightarrow W_C^*y$.

Vlastní čísla $|C|$, o kterých víme, že nenulových je nejvýše spočetně mnoho a mají konečnou násobnost, navíc jsou díky pozitivitě $|C|$ reálná a nezáporná, můžeme díky těmto vlastnostem seřadit do neklesající posloupnosti s opakováním $(\mu_n)_{n < \dim \mathcal{H}} : m < n < \dim \mathcal{H} \Rightarrow \mu_m \geq \mu_n \geq 0$. Pro operátory na neseparabilním $\mathcal{H}$ tato posloupnost po nejvýše spočetném počtu prvků přejde na konstantní nulu.

Absolutní hodnota $|C|$ je již hermitovský operátor, odsud normální a platí pro něj Hilbert–Schmidtova věta. Díky ní můžeme ke vlastním číslům $(\mu_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$ najít vlastní vektory $(e_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$, které splňují $|C|e_n = \mu_n e_n$ a tvoří ortonormální bázi $\mathcal{H}$.

Rozložíme nyní obecný prvek $x \in \mathcal{H}$ jako

$$x = \sum_{n < \dim \mathcal{H}} (e_n, x) e_n, \quad (4)$$

potom akce $|C|$ na x dává

$$|C|x = \sum_{n < \dim \mathcal{H}} (e_n, x) |C|e_n = \sum_{n < \dim \mathcal{H}} \mu_n (e_n, x) e_n. \quad (5)$$

Nechť $n_0 = \min \{n < \dim \mathcal{H} \mid \mu_n = 0\}$. Pak vektory $(e_n)_{n < n_0}$ tvoří ortonormální bázi prostoru $\text{Ran } |C| = (\text{Ker } |C|)^\perp$ a tedy počátečního prostoru parciální izometrie W_C . Jejich obrazy $(W_C e_n)_{n < n_0}$ pak tvoří ortonormální bázi konečného prostoru, kterým je $\overline{\text{Ran } C}$. Protože platí

$$f_n = W e_n, \quad |C|e_n = \mu_n e_n, \quad \mu_n > 0 \quad \forall n < n_0, \quad (6)$$

lze také psát

$$e_n = \mu_n^{-1} |C|e_n, \quad f_n = \mu_n^{-1} W |C|e_n = \mu_n^{-1} C e_n, \quad \forall n < n_0. \quad (7)$$

Odsud již plyne

$$Cx = \sum_{n < \dim \mathcal{H}} (e_n, x) C e_n = \sum_{n < n_0} (e_n, x) C e_n = \sum_{n < n_0} (e_n, x) \mu_n f_n = \sum_{n < \dim \mathcal{H}} \mu_n (e_n, x) f_n \quad (8)$$

po doplnění ON báze $(f_n)_{n < n_0}$ prostoru $\overline{\text{Ran } C}$ na ON bázi $(f_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$ celého $\mathcal{H}$ libovolným způsobem. $\square$

Nenulová čísla v posloupnosti $(\mu_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$, tvořící neklesající posloupnost $(\mu_n)_{n < n_0}$, $n_0 \leq \omega$, se nazývají **singulární hodnoty** operátoru C .

Mezi jejich podstatné vlastnosti patří:

- Jestliže operátor $C \in \mathcal{F}_\infty$ je pozitivní, pak pojem singulárních hodnot splývá s pojmem (nenulových) vlastních hodnot a rozvoj (3) nahrazuje (5). Ovšem již pro hermitovské operátory, které mají některé vlastní hodnoty záporné, nastává rozdíl.
- Předchozí bod občas potkáváme v Diracově značení. Uvažujme pro tuto chvíli pouze konečnou dimenzi. Kde rozklad C do vlastních podprostorů má tvar

$$C = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad \sigma = \{\lambda_i\}_i \quad (9)$$

a je podmíněn diagonalizovatelností matice C , singulární rozklad by odpovídal

$$C = \sum_i \mu_i |\varphi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad \{\mu_i\}_i = \sigma(\sqrt{C^* C}) \subset \langle 0, \infty) \quad (10)$$

a v prostoru matic existuje vždy (dokonce lze hledat i pro obdélníkové matice). Maticově lze psát ve tvaru

$$C = VDW, \quad (11)$$

kde D je diagonální a V, W unitární, připomínajícím předpis diagonalizace. Narozdíl od ní však V a W nemusejí být vzájemně sdružené, zato D je vymezen na nezáporná čísla na diagonále. Pro pozitivně semi-definitní C se všechny tyto rozdíly stírají.

- Nejvyšší singulární hodnota, μ_0 , je rovna operátorové normě $\|C\|$. O tom se můžeme přesvědčit například tak, že je z definice rovna spektrálnímu poloměru $|C|$ (je jednoduše jeho nejvyšším vlastním číslem). Ovšem pro omezený normální operátor je spektrální poloměr a norma totéž (5.3.3) a stejně tak se rovnají normy $\|C\|$ a $\|C\|$, protože $\|Cx\| = \|C|x\|$ pro každé $x \in \mathcal{H}$.

Hilbert–Schmidtovy operátory

Tato třída, označovaná $\mathcal{S}_2$, byla extenzivně zkoumána na Funkcionální analýze, obzvláště z důvodu své relevance pro integrální operátory. Stejně jako u $\mathcal{S}_\infty$ se jedná o oboustranný ideál v $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, tj. jakmile omezený operátor vynásobíme Hilbert–Schmidtovým, výsledek je již také H–S, a $B \in \mathcal{S}_2(\mathcal{H}) \Leftrightarrow B^* \in \mathcal{S}_2(\mathcal{H})$.

Podmínka pro náležitost operátoru B do $\mathcal{S}_2$ je zapisována

$$\sum_{j < \dim \mathcal{H}} \|Be_j\|^2 < \infty, \quad (12)$$

kde $(e_j)_{j < \dim \mathcal{H}}$ je ortonormální báze $\mathcal{H}$. Ukazuje se významné tvrzení, že hodnota na levé straně nerovnosti na konkrétní volbě báze *nezávisí*. To umožňuje prostoru $\mathcal{S}_2$ dát normu

$$B \in \mathcal{S}_2 : \quad \|B\|_2 := \sqrt{\sum_{j < \dim \mathcal{H}} \|Be_j\|^2}, \quad \|B\|_2 \geq \|B\| \quad (13)$$

indukovanou skalárním součinem

$$B, C \in \mathcal{S}_2 : (B, C)_2 := \sum_{j < \dim \mathcal{H}} (Be_j, Ce_j) = \sum_{j < \dim \mathcal{H}} (e_j, B^*Ce_j) \quad (14)$$

počopitelně také na bázi nezávislým (lze získat z normy polarizací). $\mathcal{S}_2$ je vůči této normě úplný a stává se tak Hilbertovým prostorem. (Pozor, vůči operátorové normě úplný není, to je jen $\mathcal{S}_\infty$.)

O této normě si uvedeme dvě zajímavosti, které nemusejí být na první pohled patrné:

- V dané bázi můžeme rozložit také sčítanec sumy (13) Parsevalovou rovností a získat tím dvojnou sumu

$$\|B\|_2^2 = \sum_{j < \dim \mathcal{H}} \sum_{k < \dim \mathcal{H}} |(e_k, Be_j)|^2, \quad (15)$$

podobně pro skalární součin

$$(B, C)_2 = \sum_{j < \dim \mathcal{H}} \sum_{k < \dim \mathcal{H}} (e_k, Be_j)^*(e_k, Ce_j). \quad (16)$$

Význam těchto vzorců je evidentní v *prostoru matic*, kde se jedná o normu, resp. skalární součin dvou matic, bráných po prvcích jako vektory délky $(\dim \mathcal{H})^2$. Užívá se též názvu *Frobeniova norma*.

- Každý Hilbert–Schmidtův operátor B je kompaktní, $\mathcal{S}_2 \subset \mathcal{S}_\infty$. Zvolme bázi $(e_j)_{j < \dim \mathcal{H}}$ z jeho kanonického tvaru (3). S touto volbou

$$\|B\|_2 = \sqrt{\sum_{j < \dim \mathcal{H}} \|\mu_j f_j\|^2} = \sqrt{\sum_{j < \dim \mathcal{H}} |\mu_j|^2} = \|(\mu_j)_{j < \dim \mathcal{H}}\|_2. \quad (17)$$

Kompaktní operátor je tedy Hilbert–Schmidtův právě tehdy, jestliže posloupnost jeho singulárních hodnot (doplňená o nuly) je prvkem $\ell^2(\dim \mathcal{H})$. Spolu s poznatkem, že norma v $\ell^\infty(\dim \mathcal{H})$ je supremum a že pro kompaktní operátor

$$\|(\mu_j)_{j < \dim \mathcal{H}}\|_\infty = \sup_{j < \dim \mathcal{H}} |\mu_j| = \max_{j < \dim \mathcal{H}} \mu_j = \mu_0 = \|B\| < \infty \quad (18)$$

to dává význam původu indexů 2, resp. ∞ u tříd $\mathcal{S}_p$, a návod, jak definovat obecnou $\mathcal{S}_p$, $1 \leq p \leq \infty$.

Využijeme také poznatek o integrálních operátorech. Ocituje je jej vymezený pro jednoduchost na $L^2(\mathbb{R})$.

Věta (6.3.6). Operátor $B \in \mathcal{B}(L^2(\mathbb{R}))$ je Hilbert–Schmidtův právě tehdy, existuje-li funkce $K \in L^2(\mathbb{R}^2)$ taková, že pro všechna $f \in L^2(\mathbb{R})$ platí

$$(Bf)(x) = \int_{\mathbb{R}} K(x, y)f(y) dy. \quad (19)$$

Za těchto předpokladů platí také rovnost $\|B\|_2 = \|K\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}$.

Jaderné operátory

Jaderné operátory, či **operátory se stopou**, jsou přirozeným dalším krokem v této hierarchii.

Definice. Operátor $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ nazveme jaderným, jestliže existuje báze $(e_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$, v níž

$$\sum_{n < \dim \mathcal{H}} (e_n, |B|e_n) < \infty \quad (20)$$

Množinu všech jaderných operátorů na $\mathcal{H}$ značíme $\mathcal{J}_1(\mathcal{H})$.

Není tolik překvapivé, že ani výraz objevující se na levé straně této nerovnosti není na volbě báze závislý, uvědomíme-li si, že v důsledku positivity $|B|$ lze psát jako

$$\sum_{n < \dim \mathcal{H}} (\sqrt{|B|}e_n, \sqrt{|B|}e_n) = \sum_{n < \dim \mathcal{H}} \|\sqrt{|B|}e_n\|^2, \quad (21)$$

čímž přechází na tvar (13), o kterém tuto skutečnost již víme.

Pro jaderné operátory lze zavést norma

$$\|B\|_1 := \sum_{n < \dim \mathcal{H}} (e_n, |B|e_n) = \|\sqrt{|B|}\|_2^2, \quad (22)$$

splňující

$$\|B\|_1 \geq \|B\|_2, \quad (23)$$

tedy každý jaderný operátor je Hilbert–Schmidtův a potažmo kompaktní. Jak asi očekáváme, jedná se také o ℓ^1 -normu posloupnosti singulárních hodnot B z identického důvodu jako jejich ℓ^2 norma je Hilbert–Schmidtova, jak napovídá již označení třídy $\mathcal{J}_1$.

O nerovnosti (23) se přesvědčíme například využitím (15) a rovnosti $\|Bx\| = \|B|x|\|$:

$$\begin{aligned} \|B\|_2^2 &= \sum_{j < \dim \mathcal{H}} \|Be_j\|^2 = \sum_{j < \dim \mathcal{H}} \| |B|e_j \|^2 = \sum_{j < \dim \mathcal{H}} \sum_{k < \dim \mathcal{H}} |(e_k, |B|e_j)|^2 = \sum_{j < \dim \mathcal{H}} \sum_{k < \dim \mathcal{H}} |(\sqrt{|B|}e_k, \sqrt{|B|}e_j)|^2 \\ &\leq \sum_{j < \dim \mathcal{H}} \sum_{k < \dim \mathcal{H}} (\sqrt{|B|}e_k, \sqrt{|B|}e_k)(\sqrt{|B|}e_j, \sqrt{|B|}e_j) = \sum_{j < \dim \mathcal{H}} (e_j, |B|e_j) \cdot \sum_{k < \dim \mathcal{H}} (e_k, |B|e_k) = \|B\|_1^2. \end{aligned} \quad (24)$$

Prostor $\mathcal{J}_1$ je vůči normě $\|\cdot\|_1$ opět úplný, je tedy Banachův (poznámka 6.4.3). Stejně jako $\mathcal{J}_\infty$ a $\mathcal{J}_2$ je také oboustranným $*$ -ideálem v prostoru $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, což plyne z následující zajímavé poučky.

Věta (6.4.1b). Operátor $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ je jaderný právě tehdy, je-li součinem dvou Hilbert–Schmidtových operátorů.

Důkaz. (jako vždy pouze pro zajímavost)

$\Rightarrow$: Polární rozklad $B = W_B|B|$ můžeme zapsat jako $W_B\sqrt{|B|}\sqrt{|B|}$. Podle (22) je pak operátor $\sqrt{|B|}$ prvkem $\mathcal{J}_2(\mathcal{H})$ a pro $W_B\sqrt{|B|}$ to již plyne z vlastnosti ideálu.

$\Leftarrow$: Podobně nechť $B, C \in \mathcal{J}_2(\mathcal{H})$, uvažujme $|BC| = W^*BC$. Pak

$$\begin{aligned} \|BC\|_1 &= \sum_{n < \dim \mathcal{H}} (e_n, |BC|e_n) = \sum_{n < \dim \mathcal{H}} |(e_n, |BC|e_n)| = \sum_{n < \dim \mathcal{H}} |(e_n, W^*BCe_n)| = \sum_{n < \dim \mathcal{H}} |(B^*We_n, Ce_n)| \\ &\leq \left(\sum_{n < \dim \mathcal{H}} \|B^*We_n\|^2 \cdot \sum_{m < \dim \mathcal{H}} \|Ce_m\|^2 \right)^{1/2} = \|B^*W\|_2 \|C\|_2 < \infty, \end{aligned} \quad (25)$$

protože C je H–S z předpokladu a B^*W z vlastnosti, že se jedná o součin H–S operátoru s omezeným. $\square$

Pravidlo (2) se tedy rozrůstá v celou řadu inkluzí oboustranných $*$ -ideálů omezených operátorů (že $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ je také jedním, je poměrně triviální):

$$[\mathcal{F}(\mathcal{H}) \subset] \mathcal{I}_1(\mathcal{H}) \subset \mathcal{I}_2(\mathcal{H}) \subset \mathcal{I}_\infty(\mathcal{H}) [\subset \mathcal{B}(\mathcal{H})], \quad (26)$$

Konečnědimenzionální operátory se vymykají $\mathcal{I}$ -značení, protože pro ně nedefinujeme žádnou normu v duchu ostatních, vůči které by byl úplný. Jinak se jedná o Banachovy prostory uzavřené postupně vůči normám

$$\|B\|_1 \geq \|B\|_2 \geq \|B\|, \quad (27)$$

z nichž $\mathcal{I}_2$ je navíc Hilbertův. V konečné dimenzi $\mathcal{H}$ jsou všechny množiny (26) stejné a všechny tři normy (27) ekvivalentní, jinak dokážeme libovolně dvě třídy separovat. Podstatná vlastnost všech těchto tříd je, že $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ je v každé hustá: k libovolnému operátoru $\mathcal{I}_1(\mathcal{H})$, $\mathcal{I}_2(\mathcal{H})$ existuje posloupnost konečněrozměrných operátorů, která k němu v příslušné normě konverguje (o $\mathcal{I}_\infty$ to již víme, ale ostatní odtud neplynou – nerovnosti (27) jdou pro toto nevhodným směrem!).

Nejdůležitější vlastností jaderných operátorů a vůbec důvodem, proč jim věnujeme pozornost, je skutečnost, že se jedná o třídu, na níž lze zavést operaci **stopy**. Platí totiž

Věta (6.4.4a). Jestliže operátor $B \in \mathcal{I}_1(\mathcal{H})$, potom suma

$$\sum_{j < \dim \mathcal{H}} (e_j, B e_j) \quad (28)$$

absolutně konverguje a její součet nezávisí na volbě báze $(e_j)_{j < \dim \mathcal{H}}$.

Důkaz. K důkazu obojího poslouží ON báze $(\tilde{e}_k)_{k < \dim \mathcal{H}}$ operátoru $|B|$ (z kanonické formy B), kterou použijeme k rozpisu skalárních součinů $(e_j, B e_j)$ následujícím způsobem.

$$(e_j, B e_j) = (B^* e_j, e_j) = \sum_{k < \dim \mathcal{H}} (B^* e_j, \tilde{e}_k) (\tilde{e}_k, e_j) = \sum_{k < \dim \mathcal{H}} (e_j, B \tilde{e}_k) (\tilde{e}_k, e_j).$$

Tento výsledek pak můžeme použít dvěma způsoby,

1. pro absolutní konvergenci

$$\begin{aligned} \sum_{j < \dim \mathcal{H}} |(e_j, B e_j)| &= \sum_{j < \dim \mathcal{H}} \sum_{k < \dim \mathcal{H}} |(e_j, B \tilde{e}_k) (\tilde{e}_k, e_j)| \leq \sum_{k < \dim \mathcal{H}} \left(\sum_{j < \dim \mathcal{H}} |(e_j, B \tilde{e}_k)|^2 \cdot \sum_{l < \dim \mathcal{H}} |(\tilde{e}_k, e_l)|^2 \right)^{1/2} \\ &= \sum_{k < \dim \mathcal{H}} (\|B \tilde{e}_k\|^2 \|\tilde{e}_k\|^2)^{1/2} = \sum_{k < \dim \mathcal{H}} \|\mu_k f_k\| = \sum_{k < \dim \mathcal{H}} |\mu_k| = \|B\|_1 < \infty, \end{aligned} \quad (29)$$

2. pro hodnotu sumy samotné, kde rovněž můžeme prohodit sumace a zjistit, že

$$\sum_{j < \dim \mathcal{H}} (e_j, B e_j) = \sum_{k < \dim \mathcal{H}} \sum_{j < \dim \mathcal{H}} (\tilde{e}_k, e_j) (e_j, B \tilde{e}_k) = \sum_{k < \dim \mathcal{H}} (\tilde{e}_k, B \tilde{e}_k) \quad (30)$$

přestalo na $(e_j)_{j < \dim \mathcal{H}}$ jakkoli záviset. $\square$

Tento výraz je tedy korektně definován a nazveme jej *stopou operátoru* B , ozn. $\text{Tr } B$. Její hlavní vlastnosti shrnuje

Věta (6.4.4b,c). Zobrazení $\text{Tr}: \mathcal{I}_1(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$ je omezený lineární funkcionál na Banachově prostoru $\mathcal{I}_1$: platí

$$|\text{Tr } B| \leq \|B\|_1 = \text{Tr } |B|. \quad (31)$$

Pro každé $B \in \mathcal{I}_1(\mathcal{H})$, $C \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ jsou splněny rovnosti

$$\text{Tr } B^* = \overline{\text{Tr } B}, \quad \text{Tr}(BC) = \text{Tr}(CB). \quad (32)$$

Přitom nezapomeňme, že slovo „lineární“ sobě zahrnuje další vlastnosti: $\text{Tr}(\alpha B + C) = \alpha \text{Tr } B + \text{Tr } C$. U druhého z vlastností (32) pozor na volbu $C \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, která je širší než $C \in \mathcal{I}_1(\mathcal{H})$. To, že výrazy BC , CB vůbec stopu mají, využívá vlastnosti, že $\mathcal{I}_1(\mathcal{H})$ tvoří v $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ ideál. Také důkaz tohoto tvrzení, ač lze pravděpodobně dělat jinými způsoby, využívá zajímavou (ač poněkud okrajovou) vlastnost omezených operátorů – přesvědčte se v knize.

Základy neomezených operátorů

Na Funkcionální analýze jste se setkávali především s omezenými operátory.

V kvantové fyzice omezenost zdaleka *není* běžnou vlastností. Naopak, dá se říci, že až na výjimky operátory, které pro nás budou důležité, omezené nebudou. Mezi tyto výjimky definitoricky patří následující důležité třídy:

- všechny projektory,
- unitární operátory,
- kompaktní operátory, zejména jaderné,
- konečněrozměrné operátory, zejména operátory působící na prostoru $\mathbb{C}^n$.

Je tedy potřeba ustanovit si základní poznatky o rozdílech chování neomezených operátorů vůči omezeným.

Zejména vzpomeneme na *větu o uzavřeném grafu*:

Věta (3.4.12). Nechtě prostory $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$ jsou Banachovy. Uzavřený lineární operátor $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ definovaný na celém prostoru $\mathcal{X}$ je spojitý.

Každý omezený operátor definovaný na hustém podprostoru $\mathcal{H}$ lze jednoznačně na celé $\mathcal{H}$ rozšířit použitím uzávěru (*věta o spojitém rozšíření*, 3.2.4). Běžně se tedy uvažuje, že označení „omezený“ v sobě uzavřenost již zahrnuje a tím i definovanost na všech vektorech počátečního prostoru. Dále pro omezené operátory platí ekvivalence (3.2.3)

$$B \text{ je omezený} \iff B \text{ je spojitý} \iff B \text{ je spojitý alespoň v jednom bodě.} \quad (1)$$

Odsud vidíme, jakých záruk se pro neomezené operátory budeme muset vzdát:

- pokud neomezený operátor je uzavřený, pak **není definovaný na celém prostoru** – pokud by byl, pak podle věty o spojitém zobrazení by byl spojitý a podle ekvivalence 3.2.3 omezený,
- pokud tedy přesto nějaký neomezený operátor definovaný na celém prostoru je, pak není uzavřený – existuje alespoň jeden bod $x \leftarrow x_n$, ve kterém limita Tx_n vychází jinak, než pro jinou posloupnost x'_n se stejnou limitou x .

Vzhledem k tomu, že druhou vlastnost obvykle chceme za každou cenu eliminovat, je nutné doprovázet zavedení každého neomezeného operátoru T jeho definičním oborem $D(T)$ (nezávisle na tom, zda cílíme na uzavřenost či pouze uzavíratelnost).

Další zcela zásadní roli hraje koncept *hustě definovaných operátorů*, tj. takových, jejichž definiční uzávěr $\overline{D(T)}$ splňuje $\overline{D(T)} = \mathcal{H}$. Množinu všech *hustě definovaných operátorů* na $\mathcal{H}$ označíme $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. Tato vlastnost je klíčová pro definici sdruženého operátoru: platí

Věta (7.1.1). Jestliže $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, pak pro každé $y \in \mathcal{H}$ existuje **nejvýše jedno** $y^* \in \mathcal{H}$ takové, že

$$\forall x \in D(T): (y^*, x) = (y, Tx). \quad (2)$$

Operátor, který není hustě definovaný, neposkytuje dostatečný počet rovnic, který by vymezil T^* jednoznačně. Proto o sdruženém operátoru k T má smysl mluvit pouze, pokud $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Operátor T^* definujeme právě na všech takových vektorech y , pro které nějaké y^* podle lemmatu existuje, a na této množině označíme $T^*y := y^*$. Použitím T^*y jako symbolu (což není obvyklé) bychom tedy mohli psát:

$$y \in D(T^*) \iff \exists (T^*y) \in \mathcal{H} : \forall x \in D(T): (T^*y, x) = (y, Tx), \quad (3)$$

a jednoznačnost zavedení T^*y dává předchozí věta. Že operátor T^* je lineární je poměrně triviální pozorování.

Poznámka ke značení: v tomto textu i v budoucnosti se pro přehlednost budeme snažit dodržovat následující volby symbolů pro operátory inspirované B–E–H: B, C – omezené, T, S – hustě definované. Označení A budeme obvykle rezervovat pro symetrické a samosdružené operátory (nezávisle na omezenosti), i když budou patřit do jedné z předchozích klasifikací. Podobně U – unitární, V, W – izometrické, E, F – projektoři.

Sdružený operátor obecně dává poněkud méně záruk, než jsme zvyklí z omezených operátorů (potažmo z lineární algebry). Srovnajme věty 7.1.2–3 s 5.1.5:

- Pro omezený operátor B existuje B^* vždy a má stejnou normu, můžeme tedy hledat B^{**} . Ten se rovná B .
- Pro neomezený operátor T existuje T^* tehdy, pokud T je hustě definovaný. T^{**} existuje, pokud T^* je také hustě definovaný. Pokud T^{**} existuje, je *nadmnožinou* T – konkrétně jeho **uzávěrem** (7.2.4). Dokonce dle stejné věty platí: uzávěr operátoru $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ existuje *právě tehdy*, když T^* je hustě definovaný.
- Pro každé B je B^* definované na celém $\mathcal{H}$. Pro hustě definované operátory T, S se může stát, že $S \subset T$, potom pro sdružené operátory platí opačná inkluze: $S^* \supset T^*$.
- Antihomogenita zůstává v obecné platnosti: $(\alpha T)^* = \alpha^* T^*$, ale aditivita ne. Abychom mohli srovnávat $(S + T)^*$ s operátory S^* a T^* , musíme zaručit, že kromě S, T také jejich součet zůstává hustě definovaný, což není obecně pravda. Ani s touto podmínkou není rovnost – platí: $(S + T)^* \supset S^* + T^*$.
- Pro omezené operátory B, C platí $(BC)^* = C^* B^*$. Pro neomezené T, S musíme opět nejprve ověřit, že TS je hustě definovaný, potom $(TS)^* \supset S^* T^*$.
- Pro invertibilní operátor T se musíme ujistit, zda T^{-1} je hustě definovaný. Pokud, pak rovnice $(T^{-1})^* = (T^*)^{-1}$ zůstává v platnosti.

Třetí z bodů lze shrnout mnemotechnickou pomůckou „**větší operátor $\Leftrightarrow$ menší sdružení**“. Toto pozorování vyplývá přímo z věty 7.1.1, protože v případě T dává obecný kvantifikátor $\forall x \in D(T)$ silnější omezení než případě S na existenci vektoru y^* a potažmo na velikost $D(T^*)$. Pozor ovšem na interpretaci, že operátor definovaný na celém prostoru by měl zákonitě mít sdružený operátor nějakým způsobem „malý“. To je pravda jen, pokud by nebyl spojitý, jinak B^* je definovaný všude. Poučka o $S \subset T \Leftrightarrow S^* \supset T^*$ zde pochopitelně žádné výjimky mít nebude, ovšem *hustě definované* podmnožiny omezeného operátoru B mají za svůj sdružený operátor také B^* – nemá se již kam zvětšovat.

Evidentně zajímavá je třída *uzavřených a hustě definovaných* operátorů $\mathcal{L}_c(\mathcal{H})$, protože každý takový operátor T zajišťuje T^* hustě definované. Platí silnější tvrzení, díky konstrukci T^* se *vždy* jedná o uzavřený operátor (7.2.1). Pokud tedy *navíc* je podmínkou uzavřenosti T zaručena jeho hustá definovanost, platí

$$T \in \mathcal{L}_c(\mathcal{H}) \quad \Leftrightarrow \quad T^* \in \mathcal{L}_c(\mathcal{H}), \quad T^{**} = \overline{T} = T. \quad (4)$$

Uzávěr operátoru je jednoznačný, takže předchozí poučka by šla upravit na *uzavíratelné* hustě definované operátory – uzavíratelný operátor T a jeho uzávěr mají stejné sdružení T^* (které již uzavřené je vždy). Budou existovat situace, kdy oceníme pouze vědět, že pro dané T uzávěr existuje a jaké má vlastnosti – řekněme konkrétně, jaký má sdružený operátor. Výpočet uzávěru může být velmi pracný krok, který je výhodné odložit. Někdy může dokonce být jednodušší k uzávěru T dojít pomocí T^{**} než z definice.

Užitečná poučka 5.1.8 platná pro omezené operátory

$$B \in \mathcal{B}(H) \quad \Rightarrow \quad \text{Ker } B^* = (\text{Ran } B)^\perp \quad (5)$$

zůstává v platnosti i pro hustě definované operátory, s potenciálně zajímavými důsledky,

- jádro operátoru sdruženého hustě definovanému T je vždy uzavřený podprostor,
- $\text{Ker } T^* = \{0\} \quad \Leftrightarrow \quad \overline{\text{Ran } T} = \mathcal{H}$.

První bod si zaslouží ještě stručný komentář – pro neuzavřený operátor T se může stát, že jeho jádro není uzavřený podprostor, tj. existuje konvergentní posloupnost vektorů z jádra, jejichž limita x již není prvkem $\text{Ker } T$. To může nastat z důvodu, že operátor T v x není definován, nebo proto, že jeho hodnota tam vychází jinak než nula – ve druhém případě ovšem není uzavíratelný. Pokud uzavíratelný je, jeho uzávěr bude v x definován předpisem $Tx = 0$. Jinými slovy jádro uzavřeného operátoru je uzavřeným podprostorem vždy. První bod dá tuto odpověď jinou cestou: *uzavřený* hustě definovaný operátor je sdruženým operátorem jiného (svého vlastního T^*).

Normální operátory

Pojem normálního operátoru jste zaváděli v kontextu omezených operátorů podmínkou $B^*B = BB^*$. Můžeme toto označení rozšířit i na operátory neomezené, ale k předpokladům **definitornicky** přibude *hustá definovanost* a *uzavřenost*. Je tedy množina normálních operátorů na $\mathcal{H} = \mathcal{L}_n(\mathcal{H})$ – podmnožinou $\mathcal{L}_c(\mathcal{H})$.

Definiční rovnost $TT^* = T^*T$ může být důležitá pro použití, ale není nijak příjemná na ověřování. Poněkud praktičtější může být ekvivalentní definice (7.3.1): operátor $T \in \mathcal{L}_c(\mathcal{H})$ je normální právě tehdy, když $D(T^*) = D(T)$ a platí $\forall x \in D(T): \|T^*x\| = \|Tx\|$.

Naprostá většina hlavních pouček o omezených normálních operátorech zůstává na $\mathcal{L}_n(\mathcal{H})$ v platnosti:

- $T \in \mathcal{L}_n(\mathcal{H}) \Leftrightarrow T^* \in \mathcal{L}_n(\mathcal{H})$,
- $\lambda \in \sigma_p(T) \Leftrightarrow \lambda^* \in \sigma_p(T^*)$,
- $\forall \lambda \in \mathbb{C}: \text{Ker}(T - \lambda I) = \text{Ker}(T^* - \lambda I)$, speciálně $\text{Ker } T = \text{Ker } T^* = (\text{Ran } T)^\perp$,
- vlastní podprostory odpovídající různým vlastním hodnotám jsou ortogonální,
- reziduální spektrum normálního operátoru je prázdné (zbývá jen bodové a spojitě),
- množina regulárních hodnot $\rho(T) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{C} \setminus \sigma(T) = \text{oblast regularity } \pi(T)$,
- $\lambda \in \sigma(T) \Leftrightarrow$ existuje posloupnost jednotkových vektorů $(x_n)_{n < \omega}$, pro niž $(T - \lambda I)x_n \rightarrow 0$,
- $\lambda \in \sigma(T) \Leftrightarrow \text{Ran}(T - \lambda I) \neq \mathcal{H}$.

Poučky, které *nemůžeme* aplikovat, jsou tedy vesměs pouze ty, které se explicitně odvolávají na normu operátoru nebo komutaci $\text{Re } B, \text{Im } B$ (komutace neomezených operátorů vůbec je téma, kterému se teprve budeme věnovat).

Symetrické operátory

Některé z pouček výše nám pomohou pohlížet novými očima na *symetrické operátory*. Operátor A nazveme symetrickým, pokud pro každou dvojici vektorů $x, y \in D(A)$ platí $(Ax, y) = (x, Ay)$. Pokud se ale vymežíme na hustě definované operátory, jazyk sdružených operátorů nabízí elegantní *ekvivalentní definici*:

Definice. Operátor $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ nazveme symetrickým, jestliže platí $A \subset A^*$.

Skutečně: $A \subset A^*$ implikuje $D(A) \subset D(A^*)$ a to znamená, že pro každý vektor $x \in D(A)$ existuje A^*x takové, že $(Ax, y) = (x, Ay)$ pro všechna $y \in D(A)$. Ekvivalentní definice by nefungovala pro operátory, které nejsou hustě definované – ty mezi symetrické *nezařadíme* (!).

Jestliže se nám podaří najít rozšíření symetrického operátoru $A' \supseteq A$, které je rovněž symetrické, nazývá se *symetrickým rozšířením* A . Zajímavé je, že z důvodu $A \subset A^*$ můžeme také psát

$$A \subset A' \subset (A')^* \subset A^* \quad (6)$$

Protože A je z *definice* hustě definovaný a A^* je nadmnožinou A , je logicky také hustě definovaný a A lze uzavřít (sdružením sdružení). Operátory A a A^* mají – v obecné platnosti – stejný sdružený operátor A^* a platí tedy také

$$A \subset \bar{A} \subset A^* = (\bar{A})^* \quad (7)$$

Kromě situací, kdy A již uzavřený byl, tak **uzávěr je automaticky symetrickým rozšířením**, které **vždy existuje**.

Při symetrickém rozšiřování symetrického operátoru (a zužování jeho sdruženého operátoru) můžeme dosáhnout situace, kdy již nelze pokračovat – kdy žádné větší rozšíření už by symetrické nebylo. Operátor takto

získaný se nazývá *maximální symetrický*. Všechny maximální symetrické operátory jsou uzavřené, protože jinak by podle poslední poznámky šly rozšířit ještě tímto způsobem.

Přitom může nastat, že důvodem, proč další symetrická rozšíření neexistují, je, že se A' a $(A')^*$ v podmínce (6) setkají a další odlišný operátor by se mezi ně již nevešel. Operátor A' , který se rovná svému sdružení, se nazývá *samosdružený*. Každý samosdružený operátor je maximální symetrický (a uzavřený a normální). U množin všech symetrických, resp. všech samosdružených operátorů na $\mathcal{H}$ se opět můžeme setkat s označením $\mathcal{L}_s(\mathcal{H})$, resp. $\mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$.

Jak uvidíme při mnoha příležitostech, samosdružené operátory mají v kvantové fyzice **zcela zásadní význam**, mimo jiné jako operátory popisující pozorovatelné fyzikální veličiny, který symetrické operátory **nemohou nahradit**. Zejména pro samosdružené operátory platí, co pro hermitovské: jejich spektrum je podmnožinou reálné osy. Nesamosdružené symetrické operátory (žádné) tuto vlastnost **nesplňují**.

Ověřování samosdruženosti neomezených operátorů je mnohem pracnější než ověřování symetrie. (Pro omezené oba koncepty splývají.) Proto se nám v budoucnu bude hodit množství konstrukcí, které samosdruženost zaručují. Uvedeme zatím jednu (7.2.11): pro každý $T \in \mathcal{L}_c(\mathcal{H})$ je T^*T pozitivní samosdružený operátor. Důkaz této povšimnutíhodné věty (která mimo jiné implikuje, že $D(T^*T)$, $D(TT^*)$ jsou také husté podprostory) využívá zajímavé charakterizace sdruženého operátoru pomocí jeho grafu, matematictěji založeným posluchačům doporučuji.

Pokud uzávěr je jediná operace, která symetrický operátor A dělí od samosdruženosti (tedy pokud $A^* = \bar{A}$), nazývá se takový *v podstatě samosdružený* – tehdy víme, že samosdružené rozšíření A existuje a je jednoznačné. Uvidíme později v semestru, že platí i opačná implikace. Stejný symetrický operátor ale obecně může mít i více než jedno samosdružené rozšíření. či může nastat situace, že rozšiřováním dojdeme k operátoru A' , který maximální již je, ale stále je jen vlastní podmnožinou $(A')^*$. Hledání samosdružených rozšíření symetrických operátorů, a s ním související otázka možných tvarů spekter symetrických operátorů, je velké a důležité téma, kterému budeme věnovat jednu část celého předmětu.

Absolutní spojitost funkcí

Prostory spojitých funkcí

Připomeňme formou rychlého shrnutí na úvod význam obvyklých značení prostorů spojitých funkcí.

$C(\Omega)$... (komplexní) funkce spojitě na oblasti Ω ,

$C^k(\Omega)$... funkce se spojitými (parciálními) derivacemi do k -tého řádu,

$C^\infty(\Omega)$... nekonečně diferencovatelné funkce,

$C_c(\Omega)$... spojitě funkce s kompaktním nosičem,

$C_c^\infty(\Omega)$... nekonečně diferencovatelné funkce s kompaktním nosičem, též testovací funkce,

$C_\infty(\Omega)$... funkce klesající k nule u hranice Ω ,

$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$... Schwartzův prostor rychle ubývajících funkcí.

Pro další informace, přehled a odvození vztahů mezi některými z těchto tříd čtenáře odkážeme v knize na příklad 2.6.14. (Autoři naše C_c značí C_0 .)

Absolutní spojitost

Připomeňme nejprve větu o absolutní spojitosti Lebesgueova integrálu:

Věta. Nechť $f \in L^1(X, d\mu)$. Platí:

$$\forall \varepsilon > 0 : \exists \delta > 0 : \forall M \subset X : \mu(M) < \delta \Rightarrow \int_M |f| d\mu < \varepsilon. \quad (1)$$

Uvažujme $X = I = (a, b)$, interval v $\mathbb{R}$ (krajní body mohou být i nekonečné), a Lebesgueovu míru λ . Vezměme nějakou funkci $g \in L^1(I)$. Do věty o absolutní spojitosti integrálu dosadíme M tvaru disjunktního sjednocení otevřených intervalů $(a_1, b_1), \dots, (a_N, b_N)$, dozvídáme se:

$$\forall \varepsilon > 0 : \exists \delta > 0 : \sum_{i=1}^N (b_i - a_i) < \delta \Rightarrow \sum_{i=1}^N \left| \int_{a_i}^{b_i} g(x) dx \right| \leq \sum_{i=1}^N \int_{a_i}^{b_i} |g(x)| dx < \varepsilon. \quad (2)$$

Jestliže nyní g má primitivní funkci G , integrály přes podintervaly (a_i, b_i) jdou vyhodnotit Newtonovou formulí jako rozdíly $G(b_i) - G(a_i)$. Vlastnost funkce G

$$\forall \varepsilon > 0 : \exists \delta > 0 : \sum_{i=1}^N (b_i - a_i) < \delta \Rightarrow \sum_{i=1}^N |G(b_i) - G(a_i)| < \varepsilon, \quad (3)$$

motivuje definici *absolutní spojitosti funkce*.

Provedeme jedno malé zobecnění, o derivaci g budeme uvažovat pouze lokální L^1 -integrabilitu. Podmínka se tím změní na součet intervalů, jejichž všechny krajní body leží v I (a tedy do I spadají celé uzavřené podintervaly $\langle a_i, b_i \rangle$), ale o nich již nepředpokládáme disjunktnost.

Definice. Nechť I je interval na reálné ose. Řekneme, že (tradiční!) funkce F je na I *absolutně spojitá*, platí-li

$$\forall \varepsilon > 0 : \exists \delta > 0 : \forall N \in \mathbb{N}, \forall a_1 \leq b_1 \leq a_2 \leq \dots \leq b_N \in I : \sum_{i=1}^N (b_i - a_i) < \delta \Rightarrow \sum_{i=1}^N |F(b_i) - F(a_i)| < \varepsilon. \quad (4)$$

Jak jsme viděli, absolutní spojitost je v tomto uvození motivovaná tím, že F je primitivní funkcí své derivace. Pro absolutně spojitě funkce tedy platí, že jejich derivace je lokálně L^1 -integrabilní a splňuje základní větu integrálního počtu,

$$F(y) = F(x) + \int_x^y F'(t) dt \quad (5)$$

pro libovolný uzavřený podinterval $\langle x, y \rangle \subset I$. Tato podmínka je absolutní spojitosti ekvivalentní.

Derivace ve slabém smyslu

Nechť $f, g \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$, nechť α je multiindex. Řekneme, že g je *slabou derivací* α -tého řádu funkce f , jestliže pro každou *testovací funkci* $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ platí

$$\int_{\mathbb{R}^n} f \partial^\alpha \varphi \, d\mathbf{x} = (-1)^{|\alpha|} \int_{\mathbb{R}^n} g \varphi \, d\mathbf{x}. \quad (6)$$

Jestliže slabá derivace existuje, je (až na volnost danou třídou L) jednoznačná. Označíme: $g = D^\alpha f$.

Tato definice je jednoduchou obměnou derivace v prostoru distribucí, vymezenou na regulární funkce. Jestliže by nějaká regulární funkce f měla derivaci, která je singulární, uvažujeme v rámci této definice, že slabou derivaci nemá. To se týká především funkcí, které jsou nespojitě z důvodu skoků.

Jestliže f nad $\mathbb{R}$ má slabou derivaci g , opět můžeme použít argument o absolutní spojitosti *integrálu* funkce g a ukázat, že na $\mathbb{R}$ se jedná o ekvivalentní podmínku absolutní spojitosti *funkce* f . Ovšem slabá derivace je pojem zobecnitelný i na vyšší dimenze $\mathbb{R}^n$.

Poznámka o inkluzích tříd L

Víme, že pro libovolnou dvojici $p, q \in \langle 1, \infty \rangle$, $p \neq q$, lze najít funkci, která leží v $L^p(\mathbb{R}) \setminus L^q(\mathbb{R})$. Pokud $p > q$, je takovou funkcí například

$$f(x) = \chi_{(1, \infty)}(x) x^{-1/q}, \quad (7)$$

v opačném případě naopak můžeme použít

$$f(x) = \chi_{(0, 1)}(x) x^{-1/q}. \quad (8)$$

Mezi žádnou dvojicí různých $L^p(\mathbb{R})$, $L^q(\mathbb{R})$ tedy neplatí relace inkluze.

Situace je ale jiná pro kompaktní interval I , protože protože odpadá možnost, že by integrál zdivergoval v okolí nekonečna. Vskutku, rozdíl $L^p(\mathbb{R}) \setminus L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R})$ je prázdný pro každé p :

Věta. Nechť Ω je otevřený interval v $\mathbb{R}$, nechť $1 \leq p \leq \infty$. Libovolná funkce $f \in L^p(\Omega)$ je také lokálně integrabilní.

Důkaz. Buď $K \subset \Omega$ kompaktní. Použijeme Hölderovu nerovnost na součin $f \chi_K$:

$$\int_K |f(x)| \, d\mathbf{x} = \int_\Omega |f(x) \chi_K(x)| \, d\mathbf{x} \leq \left| \int_\Omega |f(x)|^p \, d\mathbf{x} \right|^{1/p} \left| \int_K 1 \, d\mathbf{x} \right|^{1/q} = \|f\|_p |K|^{1/q} < \infty. \quad (9)$$

Jinými slovy třída $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R})$ obsahuje všechny L^p jako podmnožiny.

Sobolevovy prostory

Sobolevovy prostory $W^{k,p}(\Omega)$ jsou prostory funkcí z $L^p(\Omega)$, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ otevřená, takových, že slabé derivace $D^\alpha f$ všech řádů $|\alpha| \leq k$ jsou také třídy $L^p(\Omega)$. Podmínka $f \in W^{k,p}$ je silnější než $f \in W^{k',p}$ pro $k > k'$, takže platí odpovídající inkluze i mezi prostory.

Prostory $W^{k,p}$ mají blízký vztah k absolutní spojitosti a budou pro nás fungovat především jako zkratka k ní. Jak jsme stanovili dříve, každá funkce nad $\mathbb{R}$, která vůbec má slabou derivaci, je absolutně spojitá (což v rámci Lebesgueovy teorie znamená: je skoro všude rovna funkci, která je absolutně spojitá, nebo: obsahuje, jakožto třída funkcí, reprezentační funkci, která je absolutně spojitá), a podmínka být třídy L^p je vždy silnější než L^1_{loc} . Tedy například prostor $W^{1,p}(\mathbb{R})$ je tvořen funkcemi, které jsou absolutně spojitě a L^p -integrabilní včetně své derivace.

Platí i mnohem silnější tvrzení, obzvláště užitečné potom ve vícerozměrných prostorech:

Věta (O. Nikodým (1933)). Nechť $1 \leq p \leq \infty$, nechť $\Omega \in \mathbb{R}^n$ otevřená konvexní množina. Jestliže funkce $f \in W^{1,p}(\Omega)$, pak pro skoro všechna $x_1, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_n$ je funkce

$$g(x) = f(x_1, \dots, x_{k-1}, x, x_{k+1}, \dots, x_n) \quad (10)$$

absolutně spojitá na $\{y \in \Omega \mid y_i = x_i \forall i \neq k\}$ a L^p -integrabilní. Naopak, je-li $f \in L^p(\Omega)$, $|\nabla f| \in L^p(\Omega)$ a platí-li podmínka absolutně spojitých zúžení f na skoro všechny linie rovnoběžné se souřadnými osami, pak $f \in W^{1,p}$.

Sobolevovy prostory snoubí absolutní spojitost s Lebesgueovým pojetím funkce. V jednorozměrném případě z vlastnosti, že každá třída obsahuje reprezentační funkci v tradičním smyslu, která je absolutně spojitá, má smysl mluvit o hodnotě $f \in W^{k,p}$ v bodě – myslí se tím hodnota této reprezentační funkce. Tato vlastnost se pak přenáší při $n > 1$ na skoro všechny body. Tvrzení výše je konstruované tak, že roli derivace přejímají parciální derivace podle jednotlivých souřadnic.

Sobolevovy prostory jsou úplné vůči normě

$$\left(\sum_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha f\|_{L^p}^p \right)^{1/p} \quad (11)$$

či ekvivalentní normě

$$\sum_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha f\|_{L^p} \quad (12)$$

a tedy Banachovy.

Zvláštní případ je volba $p = 2$, při níž označujeme $W^{k,2} =: H^k$. Prostory H^k splňují dokonce podmínku Hilbertových prostorů, čtenář snadno v rámci procvičení doplní k normě (11) skalární součin.

Sobolevův prostor $W^{k,p}(\Omega)$ také obsahuje všechny testovací funkce z množiny $C_c^\infty(\Omega)$. Co je zajímavé, v případě $\Omega = \mathbb{R}^n$ (pro podmnožiny platí dodatečné podmínky) platí, že Sobolevův prostor můžeme získat z $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ zúplněním vůči normě (11). Platí tedy, že pro každou funkci z $W^{k,p}(\mathbb{R}^n)$ existuje posloupnost testovacích funkcí, která k ní v normě (11) konverguje.

Uvidíme, že Sobolevovy prostory hrají důležitou roli jako definiční obory operátorů. Například pro jednorozměrný operátor hybnosti $P : \psi \mapsto -i\psi'$ by přirozený definiční obor diktoval podmínky $\psi, \psi' \in L^2(\mathbb{R})$, s touto volbou bychom ale zavedli operátor, který by nebyl symetrický (natož pak samosdružený). Pro symetrii potřebujeme zaručit podmínku

$$(\varphi, P\psi) = (P\varphi, \psi), \forall \varphi, \psi \in D(P), \quad (13)$$

která je ekvivalentní možnosti integrace per partes, protože bychom chtěli argumentovat

$$(\varphi, P\psi) = -i \int_{\mathbb{R}} \varphi^*(x) \psi'(x) dx = -i [\varphi^*(x) \psi(x)]_{-\infty}^{\infty} + i \int_{\mathbb{R}} \varphi'^*(x) \psi(x) dx = 0 + \int_{\mathbb{R}} (-i\varphi'(x))^* \psi(x) dx = (P\varphi, \psi). \quad (14)$$

Ovšem skutečnost, že integrováním funkce $f'g + fg'$ dostaneme fg , je podmíněna právě absolutní spojitostí, kterou musíme k předpokladům doplnit.

Poznatky o absolutně spojitých funkcích

Uvedeme na závěr dvě důležité vlastnosti funkcí z prostoru $H^1(J)$, kde J je interval v $\mathbb{R}$. Jak již zaznělo, ač jeho funkce jsou Lebesgueovy funkce, jsou absolutně spojitě a tedy má smysl mluvit o jejich hodnotách v bodech x .

Za prvé z definic samotných není vyloučeno, že pro otevřený interval J s některým krajním bodem konečným by nemohly funkční hodnoty divergovat v okolí tohoto bodu. Podmínka absolutní spojitosti již svým zápisem vyžaduje, aby $f(x)$ bylo konečné v každém $x \in J$, ale o limitě nic netvrdí. Nicméně se snadno přesvědčíme, že v případě (silnější!) podmínky $H^1(J)$ tato konečnost porušena nebude.

Věta. Nechť J má konečný krajní bod, nechť $f \in H^1(J)$. Pak $f(x)$ má v tomto krajním bodě konečnou limitu.

Důkaz. Uvažujme bez újmy na obecnosti $J = (a, b)$, $-\infty \leq a < b < \infty$ (tedy pravý krajní bod konečný). Zvolme pevně $c \in J$. Nechť dále $x \in (c, b)$. Konečnost limity $\lim_{x \rightarrow b-} f(x)$ je ekvivalentní otázce, zda

$$\lim_{x \rightarrow b-} \int_c^x f'(t) dt = \lim_{x \rightarrow b-} f(x) - f(c) \quad (15)$$

konverguje. Ovšem integrál uvnitř limity můžeme psát jako

$$\int_a^b f'(t) \chi_{(c,x)}(t) dt, \quad (16)$$

což je díky omezenosti intervalu (c, x) integrál součinu dvou funkcí z $L^2(a, b)$, a protože $\chi_{c,x}$ konverguje k $\chi_{c,b}$ v $L^2(a, b)$ -normě při $x \rightarrow b-$, konverguje také tento výraz ke konečné hodnotě

$$\int_a^b f'(t) \chi_{(c,b)}(t) dt, \quad (17)$$

a $f(x)$ k hodnotě o $f(c)$ větší.

Důsledek. Prostory $H^1((a, b))$ a $H^1((a, \bar{b}))$, obecněji $H^1(J)$ a $H^1(\bar{J})$, jsou tvořené stejnými funkcemi.

Jestliže tímto máme ustanoveno, že limity funkcí z $H^1(J)$ konvergují v konečných krajních bodech, podívejme se ještě na případ nekonečných krajů intervalu J . Je zřejmé, že limitou nemůže být žádné nenulové číslo, ale stále by byla možnost, že funkce limitu nemá.

Věta. Nechť J má některý krajní bod v nekonečnu, nechť $f \in H^1(J)$. Pak $f(x)$ má v tomto bodě limitu 0.

Důkaz. Zkoumejme funkci $g(x) = |f(x)|^2 = f(x)^* f(x)$. Snadno se přesvědčíme, že z absolutní spojitosti f plyne, že i g je absolutně spojitá. Je tedy integrálem své derivace, pro $c, d \in J$ platí

$$\int_c^d (f'(t)^* f(t) + f(t)^* f'(t)) dt = |f(d)|^2 - |f(c)|^2. \quad (18)$$

Nechť opět $b = +\infty$ je zkoumaným krajním bodem. Protože z definice prostoru $H^1(J)$ jsou $f(x)$ i $f'(x)$ třídy $L^2(a, b)$, spěje také (18) ke konečné limitě

$$\int_c^\infty (f'(t)^* f(t) + f(t)^* f'(t)) dt =: l, \quad (19)$$

když $d \rightarrow +\infty$, a odsud má limitu i $|f(x)|^2 \xrightarrow{x \rightarrow \infty} |f(c)|^2 + l$. Ovšem s L^2 -integrabilitou na nekonečném intervalu je jedinou konzistentní limita nula.

První postulát kvantové fyziky

Bylo potřeba připravit základy v jaderných operátorech a obecně neomezených samosdružených operátorech, abychom mohli vyslovit a diskutovat znění prvního postulátu kvantové fyziky ve formě, v jaké jej budeme uvažovat.

Obecně platí, že u postulátů kvantové fyziky se můžete setkat s mnoha formulacemi zahrnujícími malé i větší rozdíly. I v učebnici B–E–H je postupně diskutováno několik reformulací, či alternativ, pod stejnými označeními, což může být celkem matoucí. Přístup zvolený zde je pokusem o celkem širokou obecnost bez těchto mezikroků, umožněný tím, že s kvantovou fyzikou máte již značné zkušenosti a nepřekvapí vás.

Postulát 1 (o matematické korespondenci).

- Každému kvantovému systému přísluší komplexní Hilbertův prostor $\mathcal{H}$, který nazýváme stavovým prostorem daného systému.
- Každému stavu systému odpovídá nějaký statistický operátor (matice hustoty) na stavovém prostoru.
- Každé pozorovatelné veličině daného systému odpovídá nějaký samosdružený operátor na $\mathcal{H}$.

V případě bodu a) se můžeme setkat i s omezenější formulací, kdy již samotný postulát vymezíme pouze na separabilní Hilbertovy prostory. Vzhledem k tomu, že fyzice taková změna nijak výrazně neublíží, v některých oblastech během semestru můžeme separabilitu pro zjednodušení předpokládat, ale zatím ponechme takto.

Statistické operátory

S pojmem *statistický operátor* jsme se nesetkali, ale jeho definice je s naší přípravou již jednoduchá: jedná se o *jaderný* operátor W , který je vymezen dvěma dalšími podmínkami, $W \geq 0$ a $\text{Tr } W = 1$. Díky našim znalostem o jaderných a jiných omezených operátorech můžeme hned několik jeho vlastností jmenovat:

- statistický operátor je hermitovský, a tedy normální,
- má nejvýše spočetně mnoho vlastních čísel, která jsou nezáporná a jdou seřadit se svými násobnostmi do nerostoucí posloupnosti,
- vlastní prostory jsou konečněrozměrné a vzájemně ortogonální,
- součet vlastních hodnot je jedna.

Dokážeme tedy každý statistický operátor psát ve formě

$$W = \sum_{n < n_0 \leq \omega} w_n E_n, \quad w_0 \geq w_1 \geq \dots > 0, \quad \sum_{n < n_0} w_n = 1, \quad (1)$$

kde projektory E_n jsou *jednorozměrné* a vzájemně ortogonální, jinými slovy, jedná se o nejvýše spočetnou afinní kombinaci jednorozměrných projektorů. I množina všech statistických operátorů je uzavřená vůči provádění dalších afinních kombinací, které nazveme *směšováním* stavů W . Posloupnost $(w_n)_{n < n_0}$ nic nebrání rozšířit na (potenciálně zobecněnou) posloupnost $(w_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$ nulami, a tomuto kroku se nebudeme bránit, ale myšlenkou rozkladu (1) je, že *existuje* taková suma, která více než spočetně mnoho členů nevyžaduje.

Jednorozměrné projektory E mají mezi statistickými operátory zvláštní pozici v tom, že jsou samy svým rozkladem (1) s $n_0 = 1$, $w_0 = 1$, $E_0 = E$. Na množině statistických operátorů, která je díky uzavřenosti vůči afinním kombinacím konvexní, tvoří hranici, a nejdou napsat jako směs jiných dvou stavů. Z tohoto důvodu je nazýváme *čistými stavy* a všechny ostatní volby W stavy *smíšenými*.

Co možná z kurzu KVANO2, kde smíšené stavy byly zavedeny, nebylo patrné, je, že nikdy, ani na nespočetnědimenzionálním prostoru, není třeba uvažovat více než spočetné (především nepotřebujeme *spojité*) směsi. Rozklad (1) již sám o sobě není jednoznačný, pokud má W mimo své jádro degenerované vlastní prostory, a

k němu vlivem směřování různých stavů přibývá i alternativa s projektory, které nejsou vzájemně ortogonální, ale každá, libovolně získaná, směs, *nějaký* nejvýše spočetný rozklad tvaru (1) umožňuje.

Z vlastností statistického operátoru W lze najít ortonormální báze $(\varphi_n)_{n < \dim \mathcal{H}}$ splňující

$$W\varphi_n = w_n\varphi_n, \quad \forall n < \dim \mathcal{H}. \quad (2)$$

Operátor W je potom směsí čistých stavů daných projektory E_n na podprostory dané těmito vektory φ_n . Protože takových členů s nenulovým w_n je nejvýše spočetně mnoho, je výhodné ve většině situací zkoumat chování pro čisté stavy E_n samotné, a namísto projektorů je charakterizovat těmito jednotkovými *stavovými vektory* φ_n . Bez výjimky pro všechny statistické předpovědi kvantové mechaniky platí, že známe-li jejich hodnoty pro stavové vektory φ_n , pak dosazení smíšeného stavu W odpovídá zprůměrování těchto předpovědí s vahami danými w_n . To je důvodem, proč se v úvodních kurzech kvantové mechaniky postulát 1 běžně formuluje ve verzi, kde stavy systému jsou popsány paprsky v $\mathcal{H}$, i když se jedná o objektivně slabší formulaci. Upozorníme však na to, že další běžný výklad, kdy matematickým objektem přiřazeným fyzikálnímu stavu je jednotkový stavový vektor sám, již není pro formulaci postulátu vhodný, protože se nejedná o *jednoznačné* přiřazení.

Jestliže tedy řekneme „stav φ “, myslíme tím vždy „čistý stav popsaný projektorem E_φ na podprostor $\{\varphi\}_{\text{lin}}$ “.

V kvantové mechanice se běžně člověk setkává s potřebou počítat *překryv* stavových vektorů φ, ψ , definovaný jako $P(\varphi, \psi) := |\langle \varphi | \psi \rangle|^2$. V jazyce projektorů platí $P(\varphi, \psi) = \text{Tr}(E_\varphi E_\psi)$ a tento vzorec má přímočaré zobecnění na překryv dvou statistických operátorů W_1, W_2 jako

$$P(W_1, W_2) := \text{Tr}(W_1 W_2), \quad (3)$$

lineární v obou argumentech. Jedná se o hodnotu v intervalu $\langle 0, 1 \rangle$, ač součin dvou pozitivních operátorů si obecně pozitivitu nezachovává. Zvláštní případ

$$P(W, W) = \text{Tr} W^2 \in \langle 0, 1 \rangle \quad (4)$$

nazveme *čistotou* stavu W . Z definice je evidentní, že se jedná o součet druhých mocnin vah w_n a jedinou možností, jak dosáhnout horní meze 1, je čistý stav, smíšené stavy jsou tedy takové, které mají čistotu menší než 1. Další ekvivalentní kritérium čistého stavu je podmínka $W^2 = W$.

Samosdruženost

Význam bodu c) se projeví zejména s postulátem měření, který vyslovíme až později, opět po nějakých dalších matematických vsuvkách. Prozatím jej berme jako daný a podívejme se, jak ovlivní náš pohled na některé základní fyzikální systémy – například již volnou částici na přímce.

Popis volné bezspinové kvantové částice je určen volbou za stavového prostoru $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ a několika základních pozorovatelných – operátoru polohy, hybnosti a energie (Hamiltoniánu). Že se jedná skutečně o popis polohy v tom smyslu, že vlnovým funkcím přikládá význam hustoty pravděpodobnosti, bude plynout až ze druhého postulátu (měření), a energie v tom smyslu, že částice s daným Hamiltoniánem se chová jako volná, až ze třetího (časový vývoj), ale zatím se alespoň můžeme pobavit o tom, jak tyto jednoduché operátory zapadají do naší definice samosdruženosti.

Poloha

Operátor **polohy** je určen předpisem

$$Q: (L^2(\mathbb{R})) \rightarrow L^2(\mathbb{R}): \psi(x) \mapsto x\psi(x), \quad (5)$$

který, aby vůbec pravá strana dávala smysl jako vektor v $L^2(\mathbb{R})$, sám vymezuje *přirozený definiční obor*

$$D(Q) = \{\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}) \mid x\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})\}. \quad (6)$$

Ukážeme, že *na tomto oboru* se jedná o neomezený, ale samosdružený operátor.

Že se jedná o lineární operátor, o tom není sporu. Ovšem první nutnou podmínkou pro samosdruženost je hustá definovanost, tedy $D(Q) = \mathcal{H}$, a ta už není vidět na první pohled. Jedná se ovšem typicky o velmi rychlé ověření: často se povede ukázat, že součástí definičního oboru je nějaký jednoduchý prostor, o kterém už samotným víme, že je v $\mathcal{H}$ hustý, a tedy hustotu zajistí už tato podmnožina $D(T)$. V případě operátoru Q postačí takto vzít Schwartzův prostor $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, který je uzavřený vůči násobení jakýmkoli polynomem, tedy i x .

Podobně snadno se přesvědčíme o symetrii Q . To bychom v principu nemuseli, protože podmínka samosdruženosti je formulovaná podobně a šlo by k ní přistoupit rovnou, ale a) symetrie je na ověření jednodušší, b) pokud by nevyšla, nemá cenu pokračovat a ušetříme si práci a c) může se poštěstít, že některé získané poznatky použijeme znovu. Symetrie Q je dána podmínkou

$$\forall \varphi, \psi \in D(Q): (\varphi, Q\psi) \stackrel{?}{=} (Q\varphi, \psi), \quad (7)$$

tedy

$$\forall \varphi, \psi \in L^2(\mathbb{R}), x\varphi, x\psi \in L^2(\mathbb{R}): \int_{\mathbb{R}} \varphi(x)^* (x\psi(x)) dx \stackrel{?}{=} \int_{\mathbb{R}} (x\varphi(x))^* \psi(x) dx, \quad (8)$$

ovšem na pravé straně máme evidentně dvakrát stejný integrál.

Je tedy $D(Q) \subset D(Q^*)$ a pro samosdruženost zbývá dokázat, že $D(Q^*)$ neobsahuje žádné nové vektory, které již do $D(Q)$ nepatřily – jinými slovy, že každý vektor $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$, který splňuje

$$\exists \eta \in L^2(\mathbb{R}): \forall \psi \in D(Q): (\eta, \psi) = (\varphi, Q\psi), \quad (9)$$

také splňuje podmínky (6) (a že potom $\eta = Q\varphi$, ale to je již jasné z $Q \subset Q^*$). **Toto je nový krok** ve výpočtu, bez kterého by tvrdit samosdruženost Q nebylo oprávněné.

Jak se o této skutečnosti přesvědčit? Rozepišme

$$(\eta, \psi) - (\varphi, Q\psi) = \int_{\mathbb{R}} \eta(x)^* \psi(x) dx - \int_{\mathbb{R}} \varphi(x)^* x\psi(x) dx = \int_{\mathbb{R}} (\eta(x) - x\varphi(x))^* \psi(x) dx \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall \psi \in D(Q) \quad (10)$$

a na základě hustoty $D(Q)$ v $\mathcal{H}$ by se chtělo říci, že $(\eta(x) - x\varphi(x))$ je nutně nulovým vektorem v $L^2(\mathbb{R})$, pro $\varphi \in D(Q)$ že zvolíme $\eta = Q\varphi$ a pro jiná φ nebude existovat $\eta \in L^2(\mathbb{R})$, aby se $x\varphi(x)$ rovnalo. Dopouštíme se ovšem potenciální chyby, že rovnost (10) by mohla být splněna s nějakou funkcí $\eta(x) - x\varphi(x)$, která sama $L^2(\mathbb{R})$ není, pouze má náhodou nulový integrál v součinu s libovolným ψ , což musíme vyloučit!

Jestliže dokážeme, že $\eta(x) - x\varphi(x) \in L^2(\mathbb{R})$, pak předchozí argument již lze použít a důkaz dokončit. Pokud (10) platí pro všechna $\psi \in D(Q)$, zvolme speciálně $\psi := \psi_0 \chi_{(-n,n)}$ pro nějaké pevné ψ_0 a $n \in \mathbb{N}$. Výsledek tohoto součinu neopustí $D(Q)$, protože stále je prvkem $L^2(\mathbb{R})$ a jeho x -násobek rovněž – mimo interval $(-n, n)$ násobíme nulu a uvnitř něj hodnoty $|x|$ jsou shora omezeny n . Proto

$$\forall \psi_0 \in L^2(\mathbb{R}): \forall n \in \mathbb{N}: \int_{\mathbb{R}} (\eta(x) - x\varphi(x))^* \chi_{(-n,n)}(x) \psi_0(x) dx = \int_{\mathbb{R}} (\chi_{(-n,n)}(x) (\eta(x) - x\varphi(x)))^* \psi_0(x) dx = 0 \quad (11)$$

Funkce $\chi_{(-n,n)}(x)(\eta(x) - x\varphi(x))$ ovšem $L^2(\mathbb{R})$ integrabilní již je určitě: je rozdílem $\chi_{(-n,n)}\eta$, což je díky (9), a součinu $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$ s omezenou funkcí $\chi_{(-n,n)}(x)x$. O této funkci tedy již můžeme tvrdit, že je nulová v $L^2(\mathbb{R})$, a proto $\eta(x) - x\varphi(x)$ je nula skoro všude na $(-n, n)$. Nakonec sjednocením všech n se skutečně dozvídáme, že je nula skoro všude na $\mathbb{R}$, takže $\eta(x) - x\varphi(x) \in L^2(\mathbb{R})$, což byl poslední zbývajících element odvození.

Hybnost

Předchozí je jen jedna ukázka toho, co vskutku ověření samosdruženosti může obnášet, a ne vždy sleduje stejné triky. Srovnáme v následujícím s ověřením samosdruženosti operátoru **hybnosti**, který známe daný pouze svým předpisem

$$P: (L^2(\mathbb{R})) \rightarrow L^2(\mathbb{R}): \psi(x) \mapsto -i\hbar\psi'(x). \quad (12)$$

Konstanta $\hbar$ má pouze rozměrový charakter a pro naše účely budeme operátor zkoumat bez ní, tedy $-i\psi'(x)$. Definiční obor není zadán, zkusme tedy uvažovat přirozený definiční obor

$$D_0 = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \psi' \in L^2(\mathbb{R})\}. \quad (13)$$

Do D_0 opět patří $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ jako podmnožina, takže s hustou definovaností není problém. Dalším krokem je symetrie. Necht' $\varphi, \psi \in D_0$, zkusme

$$(P\varphi, \psi) \stackrel{?}{=} (\varphi, P\psi) \quad (14)$$

$$\int_{\mathbb{R}} (-i\varphi'(x))^* \psi(x) dx \stackrel{?}{=} \int_{\mathbb{R}} \varphi(x)^* (-i\psi'(x)) dx$$

Můžeme toto říci? Narážíme na problém zmíněný na úvodní hodině: volbou funkce $\varphi(x)$ skokové, jejíž derivace je v $L^2(\mathbb{R})$ nulová, můžeme dosáhnout toho, že první integrál je nulový, zatímco druhý má zcela libovolnou hodnotu. Derivační operátor s přirozeným definičním oborem (13) tedy není symetrický!

Bude potřeba obor D_0 okrájet, aby takovéto sporné funkce neobsahoval. Přesně za tímto účelem jsme si zavedli absolutní spojitost. Upravme tedy definiční obor výrazu (12) na funkce, které kromě podmínek (13) vyžadují ještě tuto vlastnost. Taková množina je Sobolevovým prostorem $H^1(\mathbb{R})$. Hustou podmnožinu $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ obsahuje nadále.

S podmínkou absolutní spojitosti φ, ψ je integrand v

$$(P\varphi, \psi) - (\varphi, P\psi) = i \int_{\mathbb{R}} (\varphi'(x)^* \psi(x) + \varphi(x)^* \psi'(x)) dx \quad (15)$$

derivací absolutně spojitě funkce $\varphi(x)^* \psi(x)$ a jeho integrálem je tedy

$$\int_{\mathbb{R}} (\varphi'(x)^* \psi(x) + \varphi(x)^* \psi'(x)) dx = [\varphi(x)^* \psi(x)]_{-\infty}^{+\infty} =: \lim_{x \rightarrow +\infty} \varphi(x)^* \psi(x) - \lim_{x \rightarrow -\infty} \varphi(x)^* \psi(x). \quad (16)$$

To je podle našich vědomostí o absolutní spojitosti již nula a situace symetrie je zachráněna.

Ukážeme, že volba definičního oboru $D(P) = H^1(\mathbb{R})$ zajišťuje vskutku i samosdruženost takového operátoru P . Důkaz zahrnuje nějaké podobné myšlenky jako v případě Q , ale upozorníme na to, že nelze začít stejným způsobem, tj. hledat, jestli $\eta - (-i\varphi') \in L^2(\mathbb{R})$. Důvodem je, že k získání takové podmínky bychom potřebovali integraci per partes, a tím využívali absolutní spojitosti funkce φ , kterou teprve máme dokazovat!

Jednou ze společných myšlenek je vymezení se na kompaktní intervaly $K = \langle a, b \rangle \subset \mathbb{R}$ a ukázání patřičných vlastností funkcí $\varphi \in D(P^*)$ na nich, poté rozšíření na celé $\mathbb{R}$. K tomu ale dospějeme jiným trikem než zúžením funkcí ψ na K , protože takové funkce by v krajních bodech měly skoky a opustily $D(P)$.

Z tohoto důvodu vyrobíme *další zúžení* operátoru P na $\dot{P} \subset P$, vymezený definičním oborem

$$D(\dot{P}) := \{\psi \in H^1(\mathbb{R}) \mid \text{supp } \psi \text{ je kompaktní}\} = H^1(\mathbb{R}) \cap C_c(\mathbb{R}), \quad (17)$$

který je stále v $\mathcal{H}$ hustý. O něm již netvrdíme samosdruženost. Použijeme ale zajímavý argument, kdy ukážeme, že P je sdruženým operátorem $\dot{P}$. Protože $\dot{P}$ si zachovává symetrii a naše P je symetrickým rozšířením tohoto pomocného operátoru, platí

$$\dot{P} \subset P \subset P^* \subset (\dot{P})^*, \quad (18)$$

ovšem tím, že v této řadě inkluzí dáme rovnost mezi druhý a čtvrtý člen, již vyplyne $P = P^*$.

Plánem práce tedy je ukázat, že $(\dot{P})^* = P$, což znamená:

$$\varphi \in L^2(\mathbb{R}) \wedge \exists \eta \in L^2(\mathbb{R}) : \forall \psi \in D(\dot{P}) : (\eta, \psi) = (\varphi, \dot{P}\psi) \implies \varphi \in D(P), \eta = P\varphi. \quad (19)$$

Tím dokážeme $\dot{P}^* \subset P$, druhá inkluze je již řečena v (18). Zvolíme postup příkladu 7.2.7 (kde je udělán obecněji pro interval $J \subset \mathbb{R}$, což budeme držet na paměti).

Integrál $(\varphi, \dot{P}\psi)$, vystupující v (19), *pořád* nemůžeme transformovat pomocí per partes, přistoupíme tedy k problému z druhé strany a per partes použijeme na (η, ψ) , kde ψ derivovat můžeme a η bychom potřebovali integrovat. Z předpokladu je $\eta \in L^2(\mathbb{R}) \subset L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R})$, takže na kompaktním intervalu K skutečně integrovat lze jako

$$\bar{\varphi}_K(x) := \int_a^x i\eta(t) dt + c, \quad c \in \mathbb{C}. \quad (20)$$

Jakožto integrál L^1_{loc} -funkce na kompaktu je $\bar{\varphi}_K$ absolutně spojitě, omezené, odsud L^2 -integrabilní, a splňuje $-i\bar{\varphi}'_K = \eta$. Má tedy všechny předpoklady náležitosti do $H^1(K) = D(P)$, což jsou vlastnosti, které bychom rádi

ukázali i o φ . Cílem bude ukázat, že $\bar{\varphi}_K$ se na K shoduje s φ a významem c potom bude $\varphi(a)$, ale na to je ještě brzy.

Volme nyní $\psi_K \in D(\dot{P})$ takové, že $\text{supp } \psi_K \subset K$. Z (19) se dozvídáme

$$(\eta, \psi_K) = (\varphi, \dot{P}\psi_K) = (\varphi, -i\psi'_K) = -i \int_{\mathbb{R}} \varphi(x)^* \psi'_K(x) dx = -i \int_K \varphi(x)^* \psi'_K(x) dx = (\varphi_K, \dot{P}\psi_K), \quad (21)$$

kde jsme si pracovníě označili $\varphi_K := \varphi \chi_K$, a zároveň platí

$$\begin{aligned} (\bar{\varphi}_K, \dot{P}\psi_K) &= -i \int_K \bar{\varphi}_K(x)^* \psi'_K(x) dx = -i[\varphi_K(x)^* \psi_K(x)]_a^b + i \int_K \bar{\varphi}'_K(x)^* \psi_K(x) dx = 0 + \int_K (-i\bar{\varphi}'_K(x))^* \psi_K(x) dx \\ &= (\eta, \psi_K). \end{aligned} \quad (22)$$

Protože máme dvě vyjádření pro stejné (η, ψ_K) , můžeme psát

$$\forall \psi_K \in D(\dot{P}), \text{supp } \psi_K \subset K: (\bar{\varphi}_K - \varphi_K, \dot{P}\psi_K) = 0. \quad (23)$$

Jak se přesvědčit, že odsud již plyne $\bar{\varphi}_K = \varphi_K$? Rozdíl $\bar{\varphi}_K - \varphi_K$ integrujeme *ještě jednou* a dostaneme funkci

$$\bar{\psi}_K(x) := \int_a^x i(\bar{\varphi}_K(t) - \varphi_K(t)) dt \quad (24)$$

patřící také do $H^1(K)$, navíc správnou volbou konstanty c (přispívající k integrálu členem $c(x-a)$) zajistíme, aby v obou krajních bodech a, b platilo $\bar{\psi}_K(x) = 0$ a tedy $\bar{\psi}_K(x)$ šla rozšířit na spojitou funkci na $\mathbb{R}$. Tím splňuje všechny náležitosti pro vektor ψ_K , který jsme používali v (23). Ovšem

$$\dot{P}\bar{\psi}_K = -i\bar{\psi}_K = \bar{\varphi}_K - \varphi_K \quad (25)$$

a vztah (23) pak říká, že $(\bar{\varphi}_K - \varphi_K, \bar{\varphi}_K - \varphi_K) = 0$ a tedy $\bar{\varphi}_K - \varphi_K = 0$ skoro všude na $\mathbb{R}$.

Ať jsme začali s jakýmkoli K , dozvídáme se, že funkce φ_K , tedy φ zúžená na K , je skoro všude rovna funkci $\bar{\varphi}_K$, která je absolutně spojitá, a její $-i \times$ derivací na intervalu K je $\eta(x)$. Absolutní spojitost tedy platí i pro celé φ a $-i\varphi' = \eta \in L^2(\mathbb{R})$. Funkce φ splňující předpoklad (19) tedy patří do $L^2(\mathbb{R})$, je absolutně spojitá a má v $L^2(\mathbb{R})$ derivaci, což jsou přesně podmínky pro $\varphi \in D(P)$, a $P\varphi = \eta$.

Jak jsme argumentovali před začátkem výpočtu, co jsme právě ukázali, je, že P je sdruženým operátorem $\dot{P}$. Rovnost $P = P^*$ pak plyne z řetězce inkluzí (18).

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 ψ z $D(T)$, $T = Q$ nebo P s kompaktním nosičem (u Q to znamenalo pouze zúžit ψ 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 ψ 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 φ 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 φ , $Q_+^* \psi$ 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 φ 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 χ , 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 φ, ψ 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 dosaďme 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. Přepišme 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 α . 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_α 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_α 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 φ , 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 α , 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_α , 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 α). 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.

Tensorový součin prostorů a operátorů

Tensorový součin zavedeme pro Hilbertovy prostory. Tensorovým součinem $\mathcal{H}_1$ a $\mathcal{H}_2$ rozumíme prostor $\mathcal{H} \stackrel{\text{ozn}}{=} \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, doprovázený zobrazením $\otimes : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}$, který splňuje vlastnosti:

- množina $\{x \otimes y \mid x \in \mathcal{H}_1, y \in \mathcal{H}_2\}$ je v $\mathcal{H}$ totální (tj. uzávěrem jejího lineárního obalu je celé $\mathcal{H}$),
- skalárním součinem $(u \otimes x, v \otimes y)$, kde $u, v \in \mathcal{H}_1, x, y \in \mathcal{H}_2$, je součin $(u, v)_{\mathcal{H}_1} (x, y)_{\mathcal{H}_2}$.

Ve volbě konkrétní konstrukce prostoru $\mathcal{H}$ a vektorového zobrazení $\otimes$ existuje velká volnost. Jednou z oblíbených definic je brát $\mathcal{H}$ jako prostor bilineárních forem nad $\mathcal{H}_1$ a $\mathcal{H}_2$: to zobecňuje Rieszovo lemma, že prostor lineárních forem nad $\mathcal{H}$ je izomorfní $\mathcal{H}$ samotnému. V B–E–H 4.6 najdete jinou definici, kdy se buduje vektorový prostor lineárních kombinací abstraktních dvojic (x, y) , které jsou brány za vzájemně lineárně nezávislé, a faktorizuje se podprostorem, který identifikuje všechny dvojice tvaru $[\sum_i \alpha_i x_i, \sum_j \beta_j y_j]$ s $\sum_{i,j} \alpha_i \beta_j [x_i, y_j]$. Podstatné je vědět, že

- realizace tensorového součinu existuje pro každou dvojici $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ alespoň jedna (tj. axiomy lze splnit),
- pro libovolné dvě realizace existuje izomorfismus, který mezi nimi výsledky $x \otimes y$ převádí.

Žádné tvrzení, se kterým se kdy setkáme, nezávisí na formě této realizace. Budeme proto svobodně používat označení $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2, x \otimes y$ vždy pro jednu konkrétní realizaci, adekvátní aktuální situaci.

Příklady

- Tensorový součin konečněrozměrných prostorů $\mathbb{C}^m, \mathbb{C}^n$ je dimenze $m \cdot n$ a tedy izomorfní $\mathbb{C}^{mn}$. Axiomy tensorového součinu splňuje například Kroneckerův součin

$$\otimes_K : \mathbb{C}^m \otimes_K \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^{mn} : (\alpha_1, \dots, \alpha_m) \otimes_K (\beta_1, \dots, \beta_n) = (\alpha_1 \beta_1, \alpha_1 \beta_2, \dots, \alpha_1 \beta_n, \alpha_2 \beta_1, \dots, \alpha_2 \beta_n, \dots, \alpha_m \beta_n), \quad (1)$$

můžeme tedy ve smyslu minulého odstavce brát $\mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n \equiv \mathbb{C}^{mn}$ a $\otimes \equiv \otimes_K$.

- Tensorový součin dvou Lebesgueových prostorů $\mathcal{H}_1 = L^2(X, d\mu)$ a $\mathcal{H}_2 = L^2(Y, d\nu)$ lze realizovat jako prostor funkcí $L^2(X \times Y, d(\mu \otimes \nu))$, tensorový součin vektorů bude představován

$$(f \otimes g)(x, y) = f(x)g(y). \quad (2)$$

Konkrétně pro Lebesgueovu míru nad $\mathbb{R}^n$ (či podoblastmi): $L^2(\mathbb{R}^m, d\mathbf{x}) \otimes L^2(\mathbb{R}^n, d\mathbf{y}) = L^2(\mathbb{R}^{m+n}, d\mathbf{x} d\mathbf{y})$.

- Tensorový součin prostoru $L^2(X, d\mu)$ s konečněrozměrným prostorem $\mathbb{C}^n$ je prostor funkcí zobrazujících z X to $\mathbb{C}^n$, splňujících

$$f \in L^2(X, d\mu) \otimes \mathbb{C}^n \Leftrightarrow \int_X \|f(\mathbf{x})\|^2 d\mu < \infty. \quad (3)$$

Označujeme $L^2(X, \mathbb{C}^n, d\mu)$; pro Lebesgueovu míru postačí $L^2(X, \mathbb{C}^n)$.

- Číselné těleso (v našem kontextu $\mathbb{C}$), brané jako jednorozměrný Hilbertův prostor, je v tensorovém součinu jednotkou: tensorový součin libovolného prostoru $\mathcal{H}$ s prostorem $\mathbb{C}$ je opět $\mathcal{H}$. Tensorový součin $x \in \mathcal{H}$ s vektorem $\alpha \in \mathbb{C}$ je jednoduše αx .

Tensorový součin bází

Jestliže označíme $(e_k)_{k < \dim \mathcal{H}_1}$, resp. $(f_l)_{l < \dim \mathcal{H}_2}$ nějaké ortonormální báze prostorů $\mathcal{H}_1$, resp. $\mathcal{H}_2$, pak množina

$$\{e_k \otimes f_l \mid k < \dim \mathcal{H}_1, l < \dim \mathcal{H}_2\} \quad (4)$$

je ortonormální báze tensorového součinu $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ (ve formulaci pro spočetněrozměrné prostory věta 4.6.5). O takto vzniklé bázi mluvíme jako o tensorovém součíně bází $(e_k)_{k < \dim \mathcal{H}_1}$ a $(f_l)_{l < \dim \mathcal{H}_2}$.

Důsledek tohoto poznatku je, že tensorový součin separabilních prostorů je opět separabilní, protože mohutnost vzniklé báze (4) je součinem mohutností $\{e_k\}$ a $\{f_l\}$ a pokud jsou obě konečné nebo spočetné, platí totéž i pro (4).

Tenzorový součin podprostorů $\mathcal{H}$

Jakmile je dán význam tenzorovému součinu *prostorů*, můžeme se bavit o tenzorovém součinu jejich *podprostorů* $G_1 \subset \mathcal{H}_1, G_2 \subset \mathcal{H}_2$ jakožto nějakého podprostoru $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

Provedeme to ve dvou krocích: nejprve zavedeme „algebraický tenzorový součin“ $G_1 \otimes G_2$ jako lineární obal tenzorových součinů vektorů z G_1 a G_2 , tedy množinu všech *konečných* lineárních kombinací takových vektorů. Pak nad touto konstrukcí učiníme uzávěr. Lze se totiž přesvědčit, že výraz

$$\overline{G_1 \otimes G_2} \quad (5)$$

splňuje kritéria předepsaná axiomy tenzorového součinu použitými na $\overline{G_1}$ a $\overline{G_2}$, což opravňuje označení

$$\overline{G_1 \otimes G_2} = \overline{G_1} \otimes \overline{G_2}. \quad (6)$$

Pokud G_1 i G_2 jsou *uzavřené* podprostory $\mathcal{H}_1$, resp. $\mathcal{H}_2$, pak jejich tenzorový součin je uzávěrem jejich algebraického tenzorového součinu $\otimes$ – netřeba dělat uzávěr na druhé straně podruhé.

Tento rozdíl mezi $\otimes$ a $\otimes$ je důležitý. V nekonečné dimenzi konečnými lineárními kombinacemi součinů vektorů z uzavřených podprostorů $G_{1,2}$ nedosáhneme na celý tenzorový součin $G_1 \otimes G_2$, dostaneme jen nějaký jeho neuzavřený podprostor. Ostatně za $G_{1,2}$ můžeme zvolit *celé* prostory $\mathcal{H}_{1,2}$. Za příklad si vezměme $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = G_1 = G_2 = L^2(\mathbb{R})$. Jak jsme stanovili výše, $G_1 \otimes G_2 = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}^2)$, ale $G_1 \otimes G_2$ je tvořen jen funkcemi, které jsou lineárními kombinacemi konečně mnoha funkcí faktorizovaného tvaru $f_i(x)g_i(y)$. Například funkce $1/(x^2 + y^2 + 1)$ patří do první množiny, ale do druhé ne.

Tenzorový součin operátorů

Důležitost uzávěru se projeví zejména na tenzorovém součinu operátorů. Je přirozené tenzorový produkt operátorů $A_1 \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1), A_2 \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ hledat pomocí lineárního rozšíření definičního vztahu

$$A(x \otimes y) := (A_1 x) \otimes (A_2 y). \quad (7)$$

To nás ovšem dovede pouze k operátoru s definičním oborem $D(A_1) \otimes D(A_2)$, který bychom označili $A_1 \otimes A_2$. Pokud operátory $A_{1,2}$ byly uzavřené, totéž nebude automaticky platit pro $A_1 \otimes A_2$ a pro mnoho aplikací bude potřeba uvažovat

$$A_1 \otimes A_2 := \overline{A_1 \otimes A_2}. \quad (8)$$

Určit uzávěr je ovšem obecně mnohem složitější operace, ke které nám již nedopomůže linearita, ale musíme používat i limitní argumenty, najít, které prvky $D(A_1) \otimes D(A_2)$ do jeho definičního oboru patřit budou a pro které limita neexistuje apod. Pokud si ji lze ušetřit a pracovat nějakým způsobem s $A_1 \otimes A_2$, je to vždy výhodné.

Poznámka. Značení, které zde zavádíme, je vědomě a záměrně *odlišné* od B–E–H – viz poznámka 7.6.1.

Zvláštní případ tvoří tenzorový součin operátorů, které jsou omezené. Platí totiž

Lemma (5.7.1). Nechť $B_1 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1), B_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$. Pak operátor $B_1 \otimes B_2$ je omezený s normou $\|B_1 \otimes B_2\| \leq \|B_1\| \|B_2\|$.

Takto vzniklý operátor definovaný na $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, které je hustou podmnožinou $\mathcal{H}$, má jednoznačné rozšíření na omezený operátor na celém $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ stejné normy (věta o spojitém rozšíření). Existence jednoznačné limity je tedy zaručena v každém bodě. Navíc nerovnost norem z tvrzení lemmatu lze posílit na rovnost:

$$\|B_1 \otimes B_2\| = \|B_1\| \|B_2\|, \quad (9)$$

protože snadno získáme i opačnou nerovnost:

$$\|B_1 \otimes B_2\| = \sup_{\substack{z \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \\ \|z\|=1}} \|(B_1 \otimes B_2)z\| \geq \sup_{\substack{x \in \mathcal{H}_1, y \in \mathcal{H}_2 \\ \|x\|=\|y\|=1}} \|(B_1 \otimes B_2)(x \otimes y)\| = \sup_{\substack{x \in \mathcal{H}_1 \\ \|x\|=1}} \|B_1 x\| \cdot \sup_{\substack{y \in \mathcal{H}_2 \\ \|y\|=1}} \|B_2 y\| = \|B_1\| \|B_2\|. \quad (10)$$

Pro omezené operátory poměrně triviálně platí (5.7.3 – 5.7.5):

1. $(\alpha B_1 + B_2) \otimes B_3 = \alpha(B_1 \otimes B_3) + (B_2 \otimes B_3)$, $B_1 \otimes (\alpha B_2 + B_3) = \alpha(B_1 \otimes B_2) + (B_1 \otimes B_3)$,
2. $(B_1 B_2) \otimes (B_3 B_4) = (B_1 \otimes B_3)(B_2 \otimes B_4)$,
3. $(B_1 \otimes B_2)^* = B_1^* \otimes B_2^*$,
4. jsou-li B_1, B_2 regulární, potom je regulární i $B_1 \otimes B_2$ a platí $(B_1 \otimes B_2)^{-1} = B_1^{-1} \otimes B_2^{-1}$,
5. jsou-li operátory B_1, B_2 normální, resp. unitární, resp. hermitovské, resp. projektory, pak i operátor $B_1 \otimes B_2$ je normální, resp. unitární, resp. hermitovský, resp. projektor.

Pro neomezené operátory do diskuse vstupuje i jejich definiční obor a mnohdy je jednodušší se zabývat pouze $\otimes$. Ustanovíme jistou podmnožinu pravidel výše platných pro něj.

Bilinearita (1) tenzorového součinu zůstává pro $\otimes$ v platnosti, ale je potřeba upravit pravidlo pro součin ve složkách (2, obojí viz 7.6.4). Může se stát, že vynásobením operandů před provedením tenzorového součinu snížíme definiční obor:

$$(T_1 T_2) \otimes (T_3 T_4) \subset (T_1 \otimes T_3)(T_2 \otimes T_4), \quad (11)$$

rovnost platí jen ve zvláštních případech. Zeslabí se také tvrzení 3. Naštěstí alespoň platí, že jsou-li T_1, T_2 hustě definovány, je hustě definován i $T_1 \otimes T_2$ a má tedy sdružený operátor. Pro něj platí (7.6.2):

- $(T_1 \otimes T_2)^* \supset T_1^* \otimes T_2^*$,
- jestliže $T_{1,2}$ lze uzavřít, je uzavíratelný i $T_1 \otimes T_2$ a platí $T_1 \otimes T_2 \supset \overline{T_1} \otimes \overline{T_2}$.

Pro první tvrzení uvažujme $\varphi_1^{(k)} \in D(T_1^*)$, $\varphi_2^{(k)} \in D(T_2^*)$ a lineární kombinaci

$$\varphi = \sum_{k < K} \varphi_1^{(k)} \otimes \varphi_2^{(k)} \in D(T_1^*) \otimes D(T_2^*) = D(T_1^* \otimes T_2^*), \quad K \in \mathbb{N}_0. \quad (12)$$

Potom podobně

$$\begin{aligned} \forall \psi \in D(T_1 \otimes T_2), \psi &= \sum_{j < J} \psi_1^{(j)} \otimes \psi_2^{(j)}, \quad J \in \mathbb{N}_0: \\ (\varphi, (T_1 \otimes T_2)\psi) &= \sum_{j < J} \sum_{k < K} (\varphi_1^{(k)} \otimes \varphi_2^{(k)}, (T_1 \otimes T_2)(\psi_1^{(j)} \otimes \psi_2^{(j)})) \\ &= \sum_{j < J} \sum_{k < K} (\varphi_1^{(k)}, T_1 \psi_1^{(j)}) (\varphi_2^{(k)}, T_2 \psi_2^{(j)}) = \sum_{j < J} \sum_{k < K} (T_1^* \varphi_1^{(k)}, \psi_1^{(j)}) (T_2^* \varphi_2^{(k)}, \psi_2^{(j)}) \\ &= \sum_{j < J} \sum_{k < K} (T_1^* \varphi_1^{(k)} \otimes T_2^* \varphi_2^{(k)}, \psi_1^{(j)} \otimes \psi_2^{(j)}) = \left(\sum_{j < J} (T_1^* \varphi_1^{(k)} \otimes T_2^* \varphi_2^{(k)}), \sum_{k < K} (\psi_1^{(j)} \otimes \psi_2^{(j)}) \right) \\ &= (\eta, \psi), \quad \text{kde } \eta = \sum_{j < J} (T_1^* \varphi_1^{(k)} \otimes T_2^* \varphi_2^{(k)}) = (T_1^* \otimes T_2^*)\varphi. \end{aligned} \quad (13)$$

Tím jsme ovšem z *definice* ukázali, že takové φ je prvkem $D((T_1 \otimes T_2)^*)$ a že hodnota $(T_1 \otimes T_2)^* \varphi$ je pro něj rovna $(T_1^* \otimes T_2^*)\varphi$, což znamená $T_1^* \otimes T_2^* \subset (T_1 \otimes T_2)^*$.

Uzavíratelnost $T_1 \otimes T_2$ plyne z toho, že jeho sdružený operátor $(T_1 \otimes T_2)^*$ je hustě definovaný, pak $\overline{T_1 \otimes T_2} = (T_1 \otimes T_2)^{**}$. Hustá definovanost $(T_1 \otimes T_2)^*$ plyne z toho, že je nadmnožinou $T_1^* \otimes T_2^*$, který již sám je hustě definovaný. Inkluze z našeho tvrzení se pak ukáže přímo z definic: $x \in D(\overline{T_1})$, $y \in D(\overline{T_2})$ právě tehdy, když

$$\exists (x_n)_{n < \omega} \subset D(T_1): x_n \rightarrow x, T_1 x_n \rightarrow u, \text{ přičemž } \overline{T_1} x = u \quad (14)$$

a podobně pro $y, v = D(\overline{T_2})y$. Odsud ovšem plyne také

$$x_n \otimes y_n \rightarrow x \otimes y, (T_1 \otimes T_2)(x_n \otimes y_n) \rightarrow u \otimes v \Rightarrow x \otimes y \in D(T_1 \otimes T_2), (T_1 \otimes T_2)(x \otimes y) = u \otimes v = (\overline{T_1} \otimes \overline{T_2})(x \otimes y). \quad (15)$$

Nejdůležitější ze zbývajících vlastností tenzorového součinu z přehledu pro omezené operátory pro nás bude vlastnost 5 přeformulovaná pro samosdruženost: jsou-li operátory T_1, T_2 v podstatě samosdružené, pak $T_1 \otimes T_2$ je v podstatě samosdružený (a tedy $T_1 \otimes T_2$ samosdružený). Toto se však dokazuje až prostředky spektrálního rozkladu (10.8.2).

Poznámka. Všechno zavedené značení a poznatky mají přímočaré zobecnění na tenzorový součin *konečně mnoha* prostorů, vektorů, bází, operátorů.

Příklad

Jako příklad rozdílu mezi rozdíly v základních vlastnostech $T_1 \otimes T_2$ a $T_1 \otimes T_2$ volme opět $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = L^2(\mathbb{R})$, za T_1 volme operátor hybnosti P a za T_2 jednotkový operátor – operace zahrnující jednotkový operátor jsou zpravidla velmi jednoduché, ale zde již stačí pro demonstraci základní myšlenky.

Operátor $P \otimes I$ je definován pro lineární kombinace funkcí $f_i \in H^1(\mathbb{R})$ s libovolnými $g_i \in L^2(\mathbb{R})$. Jeho předpis zní jednoduše

$$(P \otimes I) \left(\sum_i \alpha_i f_i \otimes g_i \right) = \sum_i \alpha_i (-if_i') \otimes g_i. \quad (16)$$

Na druhou stranu pro operátor $P \otimes I$ musíme najít všechny limity funkcí takového tvaru, pro které i pravá strana konverguje ke stejné hodnotě nezávisle na limitní posloupnosti vlevo. Do jeho definičního oboru, který se *nebude* pokoušet popsat množinově, bude tedy patřit i řada dalších funkcí, například (ovšem ne pouze) všechny funkce z $H^1(\mathbb{R}^2)$. Na ně se dá ukázat (pomocí nástrojů, které zatím nemáme), že bude působit jako *parciální* derivace podle x :

$$P \otimes I: F(x, y) \in H^1(\mathbb{R}^2) \mapsto \frac{\partial F}{\partial x}(x, y) \quad (17)$$

Co tím chceme ukázat, že pro výpočet aplikace tohoto operátoru na obecný vektor již nestačí, narozdíl od $P \otimes I$, „umět“ používat zvlášť P na $H^1(\mathbb{R})$ a I na $L^2(\mathbb{R})$: pro jeho výpočet je potřeba *nový druh* matematické operace, přirozený až na prostoru funkcí dvou proměnných, parciální derivace místo totální!

Takovýto tvar (a jeho zobecnění na součin n operátorů, z nichž jeden je P a ostatní I) mají operátory složek hybnosti pro částice ve vícerozměrném prostoru. Sestavování jejich plného definičního oboru se vyhneme tím, že budeme uvažovat nějaké jednodušší obory, v zúžení na něž si operátor hybnosti zachová *podstatnou* samosdruženost, která je pro argumenty zahrnující tenzorový součin (a mnohé jiné) podstatně jednodušší, viz poslední poučka zmíněná v hlavním textu. Pro výpočty, kde bychom definiční obor potřebovali (například pro určení spektra operátoru, které pro neuzavřený operátor ztrácí jakoukoli informační hodnotu), představíme nástroje, které budou schopny pracovat i s operátory v podstatě samosdruženými.

Operátory násobení funkcí

Operátor polohy, kterým jsme se zabývali v různých situacích (na přímce, polopřímce, úsečce, na cvičení na diskrétní množině $\mathbb{Z}$, prostřednictvím tenzorového součinu na $\mathbb{R}^n$) vděčí za mnoho ze svých vlastností skutečnosti, že se jedná o zvláštní případ *operátoru násobení funkcí*. V této přednášce si představíme tento zastřešující koncept.

Pro dosažení co největší obecnosti operátory násobení uvažujeme na obecných měřitelných prostorech (X, μ) . V souladu s učebnicí budeme uvažovat takové prostory, jejichž míra μ je σ -konečná, což znamená, že prostor X lze psát jako spočetné sjednocení množin M_n konečných měr $\mu(M_n)$. Uvolnění tohoto požadavku je v mnoha budoucích případech možné, ale a) by se jednalo jen o nahrazení slabším, avšak stále omezujícím požadavkem tzv. lokalizovatelnosti a b) to nestojí za přidáním práci.

Nechť tedy $\mathcal{H} = L^2(X, d\mu)$ se σ -konečnou mírou μ a buď $f: X \rightarrow \mathbb{C}$ měřitelná funkce. Operátorem násobení funkcí f na $\mathcal{H}$ nazveme

$$T_f: D(T_f) \rightarrow \mathcal{H}: \psi(x) \mapsto f(x)\psi(x), \quad D(T_f) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid f\psi \in \mathcal{H}, \text{ tj. } \int_X |f(x)|^2 |\psi(x)|^2 d\mu(x) < \infty \right\}. \quad (1)$$

Každý takový operátor je zřejmě lineární. Hustě definovaný je rovněž, protože k obecnému vektoru $\varphi \in \mathcal{H}$ se lze blížit zúženými $\varphi \chi_{M_n}$ na množiny

$$M_n = \{x \in X \mid |f(x)| \leq n\}. \quad (2)$$

Tato patří do $D(T_f)$, protože faktor $f(x)$ je na množinách M_n omezený a protože jejich sjednocením je X . Podobně se ukáže, že $T_f = T_g$ právě tehdy, když $f = g$: zavedme

$$N_n = \{x \in X \mid |x| \leq n \wedge |f(x)| \leq n \wedge |g(x)| \leq n\}. \quad (3)$$

Charakteristické funkce χ_{N_n} patří do definičního oboru T_f a T_g a norma vektoru $(T_f - T_g)\chi_{N_n}$ je rovna L^2 -normě zúžení $(f - g)\chi_{N_n}$, která může pro všechna N_n být nulová jen pro dvě shodné funkce.

Důležité pozorování je, že sdruženým operátorem k T_f je $T_f^* = T_{f^*}$. Ukážeme to ve zkratce konstruktivně. Vektor $\varphi \in \mathcal{H}$ pro náležitost do $D(T_f^*)$ musí splňovat

$$\exists \eta \in \mathcal{H}: \forall \psi \in D(T_f): (\varphi, T_f \psi) = (\eta, \psi) \quad (4)$$

Použijeme analogii odvození, jaké jsme použili v případě operátoru Q . Pouze namísto kompaktních intervalů K nyní volíme množiny M_n zdefinované v (2). Platí tedy s pevným n

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \ni \varphi \in D(T_f^*) &\Rightarrow \exists \eta \in \mathcal{H}: \forall \psi_M \in D(T_f), \text{ supp } \psi_M \subset M_n: (\varphi, T_f \psi_M) = (\eta, \psi_M) \\ &\Leftrightarrow \exists \eta \in \mathcal{H}: \forall \psi \in D(T_f): \int_{M_n} (\varphi(x)^* f(x) - \eta(x)^*) \psi(x) d\mu(x) \\ &\Leftrightarrow \exists \eta \in \mathcal{H}: \varphi(x) f(x)^* - \eta(x) = 0 \text{ s.v. na } M_n \end{aligned} \quad (5)$$

a z obecnosti n a vlastnosti $\bigcup_n M_n = X$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \ni \varphi \in D(T_f^*) &\Rightarrow \exists \eta \in \mathcal{H}: \varphi(x) f(x)^* - \eta(x) = 0 \text{ s.v. na } X \\ &\Leftrightarrow \varphi \in \mathcal{H} \wedge f^* \varphi \in \mathcal{H}, \quad (T_f^* \varphi)(x) = \eta(x) = f(x)^* \varphi(x). \end{aligned} \quad (6)$$

Opačná implikace

$$\varphi \in D(T_{f^*}) \Rightarrow \varphi \in D(T_f^*), \quad T_f^* \varphi = f^* \varphi \quad (7)$$

je vyjádřením snadné rovnosti

$$\forall \varphi \in D(T_{f^*}), \forall \psi \in D(T_f): (\varphi, T_f \psi) = (T_{f^*} \varphi, \psi). \quad (8)$$

Základní vlastnosti

O operátorech T_f lze již na základě těchto poznatků říci překvapivě silné závěry:

- Pro každé f je $T_f \in \mathcal{L}_n(\mathcal{H}) \subset \mathcal{L}_c(\mathcal{H})$,
- T_f je samosdružený právě tehdy, když $f(x) \in \mathbb{R}$ skoro všude na X ,
- T_f je omezený právě tehdy, když $f \in L^\infty(X, d\mu)$, a tehdy $\|T_f\| = \|f\|_\infty$.
- $T_{f \pm g} \supset T_f \pm T_g$, $T_{fg} \supset T_f T_g$, T_f^{-1} existuje a je roven $T_{1/f}$, pokud $f(x) \neq 0$ s.v. na X .

První z tvrzení se opírá o skutečnost, že T_f je sám sdružením T_f^* , což zaručuje jeho uzavřenost, a o formulaci normality ve formě $\|T\psi\| = \|T^*\psi\|$. Platí totiž poměrně zřejmě $D(T_{f^*}) = D(T_f)$ a

$$\|T_{f^*}\psi\|^2 = \int_X |f(x)^*\psi(x)|^2 d\mu(x) = \int_X |f(x)|^2 |\psi(x)|^2 d\mu(x) = \int_X |f(x)\psi(x)|^2 d\mu(x) = \|T_f\psi\|^2. \quad (9)$$

Samosdruženost je dána skutečností $T_f^* = T_{f^*}$ a $f(x) = f(x)^*$ s.v. na X . Omezenost lze dokázat z patřičných definic a vlastností L -integrace dvojicí implikací, jak je uděláno na konci příkladu 7.3.3. Další vlastnosti plynou přímočaře z předpisu akce T_f na vektor; jediné upozornění opět je, že definiční obor $T_{f \pm g}$ či T_{fg} může být větší než součtu, rozdílu či součinu operátorů, protože ač předpis má stejný, neklade podmínky na mezikroky na pravých stranách inkluzí.

Spektrum T_f

Závěr, že T_f je bez potřeby jakéhokoli dalšího ověřování normální a pro reálné funkce přímo samosdružený, je velice praktický. Všechny předchozí výsledky o operátorech polohy můžeme odvodit i odsud použitím $L^2(\mathbb{R}, dx)$, $L^2(\langle 0, +\infty \rangle, dx)$, $L^2(\langle a, b \rangle, dx)$, $L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ a funkce $f(x) = x$, resp. $f(x) = x_i$ v posledním případě. A skutečná síla se projeví, když si uvědomíme důsledky možnosti volby jiné funkce či jiného prostoru.

V podobné obecnosti dokážeme říci i více, a to kompletně charakterizovat spektrum T_f . To se shoduje s takzvaným *esenciálním oborem hodnot funkce f* , definovaným

$$R_{\text{ess}}^{(\mu)}(f) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \mu(f^{-1}(U_\varepsilon(\lambda))) \neq 0, \forall \varepsilon > 0\}. \quad (10)$$

Tedy $\lambda \in \mathbb{C}$ patří do esenciálního oboru hodnot, nabývá-li $f(x)$ hodnoty λ nebo jejího libovolně malého okolí na množině, která není μ -nulová v X .

V případě Lebesgueovy míry do R_{ess} po částech spojitě funkce f patří celý její obor hodnot, navíc v uzavěru, protože i případné hodnoty λ , ke kterým se $f(x)$ blíží, ale nedosáhne jich, splňují podmínku formulovanou pomocí okolí $U_\varepsilon(\lambda)$. Pokud funkce f spojitá není, ale po částech spojitě funkci se rovná skoro všude, pak odchylky od ní na množině míry 0 se v $R_{\text{ess}}(f)$ neprojeví.

V případě obecnější míry se ale může stát, že nějaký celý interval má přiřazenu míru nula a $R_{\text{ess}}^{(\mu)}(f)$ tak ignoruje hodnoty $f(x)$ na celé této množině. Naopak, samostatné body jakožto množiny $\{x_i\}$ mohou mít $\mu(\{x_i\})$ nenulovou (takovým říkáme *diskrétní body* míry μ) a esenciální obor hodnot potom obsahuje hodnotu $f(x_i)$ v těchto bodech, narozdíl od Lebesgueovy míry, kde bodová změna nikdy není podstatná.

Zvláštní pozornost věnujme tzv. *počítací míře* μ_{count} , která funguje tak, že množině $M \subset X$ přiřadí počet prvků, je-li konečná, a ∞ jinak. Tato míra existuje na libovolném X , ale pouze na nejvýše spočetných oborech X je σ -konečná. V této situaci je $L^2(X, \mu_{\text{count}})$ totéž, co prostor konečných nebo spočetných posloupností $\ell^2(X)$, měřitelná je každá funkce (posloupnost) s a operátor T_s se chová jako operátor násobení posloupností posloupností po bodech. Do této kategorie patří mimo jiné operátor polohy na diskretizovaném prostoru $Q_{\mathbb{Z}}$ ze cvičení.

Tvrzení o spektru je dobrým procvičením základních postupů platných pro normální operátory a proto si jej dokážeme.

Věta (7.3.8). Nechť (X, μ) je měřitelný prostor se σ -konečnou mírou, nechť $f: X \rightarrow \mathbb{C}$ je μ -měřitelná, označme T_f operátor násobení funkcí f na $\mathcal{H} = L^2(X, d\mu)$. Potom

$$\sigma(T_f) = R_{\text{ess}}^{(\mu)}(f). \quad (11)$$

Důkaz. Připomeňme, že pro normální operátory – kterým T_f víme, že je – platí

$$\lambda \in \sigma(T) \Leftrightarrow \exists (x_n)_{n < \omega} \subset D(T): (\forall n < \omega: \|x_n\| = 1) \wedge (T - \lambda I)x_n \rightarrow 0 \Leftrightarrow \neg \exists c > 0: \forall x \in D(T): \|Tx - \lambda x\| \geq c\|x\|. \quad (12)$$

Rovnost ukážeme tak, že z $\lambda \in R_{\text{ess}}^{(\mu)}$ plyne $\lambda \in \sigma(T_f)$ a z negace plyne negace.

$\Rightarrow$: Nechť $\lambda \in R_{\text{ess}}^{(\mu)}$, pro $\varepsilon > 0$ volme

$$\psi_\varepsilon(x) := \frac{1}{\sqrt{\mu(M_\varepsilon)}} \chi_{M_\varepsilon}(x), \quad M_\varepsilon = f^{-1}(U_\varepsilon(\lambda)). \quad (13)$$

Pak triviálně $\|\psi_\varepsilon\| = 1$, ale přitom na M_ε je $|f(x) - \lambda| < \varepsilon$ a odsud také $\|T_f \psi_\varepsilon - \lambda \psi_\varepsilon\| < \varepsilon^2$.

$\Leftarrow$: Nechť $\lambda \notin R_{\text{ess}}^{(\mu)}$, volme ε takové, že $\mu(M_\varepsilon) = 0$. Protože množina M_ε je μ -nulová, integrál přes X se rovná integrálu přes $X \setminus M_\varepsilon$. Ovšem na této množině $|f(x) - \lambda| \geq \varepsilon$. Můžeme proto odhadnout pro každé $\psi \in D(T_f)$

$$\|T_f \psi - \lambda \psi\|^2 = \int_{X \setminus M_\varepsilon} |f(x) - \lambda|^2 |\psi(x)|^2 d\mu \geq \varepsilon^2 \int_X |\psi(x)|^2 d\mu(x) = \varepsilon^2 \|\psi\|^2, \quad (14)$$

takže platí negace pravé strany (12) pro $c = \varepsilon^2$. □

S touto teorií nejen operátory polohy zastřešíme, ale dozvíme se jejich spektrum, které jsme dosud neměli vyšetřeno. Prostým dosazením $f(x) = x$, případně složky x , snadno najdeme esenciální obory hodnot

$$\sigma(Q) = \mathbb{R}, \quad \sigma(Q_+) = \langle 0, \infty \rangle, \quad \sigma(Q_J) = \bar{J}, \quad \sigma(I \otimes \dots \otimes Q \otimes \dots \otimes I) = \mathbb{R}. \quad (15)$$

Spektrální reprezentace

Operátory násobení funkcí jsou důležité v mnoha ohledech pro svou podstatu samy o sobě (například jako pozorovatelné potenciální energie částice v potenciálním poli $V(x)$). Hrají ale další podstatnou roli jako *nejbližší analogie diagonálních operátorů* z maticové lineární algebry. Následující věta, kterou dokazovat nebudeme, ukazuje, co v tomto duchu odpovídá diagonalizaci hermitovské matice na prostorech nekonečné (avšak spočetné) dimenze.

Věta (10.9.7). Nechť A je samosdružený operátor na separabilním Hilbertově prostoru. Pak existuje

- prostor (X, μ) s konečnou mírou,
- měřitelná funkce $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ a
- izomorfismus $W: \mathcal{H} \rightarrow L^2(X, d\mu)$

takové, že $A = W^{-1}T_f W$.

Věta má zobecnění i na prostory $\mathcal{H}$ libovolné dimenze, ale připomeňme, že v naší definici T_f separabilita vystupuje skrz použití σ -konečné míry – to vyřazuje z úvahy naše modelové nespočetněrozměrné prostory $\ell^2(X)$, $|X| > \aleph_0$, museli bychom nejprve rozšířit jeho definici.

Unitární ekvivalence

Rovnost tvaru $A = W^{-1}T_f W$ je příkladem mnohem obecnějšího konceptu **unitární ekvivalence** dvou operátorů. Často se s ní setkáme i v případě, kdy izomorfismus W nahrazuje unitární operátor U – mluvili bychom tedy o unitární ekvivalenci dvou operátorů T, S na stejném prostoru $\mathcal{H}$. Unitární ekvivalence je vskutku ekvivalence jakožto relace. Prakticky **všechny** podstatné vlastnosti, které o jednom z operátorů můžeme vědět, se na druhý přenášejí. Nechť $T = USU^{-1}$, potom (7.4.10 a odkazy tamtéž)

- je-li S hustě definovaný, je hustě definovaný i T a platí $T^* = US^*U^{-1}$,
- je-li S uzavíratelný, je T také a $\bar{T} = U\bar{S}U^{-1}$,
- je-li S invertibilní, je invertibilní i T a platí $T^{-1} = US^{-1}U^{-1}$,
- je-li S omezený, je omezený i T a má stejnou normu,
- podobně je-li S uzavřený / $\mathcal{S}_p$ / normální / unitární / symetrický / pozitivní / samosdružený / v podstatě samosdružený / má čistě bodové spektrum, tuto vlastnost má i T ,
- spektra operátorů S a T jsou si rovna včetně jejich rozdělení na σ_p , σ_c a σ_r a vlastní hodnoty mají stejné násobnosti pro S a T ; pro kompaktní operátory se také shodují singulární hodnoty a každá $\|\cdot\|_p$ -norma.

Tento seznam budeme příležitostně i rozšiřovat, když se seznámíme s nějakou novou charakteristikou operátoru. Prozatím je dobré vědět, že unitární ekvivalencí se přenášejí například všechny vlastnosti T_f s reálnou f , jak jsme je poznali dnes, na samosdružené operátory, a naopak, libovolný samosdružený operátor lze v principu popsat jako unitární ekvivalent nějakého operátoru tvaru T_f , jehož vlastnosti jsou jednoduché. Ovšem to, jak spektrální reprezentaci *hledat*, nijak snadná otázka není, proto tato metoda zůstane pro naše účely spíše v repertoáru nástrojů pro nekonstruktivní důkazy.

Fourierova transformace

Dnešní cvičení bude pojato jako praktické seznámení se zavedením Fourierova–Plancherelova operátoru F . Myšlenka je taková, že Fourierova transformace definovaná jako

$$(\mathcal{F}f)(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix \cdot y} f(x) dx \quad (1)$$

má smysl pouze pro funkce f třídy $L^1(\mathbb{R}^n, dx)$, protože integrál na pravé straně konverguje právě a jen pro takové. $\mathcal{F}$ potom zobrazuje tyto funkce do $C_\infty(\mathbb{R}^n)$ (prostor rychle ubývajících funkcí, neplést s prostorem funkcí nekonečně diferencovatelných). Pozor na to, že vlivem této vlastnosti

$$\mathcal{F}^\dagger: L^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow C_\infty(\mathbb{R}^n): f(x) \mapsto \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{+ix \cdot y} f(x) dx \quad (2)$$

není inverzní transformací k (1), protože jejím definičním oborem není obor hodnot $\mathcal{F}$.

Poněkud pěknější vlastnosti má jeho zúžení na Schwartzův prostor $\mathcal{S} \stackrel{\text{ozn}}{=} \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$: označíme-li $\mathcal{F}_0 := \mathcal{F}|_{\mathcal{S}}$, pak $\mathcal{F}_0$ zobrazuje $\mathcal{S}$ sám na sebe a stejné zúžení operátoru (2) je jeho inverzí. Máme tedy

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_0: \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) &\rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^n), \\ \mathcal{F}_0^\dagger: \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) &\rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^n): \mathcal{F}_0^\dagger = (\mathcal{F}_0)^{-1}. \end{aligned} \quad (3)$$

Jednou z vlastností $\mathcal{F}_0$ je Plancherelova rovnost

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n): \int_{\mathbb{R}^n} |(\mathcal{F}_0 f)(y)|^2 dy = \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^2 dx, \quad (4)$$

díky které je $\mathcal{F}_0$ hustě definovaný operátor na $L^2(\mathbb{R}^n)$ s normou 1 a můžeme uvažovat o jeho spojitém rozšíření (vůči L^2 -normě), které bude díky rovnici (4) **unitárním** operátorem. Takto získaný operátor

$$F: L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n) \quad (5)$$

nazveme **Fourierovým–Plancherelovým operátorem**, jeho inverzí bude podobně spojitě rozšíření $F_0^\dagger$.

Jistou překážkou v používání operátoru F je, že vzorec (1) *není nadále jeho předpisem*. L^2 -integrabilita funkcí totiž nezaručuje, že jeho pravá strana má smysl. Naštěstí tato situace má snadné řešení:

- a) je-li funkce $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ *současně* L^1 -integrabilní, tedy $f \in L^1 \cap L^2$, pak vzorec (1) použit lze a dává správný výsledek,
- b) v ostatních případech můžeme funkci $f \in L^2$ vymezit na nějakou omezenou množinu, například kouli $B_n(\mathbf{0})$, $n \in \mathbb{N}$, čímž L^1 -integrabilitu získá. Tuto množinu pak zvětšujeme a získané vektory $\mathcal{F}f$ konvergují v L^2 – tzv. *konvergence podle středů* či *limes in medio*, ozn.

$$(Ff)(y) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \int_{B_n} e^{-ix \cdot y} f(x) dx. \quad (6)$$

Formou příkladů se seznámíme ještě s jednou užitečnou alternativou pro případ $n = 1$.

Příklad 1: V případě *přímky* trváme, že na $L^2(\mathbb{R})$ jsou univerzálně použitelné vzorce

$$\begin{aligned} (F\psi)(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{d}{dx} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-ixy} - 1}{-iy} \psi(y) dy, \\ (F^\dagger \psi)(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{d}{dx} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{ixy} - 1}{iy} \psi(y) dy. \end{aligned} \quad (7)$$

V tomto cvičení se přesvědčte, že integrál má formu skalárního součinu $\psi(y)$ s funkcí, která je rovněž $L^2(\mathbb{R})$, a proto má konečnou hodnotu $\forall \psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Ukažte také, že pro $\psi \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ se jeho výsledek shoduje s použitím (1).

Návod pro druhou část: existuje integrabilní majoranta nezávislá na x , díky čemuž lze derivaci posunout dovnitř integrálu.

Příklad 2: Ukažte, že ve vzorcích (7) je integrál na pravé straně absolutně spojitý a jeho derivací podle x lze skutečně formálně dospět k $(F\psi)(x)$, resp. $(F^\dagger\psi)(x)$ (stačí jeden z nich).

Návod: zlomek $(e^{ixy} - 1)/(iy)$, jakožto funkce y , je Fourierovou transformací $\chi_{(0,x)} \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$, a integrand je díky tomu možno psát jako $(F\chi_{(0,x)})(y), \psi(y)$. Pak použijte unitaritu a rozepište skalární součin zpět na integrál.

Příklad 3: Ukažte, že vzorcem $F^\dagger Q F$ je na $L^2(\mathbb{R})$ určen operátor hybnosti – toto jednak představuje jeho unitární ekvivalenci s Q a současně jeho spektrální reprezentaci. To znamená: ukažte, že má předpis $\psi \mapsto -i\psi'$ a jeho definiční obor $F^\dagger D(Q)$ se shoduje s $D(P)$. Odvoďte na základě této informace spektrum $\sigma(P)$.

Návod: viz řešený příklad 7.4.12.

Získávání nových samosdružených operátorů

Po poměrně důkladném seznámení s operátory polohy a hybnosti zaměříme svou pozornost na obecnější třídy pozorovatelných. Vzhledem k volnosti, jakou disponuje například sama definice energie, nemá smysl zabývat se každým možným operátorem zvlášť a bude potřeba několik nástrojů obecnější platnosti pro získávání nových samosdružených operátorů ze známých případů. To bude téma několika příštích hodin.

Jako první takovou metodu si představíme, jak k symetrickým operátorům hledat rozšíření, která jsou samosdružená. Než se k tomu dopracujeme, budeme si potřebovat připravit několik jednoduchých závěrů ze spektrální teorie normálních, symetrických a samosdružených operátorů.

Normální operátory, reziduální spektrum, oblast regularity

Definice. Nechť T je uzavřený lineární operátor na $\mathcal{H}$. Jeho **oblastí regularity** nazveme množinu

$$\pi(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \exists c > 0 : \forall x \in D(T) : \|Tx - \lambda x\| \geq c\|x\|\}. \quad (1)$$

Upozornění na názvosloví: Nezaměňujte „prvky oblasti regularity T “ a „regulární hodnoty T “. Množina regulárních hodnot operátoru je jeho rezolventní množina $\rho(T)$, která obecně není totéž, co $\pi(T)$. Připomeňme:

Definice. **Regulární hodnotou** uzavřeného lineárního operátoru T nazýváme každé $\lambda \in \mathbb{C}$, pro něž $(T - \lambda I)^{-1}$ je omezený operátor na $\mathcal{H}$. **Rezolventní množina** $\rho(T) \equiv \mathbb{C} \setminus \sigma(T)$ je pak množinou všech regulárních hodnot T .

Vztah mezi oběma koncepty je takový, že každá regulární hodnota do oblasti regularity patří – stačí si uvědomit

$$\begin{aligned} \forall x \in \mathcal{H} : \|(T - \lambda I)^{-1}x\| \leq \|T - \lambda I\|\|x\| &\Leftrightarrow \forall y \in \text{Ran}(T - \lambda I) : \|y\| \leq \|T - \lambda I\|\|Ty - \lambda y\| \\ &\Leftrightarrow \forall y \in D(T) : \|Ty - \lambda y\| \geq \underbrace{\frac{1}{\|T - \lambda I\|}}_{=: c} \|y\|; \end{aligned} \quad (2)$$

opak však nemusí být pravdou. Podmínka (1) implikuje, že $T - \lambda I$ je invertibilní operátor, ale pro splnění $(T - \lambda I)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ by ještě jeho obor hodnot musel být $\mathcal{H}$, o němž (1) nic netvrdí. Může tedy bod $\lambda \in \mathbb{C}$ přesto být bodem spektra, konkrétně *reziduálního* spektra, jak se přesvědčíme.

Dokážeme si za tímto účelem, že pro uzavřené T podmínka (1) implikuje, že $\text{Ran}(T - \lambda I)$ je uzavřený podprostor – pravidlo, které se bude hodit vícekrát. Nechť $(y_n)_{n < \omega}$ je posloupnost vektorů z $\text{Ran}(T - \lambda I)$ a x_n jejich vzory při $T - \lambda I$. Pokud nyní (y_n) konverguje k nějakému $y \in \mathcal{H}$, musí posloupnost (x_n) konvergovat také, protože její Bolzano–Cauchyova podmínka plyne ze stejné vlastnosti (y_n) a nerovnosti (1). Z podmínky

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} y_n = \lim_{n \rightarrow \infty} (T - \lambda I)x_n = y \quad (3)$$

však uzavřenost operátoru T již dává $x \in D(T - \lambda I)$, $y \in \text{Ran}(T - \lambda I)$, tedy $\text{Ran}(T - \lambda I)$ je uzavřený.

Odsud již je zřejmé, že v případě $\lambda \in \pi(T) \setminus \rho(T)$ je splněna podmínka $\lambda \in \sigma_r(T)$

$$\overline{\text{Ran}(T - \lambda I)} = \text{Ran}(T - \lambda I) \neq \mathcal{H}. \quad (4)$$

Můžeme tedy shrnout (pro uzavřené operátory)

$$\pi(T) \supset \rho(T), \quad \pi(T) \setminus \rho(T) \subset \sigma_r(T). \quad (5)$$

Pro příklad zmíněné situace můžeme volit operátor pravého posunutí

$$S_+ : \ell^2(\mathbb{N}) \rightarrow \ell^2(\mathbb{N}) : (x_1, x_2, x_3, \dots) \mapsto (0, x_1, x_2, \dots). \quad (6)$$

V něm pro libovolné $x \in \ell^2(\mathbb{N})$ platí $\|S_+x\| = \|x\|$, takže $0 \in \pi(S_+)$, ale obor hodnot $S_+ = S_+ - 0I$ je pouze uzavřený podprostor G_0 posloupností začínajících nulou. S_+^{-1} je omezeným operátorem, ale pouze z G_0 do $\mathcal{H}$,

takže $S_+^{-1} \notin \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Hodnota $\lambda = 0$ je tedy prvkem oblasti regularity, který není regulární hodnotou, a jedná se o bod reziduálního spektra S_+ .

Rozdíl mezi oblastí regularity a rezolventní množinou se stírá pro **normální operátory** (omezené i neomezené), což přímo souvisí s faktem, že jejich reziduální spektrum je prázdné.

Spektrum samosdruženého operátoru, kritérium samosdruženosti

Samosdružený operátor A je normální z definice. Pomocí rovnosti mezi $\rho(A)$ a $\pi(A)$ snadno dokážeme, že spektrum A je podmnožinou reálné osy. Pro *imaginární* číslo $\lambda = x + iy$ totiž platí

$$\begin{aligned} \forall \psi \in D(A): \|A\psi - \lambda\psi\|^2 &= (A\psi - x\psi - iy\psi, A\psi - x\psi - iy\psi) = \|A\psi - x\psi\|^2 - iy(A\psi, \psi) + iy(\psi, A\psi) + y^2\|\psi\|^2 \\ &\geq y^2\|\psi\|^2, \end{aligned} \quad (7)$$

což je postačující pro $\lambda \in \pi(T) \Rightarrow \lambda \in \rho(T) \Rightarrow \lambda \notin \sigma(T)$.

Dokážeme odsud takzvané *kritérium samosdruženosti* symetrických operátorů.

Věta (7.3.10). Nechť A je symetrický operátor, potom následující podmínky jsou ekvivalentní:

- I. A je samosdružený,
- II. A je uzavřený a $\text{Ker}(A - \lambda I)^* = \text{Ker}(A - \lambda^* I)^* = \{0\}$ pro nějaké $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$,
- III. $\text{Ran}(A - \lambda I) = \text{Ran}(A - \lambda^* I) = \mathcal{H}$ pro stejnou volbu λ .

Poznámka: obvykle se tato formulace potká s $\lambda = i$, tedy $\text{Ker}(A \pm iI)^*$, $\text{Ran}(A \pm iI)$.

Tuto důležitou poučku si dokážeme.

$I \Rightarrow II$: Pro samosdružený A platí $(A - \lambda I)^* = A - \lambda^* I$. Pokud má neprázdné jádro, pak hodnota λ^* je prvkem bodového spektra A , což je spor s $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$.

$II \Rightarrow III$: Pro všechny hustě definované operátory ($\Leftarrow$ předpoklad symetrie) platí

$$\overline{\text{Ran}(A - \lambda^* I)} = (\text{Ker}(A - \lambda I)^*)^\perp. \quad (8)$$

Pro λ imaginární je z předpokladu pravá strana rovna $\mathcal{H}$ a zbývá se přesvědčit, že mezi $\text{Ran}(A - \lambda^* I)$ a jeho uzávěrem není (pro taková λ) rozdíl. Ovšem pokud $y = \text{Im } \lambda \neq 0$, pak pro symetrický operátor stejně jako v rovnici (7) získáme spodní odhad pro $\|(A - \lambda^* I)\psi\|$ tvaru $y^2\|\psi\|$. λ je prvkem $\pi(A)$, a tehdy jsme se přesvědčili výše, že $\text{Ran}(A - \lambda^* I)$ je vskutku uzavřeným podprostorem.

$III \Rightarrow I$: A je z předpokladu symetrický a tedy $A \subset A^*$, zbývá ukázat, že definiční obor A^* není větší než $D(A)$. Nechť tedy $y \in D(A^*)$. Z předpokladu III je $\text{Ran}(A - \lambda I) = \mathcal{H}$, tedy ke každému $z \in \mathcal{H}$ existuje $x \in D(A)$ tak, že $z = Ax - \lambda x$. Takové x nalezneme pro $z = A^*y - \lambda y$. Vektory x a y tedy současně splňují

$$A^*x - \lambda x = A^*y - \lambda y = z, \quad (9)$$

kde se využilo symetrie A pro $A^*x = Ax$. Rozdíl $y - x$ je tedy prvkem jádra $A^* - \lambda I$, ale

$$\text{Ker}(A^* - \lambda I) = (\text{Ran}(A - \lambda^* I))^\perp, \quad (10)$$

což z podmínky III je prázdný prostor. Takže vektor y , který jsme volili z $D(A^*)$, je roven vektoru $x \in D(A)$, jinými slovy, $D(A^*) = D(A)$.

Tím je důkaz dokončen.

Spektrum symetrického operátoru

Nerovnost (7) využívá pouze symetričnosti A , takže platí nejen pro samosdružené, ale i všechny symetrické operátory. Je tedy pro každé $A \in \mathcal{L}_s$

$$\mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \subset \pi(A). \quad (11)$$

Množina $\pi(A)$ přitom může být větší, zejména pro zespoda omezené operátory máme

$$(\psi, A\psi) \geq m\|\psi\|^2, \forall \psi \in D(A) \Rightarrow (-\infty, m) \subset \pi(A) \quad (12)$$

a analogický závěr platí pro omezení shora. (Pro tuto inkluzi porovnejte nerovnost pro $(\psi, (A-\lambda)\psi)$ z předpokladu s Cauchy–Schwarzovou nerovností pro stejný výraz.)

Pro *neuzavřený* symetrický operátor je otázka spektra triviální, spektrum libovolného neuzavřeného operátoru je celý prostor $\mathbb{C}$. Na druhou stranu každý symetrický operátor má uzávěr, který je rovněž symetrický.

Pro *uzavřený* symetrický operátor díky inkluzi (5) víme, že jeho bodové a spojitě spektrum se bude odehrávat na reálné ose (případně na její podmnožině dané spodní a horní mezí, pokud je některá konečná), ale reziduální spektrum může zasahovat i mimo ni. Lze však najít mnohem silnější obecný závěr.

Připomeneme si větu 7.3.10, která – mimo jiné – říká, že operátor A je samosdružený právě tehdy, pokud je uzavřený a existují nějaká $\lambda, \lambda^* \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, pro něž jádra $(A - \lambda I)^*$, $(A - \lambda^* I)^*$ jsou prázdná. Jinými slovy, pokud

$$\exists \lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}: \dim \text{Ker } (A - \lambda I)^* = \dim \text{Ker } (A - \lambda^* I)^* = 0. \quad (13)$$

Tuto podmínku můžeme i bez operátorového sdružení jako

$$\exists \lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}: \dim (\text{Ran } (A - \lambda I))^\perp = \dim (\text{Ran } (A - \lambda^* I))^\perp = 0. \quad (14)$$

Vystupující prostor $(\text{Ran } (A - \lambda I))^\perp$ se nazývá **defektním prostorem** operátoru A vzhledem k hodnotě λ .

Toto kritérium doplníme o zcela klíčovou informaci:

Věta (8.1.2). Hodnota $\dim (\text{Ran } (A - \lambda I))^\perp$ je na každé komponentě souvislosti množiny $\pi(A)$ konstantní.

Za takové komponenty souvislosti lze volit $\mathbb{C}_+$ a $\mathbb{C}_-$. Lze tedy mluvit o *společné* hodnotě $\dim (\text{Ran } (A - \lambda I))^\perp$ pro všechna $\lambda \in \mathbb{C}, \text{Im } \lambda > 0$ ($\mathbb{C}_+$), resp. všechna $\lambda \in \mathbb{C}, \text{Im } \lambda < 0$ ($\mathbb{C}_-$). Tyto hodnoty se nazývají **indexy defektu** symetrického operátoru A a značí se tradičně $n_-(A)$, resp. $n_+(A)$ podle znaménka $\text{Im } \lambda^*$ namísto $\text{Im } \lambda$. V literatuře se totiž setkáváme s volbou $\lambda = i$ a potom

$$n_\pm(A) = \dim \text{Ker } (A^* \pm iI). \quad (15)$$

Pro obecný symetrický operátor se jedná o dvě celá nezáporná čísla, případně některý nekonečný kardinál. Pokud A disponuje horní nebo spodní omezeností, pak díky (12) existuje v $\pi(A)$ také křivka spojující $\mathbb{C}_+$ s $\mathbb{C}_-$ a indexy defektu jsou automaticky dvě *stejná* čísla.

Poznámka: V literatuře není tolik obvyklé rozlišovat mezi nekonečnými kardinalitami a nekonečné indexy defektu se potom souhrnně označují symbolem ∞ . Pro separabilní prostory mohou každopádně nabývat jen jedné nekonečné hodnoty $\aleph_0$.

Pokud některý z indexů defektu je nulový, potom $\text{Ran } (A - \lambda I)$ je celý prostor $\mathcal{H}$ pro všechna λ z odpovídající komplexní poloroviny. To je spolu s podmínkou (7) postačující pro to, aby body z této poloroviny byly regulární hodnoty A (jak bylo diskutováno v první sekci).

Naopak, pokud některý index defektu je nenulový, řekněme $n_+(A)$, pak podle jeho definice $\text{Ran } (A - \lambda I)$ nepokrývá celý Hilbertův prostor pro žádná $\lambda \in \mathbb{C}_+$, podobně se záměnou znamének. To znamená, že *celá polorovina* $\mathbb{C}_+$, resp. $\mathbb{C}_-$ v takovém případě patří do (reziduálního) spektra.

Pro spektrum uzavřeného symetrického operátoru A tak vždy platí právě jedna z těchto čtyř možností:

1. Pokud $n_+(A)$ i $n_-(A)$ jsou větší než nula, pak do spektra patří $\mathbb{C}_+$ i $\mathbb{C}_-$. Protože spektrum je uzavřená množina, nemůže v ní chybět ani společná hranice $\mathbb{R}$ obou polorovin, a tedy $\sigma(A) = \mathbb{C}$.
2. Pokud $n_+(A) > 0, n_-(A) = 0$, pak $\mathbb{C}_+ \subset \sigma(A)$ a $\overline{\mathbb{C}_+} \subset \rho(A)$. Body na reálné ose opět také patří do spektra, protože jinak by nebylo uzavřené, proto $\sigma(A) = \overline{\mathbb{C}_+} = \mathbb{R} \otimes \langle -\infty, 0 \rangle = \mathbb{C} \setminus \mathbb{C}_-$.
3. Pokud $n_+(A) = 0, n_-(A) > 0$, pak zcela analogicky $\sigma(A) = \overline{\mathbb{C}_-} = \mathbb{R} \otimes \langle 0, +\infty \rangle = \mathbb{C} \setminus \mathbb{C}_+$.
4. Pokud $n_+(A) = n_-(A) = 0$ (a právě tehdy), potom operátor A splňuje kritérium samosdruženosti. Jeho spektrum je nějakou podmnožinou $\mathbb{R}$.

Indexy defektu tedy okamžitě rozhodují, jestli uzavřený operátor A je samosdružený nebo ne a v případech, že není, odkrývají celé jeho spektrum. Doplnujeme tak informaci, že $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ pro samosdružené operátory, upřesněním, že symetrické operátory, které samosdružené nejsou, reálné spektrum *nemají*.

Uzavřeným operátorům jsme věnovali většinu své pozornosti. Důvod k tomu je jednoduchý. Připomeňme, že

- pokud operátor A je symetrický, ale ne uzavřený, pak jeho spektrum je $\mathbb{C}$ bez jakékoli další diskuse,
- má však vždy uzávěr $\bar{A}$, který již symetrickým uzavřeným operátorem je.

Tyto dvě vlastnosti doplníme o skutečnost, že *indexy defektu operátorů A a $\bar{A}$ se shodují*. Toto je triviální, jakmile si uvědomíme, že A i $\bar{A}$ mají stejný sdružený operátor.

Najít uzávěr je tedy prvním logickým krokem při hledání samosdruženého rozšíření. K úloze však můžeme přistoupit i tak, že k symetrickému, ne nutně uzavřenému operátoru A zkusíme hledat *podstatě samosdružené* rozšíření, tedy operátor, u kterého je zajištěno, že pro samosdruženost již stačí najít uzávěr. Podle poslední poučky je nutnou a postačující podmínkou *podstatné* samosdruženosti $n_+(A) = n_-(A) = 0$ (liší se pouze požadavek uzavřenosti).

Indexy defektu představují počet lineárně nezávislých vektorů, které v $\text{Ran}(A - \lambda I)$ jistým způsobem „chybí“ – odtud i název těchto čísel. Při hledání symetrických nebo samosdružených rozšíření se tedy, velmi jednoduše řečeno, tuto „mezeru“ snažíme zaplnit, aby oba indexy klesly na nulu. Tomu se budeme věnovat příští přednášku.

Hledání symetrických a samosdružených rozšíření

Připomeňme z minulé hodiny:

- indexy defektu $n_+(A), n_-(A)$ jako $\dim \text{Ker } (A - \lambda I)^* = \dim (\text{Ran } (A - \lambda I))^\perp$ pro nějaká $\lambda \in \mathbb{C}_-$, resp. $\lambda \in \mathbb{C}_+$, na konkrétní volbě hodnoty z dané poloviny nezávisí, zejména $n_\pm(A) = \dim \text{Ker } (A^* \pm iI)$,
- $n_+(A) = n_-(A) = 0 \iff A$ v podstatě samosdružený, s požadavkem uzavřenosti $\iff A$ samosdružený.

Úlohou hledání symetrických rozšíření je tedy doplnit nějakým způsobem vektory do $\text{Ran } (A - \lambda I)$ a do $\text{Ran } (A - \lambda^* I)$, které zasahují do těchto ortogonálních doplňků, aby se jejich dimenze snižovala k nule. Postup, který získáme, dokáže rozeznat i maximální symetrické operátory, které již nejdou dále rozšiřovat, jak jsme viděli ručně dokázáno u snahy o nalezení operátoru hybnosti na polopřímce.

Zmíněnou úlohu převedeme na hledání unitárních (či alespoň izometrických) rozšíření izometrických operátorů, která je podstatně jednodušší, protože všechny zúčastněné operátory jsou omezené.

Cayleyho transformace

Klíčem k tomuto převodu je Cayleyho transformace komplexní roviny, vyjádřená vzájemně inverzními vzorci

$$z(x) = \frac{x - i}{x + i}, \quad x(z) = i \frac{1 + z}{1 - z}. \quad (1)$$

Má tu vlastnost, že bereme-li za x reálná čísla, $z(x)$ vychází na jednotkové kružnici (mimo bod 1). Naopak, body $z \in S^1$ ze zobrazují na $x(z) \in \mathbb{R}$, s výjimkou $z = 1$, pro které bychom dělili nulou.

Analogicky s touto vlastností definujeme podobnou transformaci pro operátory

$$C: A \mapsto (A - iI)(A + iI)^{-1}. \quad (2)$$

Podívejme se nejprve, jak C působí na *samosdružené* operátory. Pro ně i i $-i$ jsou regulární hodnoty a proto operátory $A - iI$ i $A + iI$ jsou bijekce $\mathcal{H}$ na $\mathcal{H}$. Také $C(A)$ je tedy bijekce $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ a z rovnice

$$\|(A - iI)\psi\| = \sqrt{\|A\psi\|^2 + \|\psi\|^2} = \|(A + iI)\psi\| \quad (3)$$

plyne dosazením $\psi = (A + iI)^{-1}\varphi$ také

$$\|C(A)\varphi\| = \|\varphi\|, \quad \forall \varphi \in \mathcal{H}, \quad (4)$$

což je ekvivalentní tomu, že $C(A)$ je unitární. C tedy zobrazuje samosdružené operátory na unitární.

Unitární operátory získané touto cestou sdílejí vlastnost, že číslo 1 není žádného z nich vlastní hodnotou – to plyne z nesplnitelnosti rovnice $(A - iI)\varphi = (A + iI)\varphi$ mimo $\varphi = 0$. Ukážeme, že naopak každý operátor $U \in \mathcal{U}(\mathcal{H})$ splňující $1 \notin \sigma_p(U)$ je obrazem nějakého samosdruženého operátoru přes C . Označme takovou množinu $\mathcal{U}_1(\mathcal{H})$. Rovněž inspirování (1) hledejme takový operátor jako

$$A_U := i(I + U)(I - U)^{-1}. \quad (5)$$

Je zřejmé, že $I - U$ je díky podmínce $1 \notin \sigma_p(U)$ pro $U \in \mathcal{U}_1(\mathcal{H})$ invertibilní, takže tato definice *dává smysl*. Také se jedná o hustě definovaný operátor, protože pro unitární operátor U , stejně jako pro každý normální, platí

$$\lambda \in \sigma_p(U) \iff \overline{\text{Ran } (U - \lambda I)} \neq \mathcal{H} \quad (6)$$

(bez normality by pravou podmínku mohly splňovat i body z reziduálního spektra), a pro $\lambda = 1$ odsud

$$1 \notin \sigma_p(U) \implies \overline{\text{Ran } (U - I)} = \mathcal{H}, \quad (7)$$

což značí hustou definovanost A_U , protože A_U je definovaný právě pro ta ψ , která patří do oboru hodnot $I - U$.

Jako třetí podmínku ověříme symetrii: nechť $\varphi, \psi \in D(A_U) = \text{Ran}(I - U)$. Lze tedy psát $\varphi = (I - U)\chi, \psi = (I - U)\eta$ pro nějaká $\eta, \chi \in \mathcal{H}$. Potom

$$\begin{aligned} (\varphi, A_U \psi) &= ((I - U)\chi, A_U(I - U)\eta) = ((I - U)\chi, i(I + U)\eta) = i((\chi, \eta) - (U\chi, \eta) + (\chi, U\eta) - (U\chi, U\eta)) \\ &= i((\chi, U\eta) - (U\chi, \eta)) \end{aligned} \quad (8)$$

a rozpis $(A_U \varphi, \psi)$ vychází stejně.

Zbývá tedy samosdruženost A_U a protože symetrie dává $A_U \subset A_U^*$, postačí pro ni $D(A_U^*) \subset D(A_U)$. Jestliže $\varphi \in D(A_U^*)$, pak

$$\begin{aligned} \exists \eta \in \mathcal{H} : \forall \psi \in D(A_U) = \text{Ran}(I - U) : (\varphi, A_U \psi) &= (\eta, \psi) \\ \exists \eta \in \mathcal{H} : \forall \chi \in \mathcal{H} : (\varphi, A_U(I - U)\chi) &= (\eta, (I - U)\chi) \\ &: (\varphi, i(I + U)\chi) = (\eta, (I - U)\chi) \\ &: i((I + U^*)\varphi, \chi) = ((I - U^*)\eta, \chi) \\ &: (-i(I + U^*)\varphi - (I - U^*)\eta, \chi) = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

Z poslední linky plyne $(I + U^*)\varphi = i(I - U^*)\eta$. Chceme ukázat, že odsud lze odvodit $\varphi \in D(A_U) = \text{Ran}(I - U)$, tedy φ musí jít vyjádřit jako obraz nějakého vektoru při $I - U$. Když získanou rovnost patřičně upravíme,

$$\begin{aligned} (I + U^*)\varphi &= i(I - U^*)\eta & / U \cdot \\ (U + I)\varphi &= i(U - I)\eta & / + (I - U)\varphi \\ 2I\varphi &= (I - U)(-i\eta + \varphi), & / \div 2 \\ \varphi &= (I - U)\frac{\varphi - i\eta}{2} \end{aligned} \quad (10)$$

dostaneme právě takové vyjádření. Vektor φ je v něm zapsán „pomocí sám sebe“, ale to ničemu nevádí – stačí, že z předpokladu φ i η existují a dohromady dávají vektor, jehož je φ obrazem při $I - U$, což jsme přesně potřebovali.

Můžeme tedy psát:

$$C : \mathcal{L}_{\text{sa}} \rightarrow \mathcal{U}_1(\mathcal{H}) : A \mapsto (A - iI)(A + iI)^{-1} \text{ bijekce, } C^{-1} : U \mapsto i(I + U)(I - U)^{-1}. \quad (11)$$

Nesamosdružené operátory

Předpis (2) můžeme aplikovat i na nesamosdružené symetrické operátory. Jejich obraz pochopitelně nebude unitární, ale co o něm říci lze?

Stejně jako pro samosdružené operátory i pro symetrické jsou $A + iI$ a $A - iI$ invertibilní, ale jejich obor hodnot je menší než $\mathcal{H}$. Definičním oborem $C(A)$ pro A symetrický bude $\text{Ran}(A + iI)$, protože vektor získaný aplikací $(A + iI)^{-1}$ na něj bude zaručeně také v definičním oboru $A - iI$. Protože touto operací dokážeme dosáhnout *každého* vektoru z $D(A - iI)$, oborem hodnot $C(A)$ bude podobně $\text{Ran}(A - iI)$.

Operátor $C(A)$ tedy zobrazuje prostor $\text{Ran}(A + iI)$ bijektivně na $\text{Ran}(A - iI)$. Na tomto oboru splňuje $\|C(A)\psi\| = \|\psi\|$. Pokud ještě operátor A je *uzavřený* symetrický, tedy $A \in \mathcal{L}_{\text{cs}}(\mathcal{H})$, je $C(A)$ **izometrický** (to je podmínka čistě názvoslovního charakteru, definice izometrického V vyžaduje $D(V)$ uzavřený). Jestliže není, můžeme $C(A)$ na izometrii jednoznačně rozšířit uzávěrem, stejně jako u jiných omezených operátorů to nebudeme považovat za překážku.

Zde si vzpomeneme na definici indexů defektu: počáteční i cílový prostor izometrie $C(A)$ jsou uzavřené podprostory v $\mathcal{H}$, pro něž hodnoty $n_{\pm}(A)$ vystupují v roli kodimenze! To znamená, že existuje podprostor K_- dimenze $n_-(A)$, který je ortogonální na $D(C(A))$ a tedy $C(A)$ na něm není definován, a podobně podprostor K_+ dimenze $n_+(A)$ kolmý na $\text{Ran}(C(A))$.

Zopakujeme-li argumentaci použitou pro samosdružené operátory, ukážeme snadno, že zobrazení (11) opět zprostředkovávají bijekci, tentokrát mezi $\mathcal{L}_{\text{cs}}(\mathcal{H})$ a $\mathcal{V}_1(\mathcal{H})$ – množinou všech izometrií mezi uzavřenými podprostory $\mathcal{H}$ takových, že $\text{Ran}(V - I) = \mathcal{H}$.

Hledání symetrických rozšíření

Klíčem k hledání izometrických (resp. unitárních) rozšíření $C(A)$, a tím uzavřených symetrických (resp. samosdružených) rozšíření A skrz C^{-1} , je tedy možnost dodefinování $C(A)$ na některých vektorech z K_- . Aby potom i při lineárním rozšíření zůstala zachována podmínka izometrie, musí obrazy, které jim přiřadíme, patřit naopak do K_+ . Spojitým rozšířením potom dostaneme izometrické rozšíření $\tilde{V} = C(\tilde{A})$.

Formálně řečeno volíme podprostory $G_- \subset K_- = (\text{Ran } (A + iI))^\perp = \text{Ker } (A^* - iI)$ a $G_+ \subset K_+ = (\text{Ran } (A - iI))^\perp = \text{Ker } (A^* + iI)$ takové, aby $\dim G_+ = \dim G_- > 0$, a izometrické zobrazení $V_G: G_- \rightarrow G_+$, jehož pomocí $V = C(A)$ rozšíříme na $D(V) \oplus G_-$ předpisem

$$\tilde{V}\psi = V\varphi + V_G\chi, \quad \text{kde } \psi = \varphi + \chi, \varphi \in D(V), \chi \in G_-, \quad (12)$$

čímž vznikne izometrie $D(V) \oplus G_-$ na $\text{Ran } V \oplus G_+$. Operátor $\tilde{A}$ pak získáme jako $C^{-1}(\tilde{V})$. Je-li dimenze d prostorů $G_\pm$ konečná, pak indexy defektu operátoru $\tilde{A}$ jsou rovny

$$n_\pm(\tilde{A}) = n_\pm(A) - d \quad (13)$$

(věta 8.2.5, učebnice používá pro $G_\pm$ opačnou znaménkovou konvenci).

Odsud je evidentní, že

1. Nutnou podmínkou, abychom rovnicí (13) mohli dospět k indexům defektu $(0, 0)$, tedy k samosdruženému operátoru $\tilde{A}$, je, že indexy defektu $n_+(A)$ a $n_-(A)$ jsou si rovny.
2. Je-li jeden z indexů defektu $A \in \mathcal{L}_{\text{cs}}(\mathcal{H})$ nulový a druhý ne, pak A je maximální symetrický operátor, který samosdružené rozšíření nemá.
3. Samosdružených rozšíření libovolného symetrického operátoru A , pro něž $n_+(A) = n_-(A) > 0$, je nekonečně mnoho různých – stejně jako izometrií K_- na K_+ .
4. Je-li $n_+(A) = n_-(A) = n \in \mathbb{N}$, každé maximální symetrické rozšíření A je samosdružené a je vzájemně jednoznačně určeno unitární maticí $M \in \text{U}(n)$, představující zobrazení K_- na K_+ v nějakých jejich pevně zvolených ortonormálních bázích.
5. Jsou-li $n_+(A)$ i $n_-(A)$ nekonečné (a rovná-li se kardinalita defektních prostorů), lze dospět k maximálním symetrickým rozšířením i samosdruženým i nesamosdruženým. Pro podprostory K_- , K_+ stejné, ale nekonečné dimenze totiž existují izometrie, které jsou bijektivní, i takové, které nejsou surjektivní.

Je praktické si na závěr přeformulovat rozšíření (12) do tvaru platného přímo pro operátory A , $\tilde{A}$, abychom nemuseli pouze za tímto účelem pokaždé konstruovat Cayleyho obraz a po provedení rozšíření V na $\tilde{V}$ jej transformovat zpět. Tuto úlohu plní (druhá) von Neumannova formule (věta 8.3.2): pro každé ψ z definičního oboru rozšíření $\tilde{A} \supset A$ existuje právě jedno $\varphi \in D(A)$ a $\eta \in G_-$ taková, že $\psi = \varphi + (I - V_G)\eta$. Potom

$$\tilde{A}\psi = A\varphi + i(I + V_G)\eta. \quad (14)$$

Toto dává i vyjádření pro $D(\tilde{A})$:

$$D(\tilde{A}) = D(A) \oplus (I - V_G)G_- \quad (15)$$

(pozor na to, že „přidaný“ podprostor není roven G_- a není ani ortogonální na $D(A)$, jako platilo pro rozšiřování $V - D(A)$ ostatně má ortogonální doplněk prázdný).

Na cvičení uvidíme, jak tento celý proces může v praxi vypadat.

Poznámka: Zdánlivě se lze obejít bez konstrukce operátoru A^* , protože jediné, k čemu jej používáme, je nalezení prostorů $\text{Ker } (A^* \pm iI)$, které jdou také hledat jako ortogonální doplňky $\text{Ran } (A \mp iI)$. Stačí si však napsat odpovídající vzorec, abychom seznali, že se jedná o zcela srovnatelné množství práce. Jakmile máme předpis A^* v ruce, je nalezení jeho jádra s přidaným násobkem identity již přímočarý výpočet.

Shrnutí postupu

Kompletní „kuchařka“ hledání symetrických nebo samosdružených rozšíření symetrického operátoru A :

1. Zkonstruujeme sdružený operátor A^* .
2. Najdeme jeho defektní prostory $K_+ = \text{Ker}(A^* + iI)$, $K_- = \text{Ker}(A^* - iI)$ a jejich dimenze $n_{\pm}(A) = \dim K_{\pm}$.
3. Určíme, která nastává z možností:
 - Jsou-li oba indexy defektu nulové, A je samosdružený (pokud $A = \bar{A}$) nebo v podstatě samosdružený,
 - je-li nulový jeden index defektu a druhý ne, $\bar{A}$ je maximální symetrický operátor, nesamosdružený,
 - jestliže oba indexy defektu jsou nenulové, pokračujeme v postupu.
4. Zvolíme podprostory G_+ a G_- prostorů K_+ , K_- splňující $\dim G_+ = \dim G_-$.
5. Zvolíme nějakou izometrii $V: G_- \rightarrow G_+$, v případě konečných dimenzí popsanou unitární maticí.
6. Nový operátor $\tilde{A}_V$ definujeme na oboru

$$D(\tilde{A}_V) = \{\psi + \varphi - V\varphi \mid \psi \in D(A), \varphi \in G_-\} \quad (16)$$

předpisem

$$A_V(\psi + \varphi - V\varphi) = A\psi + i(\varphi + V\varphi). \quad (17)$$

7. Nové indexy defektu $n_{\pm}(\tilde{A}_V)$ jsou dimenze ortogonálních doplňků $G_{\pm}$ do $K_{\pm}$, v případě $\dim G_{\pm} = d$ je $n_{\pm}(\tilde{A}_V) = n_{\pm}(A) - d$. Pokud se oba vynulovaly, získáváme (případným uzávěrem) samosdružený operátor.

Dodatek: První von Neumannova formule

Neméně důležitá než druhá von Neumannova formule je i první – v dnešním výkladu jsme ji nepotřebovali, ale může se hodit v budoucnu. Mluví, podobně jako druhá o symetrických rozšířeních, o definičním oboru, tentokrát však sdruženého operátoru A^* :

Věta (První von Neumannova formule, 8.1.8). Nechť A je uzavřený symetrický operátor. Potom pro každé $\psi \in D(A^*)$ existuje jednoznačný rozklad $\psi = \psi_0 + \psi_+ + \psi_-$, kde $\psi_0 \in D(A)$, $\psi_+ \in \text{Ker}(A^* + iI)$, $\psi_- \in \text{Ker}(A^* - iI)$.

O prostorech $K_{\pm} = \text{Ker}(A^* \pm iI)$ víme, že jsou ortogonální, ale nejsou kolmé na $D(A)$ (nemá ortogonální doplněk). V rozkladu analogickém (15),

$$D(A^*) = D(A) \oplus K_- \oplus K_+, \quad (18)$$

tedy stejně jako dříve vyjadřujeme jen jednoznačnost součtu, ne jeho ortogonalitu. Plyne odsud ovšem závěr o dimenzi ne ortogonálního doplňku, ale *faktorprostoru*:

$$\dim(D(A^*)/D(A)) = n_+(A) + n_-(A). \quad (19)$$

Někdy se může podařit tento faktorprostor parametrizovat a získat tak částečnou informaci o hodnotách $n_{\pm}$. Zajímavý je potom nový pohled na (15), že z „chybějících“ vektorů z prostoru $K_- \oplus K_+$ (zde již skutečně direktní součet) doplňujeme jistým způsobem vybrané, zrovna ty tvaru $\eta - V_G\eta$, což zachová symetrii. Různá rozšíření přidají do $D(A)$ různé vektory, ale nikdy ne více než $\min\{n_-(A) + n_+(A)\}$ lineárně nezávislých, tedy nejvýše polovinu hodnoty (19).

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

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

nená 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

$$AC^1(I) = \{f \in L^1_{\text{loc}}(I) \mid f \text{ i } f' \text{ jsou absolutně spojitě v } I\} \quad (4)$$

(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: vycházejíce 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. omezeného $I = (a, b)$, 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 příslušné 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 .

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 a a $\tilde{a}$ se rovnají.

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

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

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

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

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 Fourierovy transformace a $\psi = F_3^{-1}\varphi = \mathcal{F}_3^+\varphi$ je omezená funkce. Její supremová norma

$$\|\psi\|_\infty \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \|\varphi\|_1 \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \left\| \frac{1}{1+h(\mathbf{y})} \right\|_2 \|(1+h(\mathbf{y}))\varphi(\mathbf{y})\|_2 \leq C(\|\varphi\|_2 + \|T_h\varphi\|_2) = C(\|\psi\|_2 + \|H_0\psi\|_2), \quad (8)$$

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 $\|H_0\psi\|_2$. 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

$$\|\psi_s\|_2 = s^{3/2}\|\psi\|_2, \quad \|H_0\psi_s\|_2 = \|T_h\varphi_s\|_2 = s^3s^{-7/2}\|T_h\varphi\|_2 = s^{-1/2}\|H_0\psi\|_2. \quad (10)$$

Užitím těchto vztahů je možno každý z faktorů před $\|\psi\|_2$, $\|H_0\psi\|_2$ 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

$$\forall a > 0: \exists b > 0: \|T_V\psi\|_2 \leq (a\|V\|_2)\|H_0\psi\|_2 + (b\|V\|_2)\|\psi\|_2 \quad (12)$$

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, násobení L^2 -funkcí podle Kato–Rellichovy věty s pomocí lemmatu 2 a násobení 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.

Druhý postulát kvantové fyziky

Druhý postulát kvantové fyziky (o měření) vyslovíme ve formulaci naší učebnice, i když existují i obecnější způsoby. Budeme se však nejprve potřebovat v základu seznámit s jedním novým druhem matematického objektu, o němž se jeho formulace opírá.

Projektorová míra

Uvažujme množinu X a nějakou σ -algebru jejích podmnožin $\mathcal{A} \subset \mathcal{P}(X)$. *Projektorovou mírou* budeme nazývat takové zobrazení $E: \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$, které splňuje trojici axiomů,

1. pro každé $M \in \mathcal{A}$ je $E(M)$ projektorem na $\mathcal{H}$,
2. pro každou nejvýše spočetnou posloupnost $(M_n)_{n < n_0 \leq \omega}$ **disjunktních** množin z $\mathcal{A}$ platí

$$E\left(\bigcup_{n < n_0} M_n\right) = \sum_{n < n_0} E(M_n), \quad (1)$$

přičemž v případě nekonečné sumy jde o limitu v silné operátorové topologii,

3. obrazem celé množiny X je $E(X) = I$.

Projektorová míra je skutečně druhem množinové míry, s kuriózní vlastností, že množinám nepřirazuje čísla, ale operátory. Axiomy jsou vysloveny v minimální podobě, samozřejmě mnoho dalších vlastností plyne z nich, zejména:

- $E(\emptyset) = 0$,
- $M \subset N \Rightarrow E(M) \leq E(N)$,
- $E(M)$ a $E(N)$ pro libovolné $M, N \in \mathcal{A}$ komutují,
- $E(M \cap N) = E(M)E(N)$, $E(M \cup N) = E(M) + E(N) - E(M \cap N)$,
- pro $(M_n)_{n < \omega}$ neklesající, resp. nerostoucí posloupnost v $\mathcal{A}$ platí

$$E\left(\bigcup_{n < \omega} M_n\right) = \text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} E(M_n), \quad \text{resp.} \quad E\left(\bigcap_{n < \omega} M_n\right) = \text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} E(M_n), \quad (2)$$

- pro každé $\varphi \in \mathcal{H}$ má zobrazení $\mu_\varphi(M) := (\varphi, E(M)\varphi)$ vlastnosti nezáporné a konečné míry na X .

Obzvláště **komutativita** libovolné dvojice projektorů z $E(\bullet)$ je pozoruhodná. Možná se v tuto chvíli hodí připomenout několik základních vlastností projektorů (5.4.2–4), ze kterých poznatky výše plynou:

- Operátor $E \in \mathcal{B}(H)$ je projektor $\Leftrightarrow$ je hermitovský a $E^2 = E$,
- $E \geq 0$, $\text{Ran } E$ je vždy uzavřený podprostor,
- $E + F$ je projektor $\Leftrightarrow E$ a F jsou ortogonální $\Leftrightarrow \text{Ran } E \perp \text{Ran } F \Leftrightarrow EF = FE = 0$,
- $E - F$ je projektor $\Leftrightarrow E \geq F \Leftrightarrow \text{Ran } E \supset \text{Ran } F \Leftrightarrow EF = FE = F$,
- $E - F$ je projektor $\Rightarrow \text{Ran } F \oplus \text{Ran}(E - F) = \text{Ran } E$,
- EF projektor $\Leftrightarrow EF = FE \Leftrightarrow \text{Ran}(EF) = \text{Ran } E \cap \text{Ran } F$,
- každá monotónní posloupnost projektorů má *silnou* limitu $E = \text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} E_n$. Pro její obor hodnot platí

$$\text{Ran } E = \bigcap_{n=1}^{\infty} \text{Ran } E_n \quad ((E_n) \text{ nerostoucí}), \quad \text{Ran } E = \overline{\bigcup_{n=1}^{\infty} \text{Ran } E_n} \quad ((E_n) \text{ neklesající}). \quad (3)$$

Příklad

Uvažujme *konečnou* množinu $X = \{x_1, \dots, x_n\}$, pro niž pak můžeme za algebru $\mathcal{A}$ brát celé 2^X . Nechť $(E_i)_{i=1}^n$ je systém vzájemně ortogonálních projektorů, jejichž součtem je identita. Pak pro $M \subset X$ můžeme definovat

$$E(M) := \sum_{i=1}^n \chi_M(x_i) E_i, \quad (4)$$

tedy $E(\{x_i, \dots, x_k\}) = E_i + \dots + E_k$. Toto zobrazení má vlastnosti projektorové míry.

Projektorová míra a rozklad jednotky

Projektorová míra má velice blízko k **rozkladu jednotky**, který jste potkali u spektrálního teorému. Konkrétně existuje jednoznačná korespondence mezi rozklady jednotky a projektorovými měrami nad $\mathbb{R}$, $\mathcal{A} = \mathcal{B}^1$.

Rozklad jednotky z projektorové míry nad $(\mathbb{R}, \mathcal{B}^1)$ získáme jednoduše tak, že uvažujeme míry množin tvaru $(-\infty, t)$. Snadno se přesvědčíme o dodržení požadovaných vlastností:

- $t < u \Rightarrow (-\infty, t) \subset (-\infty, u) \Rightarrow E((-\infty, t)) \leq E((-\infty, u)) \Rightarrow E_t \leq E_u$,
- silná spojitost zprava: z $t_n \rightarrow t_+$ lze vybrat nerostoucí posloupnost $(\tilde{t}_n)$, potom $E((-\infty, \tilde{t}_n))$ je nerostoucí a podle (2) je $E((-\infty, t))$ rovno její silné limitě,
- pro $s\text{-}\lim_{t \rightarrow +\infty} E_t = I$, $s\text{-}\lim_{t \rightarrow -\infty} E_t = 0$ volíme neomezenou rostoucí, resp. klesající posloupnost a opět převedeme na míru sjednocení nebo průniků $(-\infty, t_n)$, kterou je $E(\mathbb{R}) = I$, resp. $E(\mathbb{R}) = 0$ podle (2) a axiomů.

Naopak, máme-li rozklad jednotky, projektorovou míru musíme dodefinovat i na jiných množinách než těch tvaru $(-\infty, t)$. Pro ostatní intervaly použijeme pravidla motivovaná tím, že kromě silné limity E_t v každém bodě u zprava (která je rovna E_u) silná limita zleva existuje podle základních vlastností projektorů také, jen může být od E_u odlišná (ostře menší). Použijeme tento rozdíl k dodefinování $E(\bullet)$ na zprava *otevřeném* intervalu,

$$E((-\infty, t)) := s\text{-}\lim_{u \rightarrow t-} E_u \stackrel{\text{ozn}}{=} E_{u-0}, \quad (5)$$

odkud již plyne, jak budeme postupovat u intervalů s libovolnými krají:

$$E(\langle a, b \rangle) := E_b - E_a, \quad E([a, b)) := E_{b-0} - E_a, \quad E(\langle a, b \rangle) := E_b - E_{a-0}, \quad E([a, b)) := E_{b-0} - E_{a-0}, \quad (6)$$

Jakmile jistou míru máme definovanu na množině všech intervalů v $\mathbb{R}$ a splňuje jisté požadavky konzistence (je tzv. regulární funkcí intervalu), lze jednoznačně rozšířit na míru, definovanou na všech borelovských množinách. V tomto případě vzniklá míra splňuje požadavky na projektorovou míru.

Takto je projektorová míra E_A přiřazená každému samosdruženému operátoru A a často i obecněji, kde uslyšíme o projektorové míře, si tedy lze představit tuto konstrukci provedenou nad nějakým rozkladem jednotky. Projektorovou míru E_A nazýváme **spektrální mírou** operátoru A . Koncepce projektorové míry je však obecnější o to, že může být definovaná na jiných množinách než $\mathbb{R}$ a jiných σ -algebrách než borelovských podmnožinách.

Poznámka: zprava nebo zleva?

Ve skriptu 01FA2 se rozklad jednotky narozdíl od B–E–H definuje jako silně spojitý zleva. Zprava nebo zleva je **konvenční** volba, která nemá na teorii žádný dopad kromě toho, že v takovém případě bychom E_t přiřazovali intervalům $(-\infty, t)$ namísto $(-\infty, t]$, definovali E_{a+0} a patřičně prohodili všechny role. Projektorová míra vyjde v obou případech stejně a pro rozklad jednotky je pouze podstatné, že v některých hodnotách může mít skok. Silná limita existuje z obou stran, jde jen o to, kterou z nich v případě nerovnosti přiřazujeme E_t . Zde volím konvenci naší učebnice pro konzistenci a pro zdůraznění, že obě volby jsou skutečně stejně dobré.

Poznámka: proč silné limity?

Od začátku dnes pracujeme s omezenými operátory, proto může vyvstat otázka, proč limity neuvažujeme v topologii indukované operátorovou normou. Důvod je jednoduchý: monotónní posloupnost projektorů **nemůže** stejnoměrně konvergovat jiným způsobem, než být od jistého členu konstantní. Pro libovolné $n' > n$ takové, že $E_{n'} \geq E_n$, je totiž $E_{n'} - E_n$ nenulový projektor a má tedy normu 1. Proto Cauchyovu podmínku může splňovat jediné taková posloupnost, která je od jistého n dále konstantní, jiné posloupnosti stejnoměrnou limitu nemají.

Ostře rostoucí posloupnost projektorů není přitom nijak složité na prostorech nekonečné dimenze sestavit, například pro $L^2(\mathbb{R})$ mají tuto vlastnost operátory násobení funkcemi $\chi_{(0, t_n)}$ pro libovolnou rostoucí ostře posloupnost nezáporných čísel t_n . Silná limita ale existuje je jí násobení $\chi_{(0, \lim_{n \rightarrow \infty} t_n)}$, jak se snadno z definice přesvědčíme.

Druhý postulát kvantové fyziky

Se zdefinovanou projektorovou mírou můžeme již vyslovit druhý postulát v jeho funkční verzi.

Postulát 2 (o měření).

- a) Možnými výsledky měření veličiny A jsou body spektra $\sigma(A)$ operátoru A .
- b) Pravděpodobnost jevu, že na systému ve stavu W naměříme hodnotu pozorovatelné A ležící v borelovské množině $\Delta \subset \mathbb{R}$, je rovna
$$w(\Delta, A; W) = \text{Tr}(E_A(\Delta)W). \quad (7)$$
- c) Je-li pro *binární* měření výsledek experimentu kladný (je naměřeno, že hodnota veličiny A leží v Δ), pak stav systému po měření je popsán statistickým operátorem

$$W' = \frac{E_A(\Delta)WE_A(\Delta)}{\text{Tr}(E_A(\Delta)W)}. \quad (8)$$

Ve světle předchozího vidíme, že operátor A je ve druhých dvou bodech reprezentován pouze hodnotami své spektrální míry, a čísla z množiny $\mathbb{R}$, jimž (tj. jejichž intervalům a jiným množinám) jsou tyto projektory přiřazeny, vystupují jen jako jisté „označení“, který z projektorů se v bodu b) nebo c) realizoval. Smyslem části a) postulátu je stanovit *fyzikální* přiřazení těmto hodnotám ze spektra jako reálně naměřeným hodnotám odpovídající pozorovatelné *veličiny* A , které z měření vycházejí.

Pokud tato korespondence s experimentální realitou pro nás není esenciální, nebo pokud popisované měření není ve skutečnosti měřením operátoru přiřazeného nějaké veličině, jak se stát může, můžeme také uvažovat měření v jistém zobecněném smyslu, definované čistě projektorovou mírou nad obecnou množinou X , kde pak přebírá roli množiny možných výsledků měření tato množina, která vůbec nemusí být číselná. Dá se ukázat, že na **separabilním** prostoru pro *každou* projektorovou míru $E(\bullet)$ lze najít samosdružený operátor takový, že množina projektorů, kterou dává jeho spektrální míra, se shoduje s oborem hodnot $E(\bullet)$. Důkaz (jedná se o adaptaci věty 14.1.4 ve světle lemmatu 14.1.6) nebudeme uvádět, protože jeho *aplikační* hodnota je nulová, ale pro účely teorie budeme tento poznatek brát jako oprávnění na separabilních prostorech brát tvrzení postulátu 2 za zcela zaměnitelné s vyjádřením pomocí projektorové míry $E: \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$ na X .

Příklad

Protože podle formulace výše bude projektorová míra v měření centrálním bodem, a pro měření pozorovatelné veličiny A se bude jednat o spektrální míru E_A , bude dobré se s tímto objektem blíže seznámit. To bude hlavně účelem příští hodiny, dnes zakončíme jen příkladem, jak může třeba vypadat.

Pro každou borelovskou množinu $M \in \mathcal{B}^1$ uvažujme operátor násobení charakteristickou funkcí $\chi_M(x): T_{\chi_M}$. Z obecných vlastností T_f plyne, že se jedná o projektor (a T_f je projektorem právě tehdy, když $\text{Ran } f \subset \{0, 1\}$).

Součet charakteristických funkcí disjunktních intervalů je charakteristická funkce sjednocení. Pokud uvažujeme spočetný systém $\{M_n \mid n \in \mathbb{N}_0\}$ disjunktních a $N_n = \bigcup_{k < n} M_k$, $N = \bigcup_{k < \omega} M_k$, pak

$$\|T_{\chi_N}\psi - T_{\chi_{N_k}}\psi\|^2 = \int_{N \setminus N_k} \|\psi(x)\|^2 dx \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0, \quad \forall \psi \in L^2(\mathbb{R}), \quad (9)$$

což je symbolicky zapsáno

$$T_{\chi_N} = \text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} T_{\chi_{N_k}}. \quad (10)$$

Nakonec $T_{\chi_{\mathbb{R}}}$ je identický operátor. Tedy $E: \mathcal{B}^1 \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}): M \mapsto T_{\chi_M}$ splňuje všechny vlastnosti projektorové míry.

Tato projektorová míra představuje spektrální míru operátoru Q . Stačí se přesvědčit, že

$$E_t^{(Q)} := E_Q((-\infty, t)) = T_{\chi_{(-\infty, t)}} \quad (11)$$

splňuje vlastnosti konstrukce, kterou jste rozklad jednotky definovali (uzpůsobené pro pravou spojitost):

- $(Q - tI)(I - T_{\chi_{(-\infty, t)}}) \geq 0$: operátor $I - T_{\chi_{(-\infty, t)}}$ je roven $T_{\chi_{(t, +\infty)}}$ a pak

$$(\psi, (Q - tI)T_{\chi_{(t, +\infty)}}\psi) = \int_{\mathbb{R}} (x - t)\chi_{(t, +\infty)}(x)|\psi(x)|^2 dx = \int_t^\infty (x - t)|\psi(x)|^2 dx \geq 0. \quad (12)$$

- $(Q - tI)T_{\chi_{(-\infty, t)}} \leq 0$: analogicky,
- $\text{Ker}(Q - tI) \subset \text{Ran } T_{\chi_{(-\infty, t)}}$: triviálně splněno.

Pokud nyní tuto míru použijeme ve druhém postulátu, ve výrazu $\text{Tr}(E_Q(\Delta)W)$ pro čistý stav $W = E_\psi$ poznáváme správně Bornovu pravděpodobnostní interpretaci vlnové funkce při měření polohy:

$$\text{Tr}(E_Q(\Delta)E_\psi) = (\psi, E_Q(\Delta)\psi) = (\psi(x), \chi_\Delta(x)\psi(x)) = \int_\Delta |\psi(x)|^2 dx. \quad (13)$$

Integrace podle projektorové míry

Projektorová míra se může zdát jako poměrně abstraktní pojem, ale v první řadě se jedná o *míru* a vyvstává přirozená otázka, jestli nad ní můžeme vybudovat operaci integrálu funkce stejně jako nad Lebesgueovou mírou, jaké funkce jsou integrovatelné a co výsledek znamená.

V první řadě si oproti Lebesgueově míře uvědomme několik rozdílů (kromě zjevného, že nezobrazuje do $\mathbb{R}_+$):

- I jednotlivé body mohou mít nenulovou míru (tzv. diskrétní body míry E): nad $\mathbb{R}$ se jedná přesně o ty body, ve kterých má E_t skok. Pro spektrální míru samosdruženého operátoru A to nastává v bodech $\lambda \in \sigma_p(A)$.
- Naopak, celé podintervaly mohou mít míru nulovou – přiřazený nulový projektor. Například pokud A je omezený s číselným oborem hodnot (m, M) , potom $E_A((-\infty, m)) = E_A((M, +\infty)) = 0$.
- Žádný interval, ani nekonečný, nemá v nějakém smyslu „nekonečnou“ míru: každá hodnota $E(M)$ je shora omezena (ve smyslu pozitivních operátorů) I . Jedná se tedy nejen o σ -konečnou, ale přímo konečnou míru. Totéž platí pro již číselnou míru μ_ψ pro každé ψ ($\mu_\psi(X) = \|\psi\|^2$).

Otázka, jaké funkce můžeme chtít integrovat, je těmito pozorováními silně ovlivněna. Například funkce $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, která nabývá nenulových hodnot jen mimo číselný obor hodnot omezeného operátoru A , je z hlediska spektrální míry E_A skoro všude nulová. Naopak, dvě funkce, které se liší hodnotami v jednom bodě, nejsou ekvivalentní, pokud se jedná o diskrétní bod míry E_A . Nakonec v důsledku posledního bodu například i konstantní, nenulová funkce může mít dobře definovaný integrál.

Integrál podle míry E má smysl definovat pro funkce, které jsou vůči E měřitelné, to znamená, vzor každého intervalu musí být některá funkce ze σ -algebry $\mathcal{A} \subset 2^X$, která je definičním oborem E . Tento fakt není nikterak ovlivněn skutečností, že míra zobrazuje do projektorů: pokud, jak je běžné, za $(X, \mathcal{A})$ bereme $(\mathbb{R}^n, \mathcal{B}^n)$, jedná se jednoduše o *borelovské* funkce. Musí ovšem být definované E -skoro všude, to znamená, pokud chceme použít funkci, která v některých bodech nebo intervalech definovaná není, musí se tak dít na množině E -míry 0. Množinu funkcí, které kritéria splňují, označíme Φ_E .

Definice integrálu začíná identicky jako v Lebesgueově teorii. Nejprve se vezmou *jednoduché funkce*, které jsou konstantní na množinách $M_n \in \mathcal{A}$:

$$\sigma(x) = \sum_{j < n} \alpha_j \chi_{M_j}(x), \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (1)$$

Tyto funkce jsou složeny z „obdélníků“, na nichž je integrál definovat triviální. Zavedeme tedy:

$$\int_X \sigma(x) dE(x) := \sum_{j < n} \alpha_j E(M_j). \quad (2)$$

Konstanta α_j podél množiny M_j se zintegruje na α_j -násobek míry M_j , jak je obvyklé – s tím rozdílem, že výsledkem je *operátor*. Pokud stejnou jednoduchou funkci jsme schopni získat různými rozklady tvaru (1), hodnota (2) na zvoleném rozkladu pochopitelně nebude záviset – to platí pro každou aditivní míru.

Pro každou jednoduchou funkci platí (9.3.2)

$$\int_X \sigma(x)^* dE(x) = \left(\int_X \sigma(x) dE(x) \right)^*, \quad (3a)$$

$$\left\| \int_X \sigma(x) dE(x) \right\| = \max_{j < n} |\alpha_j| \stackrel{\text{ozn}}{=} \|\sigma\|_\infty^{(E)}, \quad (3b)$$

$$\int_X \sigma(x) \tau(x) dE(x) = \int_X \sigma(x) dE(x) \int_X \tau(x) dE(x), \quad (3c)$$

kde pravá strana (3b) předpokládá, že zápis (1) je proveden ve formě, kdy množiny M_j jsou zvoleny jako *disjunktní* a *nenulové míry*. Z (3c) je také zřejmé, že operátory $\int \sigma dE$ a $\int \tau dE$ komutují.

V dalším kroku rozšíříme integrál z množiny jednoduchých funkcí na funkce, které jsou vůči E omezené – jejich třídu označíme $L^\infty(X, dE)$. Esenciální omezenost, stejně jako L^∞ -normu, definujeme pomocí esenciálního oboru

hodnot, se kterým jsme se již setkali, jen s jinou mírou, u operátorů násobení funkcí:

$$R_{\text{ess}}^{(E)}(f) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \forall \varepsilon > 0: E(f^{-1}(U_\varepsilon(\lambda))) \neq \emptyset\}. \quad (4)$$

L^∞ -norma funkce f v prostoru $L^\infty(X, dE)$ je tedy nejmenší takové c , že $|f(t)| < c$ E -skoro všude v X .

Jednoduché funkce v $L^\infty(X, dE)$ tvoří hustou množinu a integrál je díky (3b) spojitě zobrazení vůči L^∞ -normě, takže je možné k integrálu obecné $f \in L^\infty(X, dE)$ dojít spojitým rozšířením. V prostoru operátorů se tedy jedná o *stejnou* limitu (limitu v operátorové topologii) z integrálů jednoduchých funkcí,

$$\int_X f(x) dE(x) = \text{u-lim}_{n \rightarrow \infty} \int_X \sigma_n(x) dE(x), \quad \text{kde } \sigma_n \text{ jednoduché tak, že } \|f - \sigma_n\|_\infty^{(E)} \rightarrow 0. \quad (5)$$

Pro výraz $(\psi, \mathcal{J}_E(f)\psi)$, kde $\mathcal{J}_E(f)$ je zkrácené označení pro operátor $\int_X f dE$, navíc platí

$$(\psi, \mathcal{J}_E(f)\psi) = \int_X f(x) d\mu_\psi \quad (6)$$

i bez potřeby jakékoli limity (integrujeme číselnou funkci s číselnou měrou – na tom není nic nového!).

Integrál v této formě je lineární, zobecňuje všechna tři pravidla (3) přímočaře i na funkce z $L^\infty(X, dE)$ a produkuje vždy *normální* operátory (snadný důsledek multiplikativity). Mezi jeho zajímavější vlastnosti patří (9.3.3):

- spektrum $\int_X f(x) dE(x)$ je rovno $R_{\text{ess}}^{(E)}(f)$,
- $\int_X f(x) dE(x)$ je nulový operátor právě tehdy, když f je nulová E -skoro všude,
- jestliže posloupnost funkcí $f_n \in L^\infty$ konverguje k f bodově, E -skoro všude na X , a jestliže množina $\{\|f_n\|_\infty^{(E)} \mid n \in \mathbb{N}\}$ je omezená, potom také $f \in L^\infty$ a její integrál je **silnou** limitou

$$\int_X f(x) dE(x) = \text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} \int_X f_n(x) dE(x) \quad (7)$$

Poslední ze zmíněných pravidel se v posledním kroku použije k rozšíření integrálu i na neomezené funkce. K těm totiž nelze omezenými funkcemi konvergovat stejnoměrně, takže spojitost (3b) je nepoužitelná. Platí ovšem

$$\begin{aligned} \text{stejněměrná konvergence } (\|f\|_\infty^{(E)}) \text{ funkcí} &\Rightarrow \text{stejněměrná konvergence (u-lim) integrálů,} \\ \text{bodová konvergence } (f(x)) \text{ funkcí} &\Rightarrow \text{silná konvergence (s-lim) integrálu.} \end{aligned} \quad (8)$$

Silná konvergence je navzdory svému názvu *slabší* než stejnoměrná (ale silnější než slabá), takže v silné topologii konvergují i posloupnosti, které nekonvergují v normě. Integrál obecné funkce $f \in \Phi_E$ podle míry E tedy získáme prostředkem silné limity integrálů omezených funkcí blížících se k ní bodově, výsledkem bude moci být i neomezený operátor.

Silná konvergence posloupnosti operátorů T_n k operátoru T znamená, že posloupnosti vektorů $T_n\psi$ konvergují k hodnotě $T\psi$ pro všechna $\psi \in D(T)$ a pro ostatní vektory nemají limitu. Pokud za T_n nyní dosadíme E -integrál omezené funkce f_n , pro tyto výrazy se dozvídáme

$$\|T_n\psi\|^2 = (\mathcal{J}_E(f_n)\psi, \mathcal{J}_E(f_n)\psi) = (\psi, \mathcal{J}_E(f_n^*)\mathcal{J}_E(f_n)\psi) = (\psi, \mathcal{J}_E(|f_n|^2)\psi) = \int_X |f_n(x)|^2 d\mu_\psi(x), \quad (9)$$

čímž je otázka konvergence vektorů převedena na konvergenci *číselných* integrálů (s neobvyklou mírou, ale přece), pro kterou již máme mnoho pouček. Zejména víme, že blížíme-li se k nějaké funkci f bodově, s majorantou nezávislou na n , pak integrály f_n konvergují k integrálu f (Lebesgueova věta).

Takové vlastnosti má například posloupnost

$$f_n(x) = f(x)\chi_{M_n}(x), \quad \text{kde } M_n = f^{-1}(\langle -n, n \rangle), \quad (10)$$

jejíž každý člen navíc patří do $L^\infty(X, dE)$ a tedy má integrál již definovaný dřívější teorií. Posloupnost členů $(\int_X f_n dE)\psi$ je potom pro každé $\psi \in \mathcal{H}$ posloupnost vektorů s normami (9). Tato posloupnost může a nemusí být Cauchyovská. Nutnou podmínkou konvergence je, že vůbec konverguje

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_X |f_n(x)|^2 d\mu_\psi(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{M_n} |f(x)|^2 d\mu_\psi(x) = \int_X |f(x)|^2 d\mu_\psi(x). \quad (11)$$

Pokud ano, snadno se ukáže, že i samotné vektory tvoří Cauchyovskou posloupnost a mají limitu.

Silnou limitou posloupnosti integrálů $\int_X f_n dE$ je tedy operátor definovaný na množině

$$D_f = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \int_X |f(x)|^2 d\mu_\psi(x) < \infty \right\}, \quad (12)$$

který označíme

$$\text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} \int_X f_n(x) dE(x) =: \int_X f(x) dE(x). \quad (13)$$

Tím je, po ověření konzistence (nezávislosti na volbě $f_n \rightarrow f$) konstrukce integrálu dokončena a zbývá se podívat na hlavní vlastnosti, které o operátorech $\mathcal{J}_E(f) := \int_X f dE$ lze na základě vlastností $f(x)$ předpovědět.

Základní poznatek je, že pro každou $f \in \Phi_E$ je $\mathcal{J}_E(f)$ **hustě definovaný** – integrál přes libovolnou projektorovou míru E je tedy zobrazení Φ_E do $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. Toto tvrzení (9.4.1) si dokážeme. Je potřeba ukázat, že D_f je podprostor v $\mathcal{H}$ a že je hustý. Lineární kombinace se mají dít ve vektoru ψ , které je *parametrem* výrazu μ_ψ , potřebujeme tedy zkoumat

$$\mu_{\alpha\psi + \varphi}(M) = \|E(M)(\alpha\psi + \varphi)\|^2 \leq 2|\alpha|^2 \|E(M)\psi\|^2 + \|E(M)\varphi\|^2 = 2|\alpha|^2 \mu_\psi(M) + \mu_\varphi(M). \quad (14)$$

Pokud tedy i φ i ψ patří do (12) a $\alpha \in \mathbb{C}$, pak i integrál stejné funkce $|f(x)|^2$ vůči míře $\mu_{\alpha\psi + \varphi}$ je konečný a $\alpha\psi + \varphi \in D_f$. Pro hustotu stačí vzít pro množiny M_n z (10) vektory $\psi_n = E(M_n)\psi$, které nezávisle na volbě ψ do D_f určitě patří, protože

$$\int_X |f(x)|^2 d\mu_{\psi_n}(x) \quad (15)$$

používá míru

$$\mu_{\psi_n}(N) = (\psi_n, E(N)\psi_n) = (E(M_n)\psi, E(N)E(M_n)\psi) = (\psi, E(M_n \cap N)\psi) = \mu_\psi(M_n \cap N) \quad (16)$$

a tedy je roven

$$\int_X |f(x)|^2 d\mu_{\psi_n}(x) = \int_{X \cap N} |f(x)|^2 d\mu_\psi(x) \leq |n|^2 \int_{X \cap N} d\mu_\psi(x) = |n|^2 \mu_\psi(X \cap N) < \infty. \quad (17)$$

Z předchozího je ještě snadné ukázat, že $\int_X f dE$ je **neomezený**, pokud integrand $f \in \Phi_E \setminus L^\infty(X, dE)$ – jedná se tedy o omezený operátor právě a pouze tehdy, když f je vůči E omezená. Důvodem je, že posloupnost na levé straně (13) je posloupnost omezených operátorů, jejichž normy ale rostou asymptoticky stejně rychle jako n , protože takové supremové normy mají funkce f_n podle své definice. Jediný případ, kdy dojdeme k omezenému operátoru, je tedy, pokud se posloupnost od jistého členu přestane měnit – pokud existuje n , pro které $|f(x)| > n$ již jen na E -nulové množině.

Další vlastnosti $\mathcal{J}_E: \Phi_E \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}): f \mapsto \int_X f dE$, které najdete dokázané v 9.4.8 a 9.4.10, si uvedeme formou seznamu. Zaměřte prosím svou pozornost obzvláště na podobnost s vlastnostmi operátorů násobení funkcí T_f !

- Integrál $\mathcal{J}_E(f)$ je homogenní v f ,
- $\mathcal{J}_E(f + g) \supset \mathcal{J}_E(f) + \mathcal{J}_E(g)$, $\mathcal{J}_E(fg) \supset \mathcal{J}_E(f)\mathcal{J}_E(g)$, konkrétně levé strany se rovnají uzávěru pravých (9.4.11),
- $\mathcal{J}_E(f) = \mathcal{J}_E(g)$ právě tehdy, kdy $f = g$ E -skoro všude na X ,
- $\mathcal{J}_E(f^*) = \mathcal{J}_E(f)^*$, zejména odsud plyne, že každý $\mathcal{J}_E(f)$ je **uzavřený**, protože lze psát jako sdružení jiného operátoru, $\mathcal{J}_E(f^*)$,
- $\mathcal{J}_E(f)$ je invertibilní právě tehdy, pokud f je E -skoro všude nenulová, pro takové funkce pak $\mathcal{J}_E(f)^{-1} = \mathcal{J}_E(1/f)$,
- $\mathcal{J}_E(f)$ je **normální** operátor a je **samosdružený** právě tehdy, když f je E -skoro všude reálná,
- $\sigma(\mathcal{J}_E(f)) = R_{\text{ess}}^{(E)}(f)$.

Poznámka: Důvodem, proč T_f splňují tolik podobných vlastností, je, že T_f je jednoduše právě takovým integrálem: konkrétně $T_f = \int_X f dE_Q$, kde Q je operátor násobení nezávislou proměnnou na $L^2(X, d\mu)$. I pro spektrum $\mathcal{J}_E(f)$ platí zcela stejná kritéria jako pro T_f s mírou μ nahrazenou za E .

Spektrální teorém (varianta s projektorovou mírou)

Spektrální teorém pro hermitovské operátory znáte z o1FA2 zapsaný pomocí rozkladu jednotky:

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda dE_{\lambda}^{(A)} = A. \quad (18)$$

Nikoho asi nepřekvapí, že integrace podle spektrální míry poskytuje jeho alternativní zápis

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda dE(\lambda) = A. \quad (19)$$

Integrálem funkce x podle spektrální míry samosdruženého operátoru A je tedy A sám.

Stejně tak umíte počítat *omezené* funkce *hermitovského* operátoru jako

$$f(A) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dE_{\lambda}^{(A)}; \quad (20)$$

nyní dokážeme počítat *jakoukoli* (měřitelnou) funkci *samosdruženého* operátoru jako

$$f(A) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dE(\lambda). \quad (21)$$

Vzorec by samozřejmě šel také napsat integrálem rozkladu jednotky, jen neomezeného na (m, M) – v ruce máme ale nyní silnější nástroj, pomocí kterého lze integrovat i na jiných množinách než $\mathbb{R}$. Jako minimální příklad uveďme, že rozklad (19) existuje kromě samosdružených operátorů pro všechny normální se spektrální mírou nad $\mathbb{C}$ – zde by snaha o konstrukci analogickou rozkladu jednotky byla značně kontraproduktivní.

V rámci (21) stojí za pozornost zejména následující funkce:

- polynomy; jejich integrál vychází stejně jako dosazení A do stejného polynomu,
- spektrální rozklad je také naší cestou k operátorové **exponenciále** pro neomezené operátory,
- funkce $1/(x - \mu)$, kterou získáváme rezolventu $R_A(\mu)$,
- funkce e^{iax} pro libovolné $a \in \mathbb{R}$, která zobrazuje samosdružené operátory na unitární (jinak než Cayleyova transformace – té odpovídá $(x - i)/(x + i)$),
- funkce $\arctan x$, která *injektivně* zobrazuje samosdružené operátory na hermitovské,
- reálná a imaginární část, komplexní sdružení (všechny pro normální operátory), absolutní hodnota,
- charakteristické funkce množin $M \in \mathcal{A}$ – v tomto případě získáváme $E(M)$, nejedná se však o *praktický* návod, jak k nim dospět.

Komutativita operátorů

Pojmu, že dva operátory *komutují*, jsme se dosud při různých příležitostech spíše vyhýbali. Důvodem je, že je praktické jej definovat jinak než přirozeným způsobem $AB = BA$. Konkrétně jsou celkem tři oblasti, ve kterých komutativitu zavádíme:

1. Dva omezené operátory – zde klasická definice platí a nepředstavuje žádný problém.
2. Omezený operátor s neomezeným.
3. Pro dva neomezené operátory zavedeme otázku komutativity jen pro dvojici **samosdružených**.

Komutace neomezeného operátoru s omezeným

Abychom řekli, že neomezený operátor T komutuje s omezeným B , budeme požadovat následující:

- pro $\psi \in D(T)$ je definována akce T i na $B\psi$, tedy $D(TB)$ je alespoň tak velký, jako $D(T)$,
- hodnoty $BT\psi$ a $TB\psi$ vycházejí stejně.

(Poznámka: $B\varphi$ je definované pro každé φ , takže i pro $T\psi$.) Tyto podmínky *nepopisují* rovnost operátorů TB a BT : operátor TB může být větší. Jedná se tedy o inkluzi:

$$BT \subset TB. \quad (1)$$

Podmínkou, připomeňme, je, aby oborem validity $BT\psi = TB\psi$ byla celá množina, kde T je definován. Jak se chovají hodnoty $B\varphi$ pro $\varphi \notin D(T)$, včetně toho, zda náhodou jsou také v $D(T)$, i když φ samo ne, je irelevantní. Eliminujeme ale opačný případ, kdy $T\psi$ by definované bylo a $TB\psi$ ne. Pokud $D(T) = \mathcal{H}$, zejména pokud $T \in \mathcal{B}(H)$, vyjadřuje (1) rovnost operátorů.

Příkladem, kdy tento rozdíl je podstatný, může jít následující: uvažujme dva operátory násobení funkcí, T_f a $T_{1/f}$, kde f je omezená funkce. Pokud $1/f$ je také omezená, což být může i nemusí, jsou T_f i $T_{1/f}$ omezené operátory, které jsou vzájemně inverzní a jejich součin v libovolném pořadí je identita a tedy komutují. Pokud však $\inf_{x \in \mathbb{R}} |f(x)| = 0$, pak $1/f$ je neomezená a operátor $T_{1/f}$ také, s definičním oborem

$$D(T_{1/f}) = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R}) \mid \varphi(x)/f(x) \in L^2(\mathbb{R})\}. \quad (2)$$

Definiční obor $T_f T_{1/f}$ nemůže být větší než $D(T_{1/f})$, protože složení operátorů znamená aplikovat nejprve tento a potom T_f . Množina $D(T_{1/f})$ je ale rovna $\text{Ran } T_f$, takže na *každé* $\varphi \in \mathcal{H}$ jdou operátory použít v pořadí T_f , poté $T_{1/f}$. Je tedy

$$T_{1/f} T_f = I, \quad T_f T_{1/f} = I|_{D(T_{1/f})} \quad (3)$$

a rovnost $T_f T_{1/f} = T_{1/f} T_f$ tak závisí na tom, jakou funkci f bychom volili. Podmínka komutativity ve tvaru

$$\underbrace{T_f}_{\overline{B}} \underbrace{T_{1/f}}_{\overline{T}} \subset \underbrace{T_{1/f}}_{\overline{T}} \underbrace{T_f}_{\overline{B}} \quad (4)$$

ale zůstává v platnosti.

Upozornění: Z příkladu vidíme, že při (1) *není* $TB - BT$ nulový operátor, jen jeho zúžení. Není oprávněné tvrdit $[T, B] = 0$, tato rovnost neplatí!

Pokud v tomto příkladu funkce f je neomezená a její převrácená hodnota také, nebude inkluze platit ani v jednom směru a musíme se obrátit na následující sekci, abychom komutativitu operátorů $T_f, T_{1/f}$ zachránili.

Dva samosdružené operátory

Z vlastností projektorové míry $E: \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$ plyne, že libovolná dvojice projektorů $E(M), E(N)$, $M, N \in \mathcal{A}$ komutuje. Využijeme této skutečnosti k definici komutativity dvou samosdružených operátorů (byla by použitelná i pro dva normální, ale většinou není důvod): řekneme, že operátory A_1, A_2 komutují právě tehdy, když komutují navzájem jejich spektrální míry, tj. každý projektor z E_{A_1} s každým projektorem z E_{A_2} . (Pro samosdružené ekvivalentně: když komutují jejich rozklady jednotky.)

Na základě této definice komutují libovolné dvě reálné funkce stejného samosdruženého operátoru, například e^{tA} a e^{sA} , což je velmi žádoucí vlastnost.

Může být výhodné otázku komutativity dvou neomezených operátorů převést na komutativitu omezených, protože je o tolik snáze vyjádřená. K tomu jsou běžně používány dvě cesty.

Protože funkce $1/(x - \mu)$ je injektivní, mají A a $R_A(\mu)$, $\mu \in \rho(A)$ spektrální míry se stejným oborem hodnot. Nutnou a postačující podmínkou komutativity A_1, A_2 je tedy, že $R_{A_1}(\mu)$ a $R_{A_2}(\nu)$ komutují pro nějakou, libovolně zvolenou dvojici hodnot μ, ν z jejich rezolventních množin.

Funkce e^{iax} není injektivní pro žádné $a \in \mathbb{R}$, takže operátory e^{iaA} mohou mít spektrální míry hrubší než A . Komutují ale všechny vzájemně a sjednocením oborů hodnot všech jejich spektrálních měr dostaneme opět $\text{Ran } E_A$ (detaily vyžadují trochu práce, dají se najít v důsledku 11.1.5 věty 11.1.4). Druhou podmínkou ekvivalentní komutativitě A_1, A_2 je tedy, že

$$e^{itA_1} e^{isA_2} = e^{isA_2} e^{itA_1}, \forall s, t \in \mathbb{R}, \quad (5)$$

a kromě velmi speciálních případů si nelze pro implikaci $\Leftarrow$ dovolit obecný kvantifikátor vynechat.

Překryv definic

Měli bychom ještě prokázat, že pokud A je samosdružený a B hermitovský, což zasahuje do aplikační oblasti obou sekcí, pak se také jejich požadavky na tvrzení o komutativitě shodují.

Využijeme zmíněného, že $A \in \mathcal{L}_{\text{sa}}(\mathcal{H})$ komutuje s omezeným B právě tehdy, pokud pro každé $\mu \in \rho(A)$

$$R_A(\mu)B = BR_A(\mu). \quad (6)$$

Uvažujme obecné $\psi \in D(A)$ a $\varphi = (A - \mu I)\psi$. Protože $R_A(\mu)$ je k $A - \mu I$ inverzní, dostáváme z podmínky (platné pro všechna $\varphi \in \mathcal{H}$)

$$\forall \psi \in D(A): \quad R_A(\mu)B(A - \mu I)\psi = BR_A(\mu)(A - \mu I)\psi = B\psi \quad (7)$$

Ovšem vektor na levé straně je v $\text{Ran } R_A(\mu) = D(A - \mu I) = D(A)$ (tudíž musí být i pravá strana) a na rovnici lze $A - \mu I$ i zleva:

$$\forall \psi \in D(A): \quad B(A - \mu I)\psi = (A - \mu I)B\psi. \quad (8)$$

Přičtením $\mu\psi$ k oběma stranám získáváme $BA \subset AB$ a všechny provedené úpravy byly ekvivalentní.

Pokud A_1 a A_2 komutují podle definice pro samosdružené operátory, dá se ukázat (na základě dosazení do funkce dvou samosdružených operátorů, což je téma až příští hodiny) poněkud obecnější výsledek, že

$$\forall \psi \in D(A_1 A_2) \cap D(A_2 A_1): \quad A_1 A_2 \psi = A_2 A_1 \psi \quad (9)$$

(viz příklad 10.7.5). Pro jeden nebo oba operátory omezené se tato podmínka redukuje na (1), resp. $A_1 A_2 = A_2 A_1$.

Zajímavé je, že podmínka tvaru pravé strany (9) obecně *není* pro komutativitu postačující, ani pokud platí na množině husté v $\mathcal{H}$, jak by člověk mohl očekávat. Existují, ač značně vykonstruované, protipříklady (16.2.2).

Reducibilita operátoru

Komutativita neomezeného T s projektoem E úzce souvisí s otázkou reducibility na podprostor.

Uvažujme inkluzi $ET \subset TE$ z hlediska vektoru $\psi \in \mathcal{H}$: jestliže $\psi \in D(T)$, pak $E\psi \in D(T)$ a $T(E\psi) = E(T\psi)$. Z poslední zapsané rovnice je evidentní, že obraz $E\psi$ při T je rovněž v $\text{Ran } E$, a tedy T zobrazuje vektory z $\text{Ran } E$ zpět do $\text{Ran } E$.

Srovnajme toto kritérium s podmínkou toho, kdy $\text{Ran } E$ je invariantní podprostor T (kap. 3.6), která je jednodušší: G je takovým podprostorem, pokud $\forall \psi \in D(T) \cap G: T\psi \in G$. Jestliže T komutuje s projektoem E , lze odsud ovšem vyvodit, že

1. $\text{Ran } E, (\text{Ran } E)^\perp$ jsou T -invariantní,
2. $ED(T) \subset D(T)$,

z čehož okamžitě vidíme, že požadavek komutativity je silnější. Díky poslednímu vztahu můžeme libovolný vektor $\psi \in D(T)$ rozložit na část v $\text{Ran } E$ a v jeho ortogonálním doplňku a T použít zvlášť – toto pro obecný T -invariantní podprostor není validní krok. Poslední dvojice uvedených podmínek je ve skutečnosti nejen nutná, ale i postačující pro $ET \subset TE$ (věta 7.4.4).

Za podmínky $ET \subset TE$ tedy můžeme velmi dobře říci, že T působí na (uzavřených) podprostorech $\text{Ran } E$ a $(\text{Ran } E)^\perp$ nezávisle na sobě. Je tedy plně specifikován operátorem T_1 na prvním a T_2 na druhém z nich a lze psát

$$T = T_1 \oplus T_2. \quad (10)$$

V takovém případě říkáme, že projektor E (či ekvivalentně $I - E$) *redukuje* operátor T a ten je tedy *reducibilní*. Může se stát, že žádný takový projektor kromě triviálních $0, I$ nelze najít. Potom nazýváme T *ireducibilním* operátorem.

Koncept reducibility má přímočaré zobecnění i na množinu operátorů: projektor E redukuje množinu $\mathcal{T}$, jestliže redukuje každé $T \in \mathcal{T}$; množina $\mathcal{T}$ je ireducibilní, jestli není redukována žádným netriviálním projektoem.

Normální operátory a reducibilita

Pro $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ uvažujme nějakou vlastní hodnotu λ , pokud existuje, její vlastní podprostor $K_\lambda := \text{Ker}(T - \lambda I)$ a projektor E_λ na něj. Pak pro každé $\psi \in D(T)$ je jistě $E_\lambda \psi \in D(T)$, protože je prvkem podprostoru *definovaného* akcí T . Podmínka $TE_\lambda \psi \in \text{Ran } E_\lambda$ je také pro vlastní vektory triviálně splněna. Mohla by se tedy pokazit jen T -invariance $\text{Ran}(I - E_\lambda)$.

Pro každý hustě definovaný operátor je

$$\text{Ker}(T - \lambda I)^* = (\text{Ran}(T - \lambda I))^\perp, \quad (11)$$

ale pokud navíc T je normální, pak

$$\begin{aligned} \text{Ker}(T - \lambda I) &= \text{Ker}(T^* - \lambda^* I) = (\text{Ran}(T - \lambda I))^\perp, \\ (\text{Ker}(T - \lambda I))^\perp &= \overline{\text{Ran}(T - \lambda I)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Uvažujme $\varphi \in \text{Ran}(I - E_\lambda)$, tedy $\varphi = \psi - E_\lambda \psi$ pro nějaké $\psi \in D(T)$. Pak $T\varphi = T\psi - T(E_\lambda \psi)$, ale $E_\lambda \psi$ je ve vlastním podprostoru λ , takže $T\varphi = T\psi - \lambda\psi = (T - \lambda I)\psi$. Dostáváme

$$\varphi \in (\text{Ran } E_\lambda)^\perp = \text{Ran}(I - E_\lambda) \Rightarrow T\varphi \in \text{Ran}(T - \lambda I) \Rightarrow T\varphi \in (\text{Ker}(T - \lambda I))^\perp = (\text{Ran } E_\lambda)^\perp, \quad (13)$$

což je poslední chybějící informace pro postačující podmínku komutativity T a E_λ . Normální operátor je tedy redukován projektoem na kterýkoli ze svých vlastních podprostorů.

Dodatek k unitární ekvivalenci

K našemu seznamu vlastností, které jsou invariantní nebo se jednoduše transformují pro unitárně ekvivalentní operátory $T, S = UTU^{-1}$, můžeme přidat:

- pokud $T \in \mathcal{L}_{\text{sa}}(\mathcal{H})$, pak $S \in \mathcal{L}_{\text{sa}}(\mathcal{H})$ a jeho spektrální míra splňuje $E_S(\Delta) = UE_T(\Delta)U^{-1}$,
- množiny Φ_E jsou pro E_T a E_S stejné a $\forall f \in \Phi_E: f(S) = Uf(T)U^{-1}$,
- T komutuje s $R \iff S$ komutuje s URU^{-1} ,
- jestliže projektor E redukuje T , pak UEU^{-1} je projektor, který redukuje S .

Soubory komutujících pozorovatelných

Uvažujme samosdružené operátory $A_1, \dots, A_n$ vzájemně komutující podle naší definice z minula – tedy, že jejich spektrální míry jsou tvořeny komutujícími projektory.

Pro množinu výsledků Δ tvaru kartézského součinu, $\Delta = \Delta_1 \times \dots \times \Delta_n$, je pravděpodobnost naměření hodnot A_j v intervalech Δ_j nezávislá na pořadí měření, stejně jako stav po měření – to již dobře víme z kvantové mechaniky. Tato vlastnost se nazývá *kompatibilitou* pozorovatelných veličin. Ukážeme, že kompatibilita je komutací ekvivalentní, pro dva operátory a čistý stav E_φ – zobecnění je přímočaré. Pravděpodobnost naměření hodnoty A_1 v intervalu Δ_1 následovaného naměřením A_2 v intervalu Δ_2 je dána

$$\begin{aligned} w(A_1, \Delta_1; A_2, \Delta_2; \varphi) &= \text{Tr}(E_{A_2}(\Delta_2)W') w(A_1, \Delta_1; E_\varphi) = \text{Tr}(E_{A_2}(\Delta_2) \underbrace{E_{A_1}(\Delta_1)E_\varphi E_{A_1}(\Delta_1)}_{w(A_1, \Delta_1; E_\varphi)W'}) = (E_1\varphi, E_2E_1\varphi) \\ &= (\varphi, E_1E_2E_1\varphi), \end{aligned} \quad (1)$$

kde $E_j = E_{A_j}(\Delta_j)$, a v opačném pořadí $(\varphi, E_2E_1E_2\varphi)$. Evidentně pro komutující operátory se pravé strany rovnají a také vychází stejný stav po měření. Naopak je-li rovnost splněna pro každé φ , pak operátor $C = E_1E_2E_1 - E_2E_1E_2$ je nulový. Ovšem pro $B = E_1E_2 - E_2E_1$ je

$$B^*B = E_2E_1E_2 - E_2E_1E_2E_1 - E_1E_2E_1E_2 + E_1E_2E_1 = (E_1 - E_2)C = 0, \quad (2)$$

což nenechává jinou možnost, než že operátory ze spektrálních měř A_1 a A_2 , a potažmo A_1 a A_2 , komutují.

Pro n -tici vzájemně komutujících operátorů $A_1, \dots, A_n$ můžeme projektory dané těmito mírami sloučit do stejné komutující množiny. Lze však i více – sestavit projektorovou míru E , z níž každý A_j lze psát jako integrál $\int_X f_j dE$ s nějakou funkcí f_j . Pro tuto konstrukci můžeme volit $X = \mathbb{R}^n$ a projektorovou míru E definovat na n -rozměrných intervalech

$$E(J_1 \times \dots \times J_n) = E_{A_1}(J_1)E_{A_2}(J_2) \dots E_{A_n}(J_n). \quad (3)$$

Rozšíření na plnohodnotnou míru pak probíhá stejně jako v případě konstrukce míry z rozkladu jednotky – detaily jsme neuváděli, ale existuje a je jednoznačné. Nazývá se potom *direktním součinem* projektorových měř $E_{A_1}, \dots, E_{A_n}$.

Tato projektorová míra pak – v zobecněném pojetí postulátu, abychom nemuseli hledat nějaký zástupný samosdružený operátor – umožňuje mluvit o současných měřeních operátorů $\{A_j\}_{j=1}^n$. Tato formulace přidává oproti měření v jakémkoli pořadí navíc možnosti binárních měření na podmnožinách $\Delta \in \mathcal{B}^n$, kterých nelze dosáhnout sekvencí měření jednotlivých z nich: příkladem může být pozorování vzdálenosti třírozměrné částice od počátku souřadnic, kde bychom za Δ volili objem mezi dvěma sférami. Značíme pak

$$w(\Delta, \{A_1, \dots, A_n\}; W) := \text{Tr}(E(\Delta)W), \quad W' = \frac{E(\Delta)WE(\Delta)}{\text{Tr}(E(\Delta)W)}. \quad (4)$$

Funkce komutujících samosdružených operátorů

Stejná projektorová míra na $\mathbb{R}^n$ se dá použít k účelu definování funkcí více komutujících samosdružených operátorů: definujeme

$$f(A_1, \dots, A_n) := \int_{\mathbb{R}^n} f(x_1, \dots, x_n) dE(x_1, \dots, x_n) \quad (5)$$

pro každou E -skoro všude definovanou borelovskou funkcí f . (Stačí, aby byla definovaná na kartézském součinu spekter.)

Pro funkce komutujících operátorů platí několik logických závěrů, které jsou analogické dřívějším výsledkům pro podobné konstrukce. Například dosazení A_1, A_2 do funkcí tvaru $f(x, y) = g(x) + h(y)$ či $f(x, y) = g(x)h(y)$ může dát operátor „o uzávěr“ širší než součet, resp. součin operátorů $g(A_1)$ a $h(A_2)$ – pro příklad si představme dosazení $A_2 = A_1$ do funkcí $x - y$ či xy^{-1} . Přibývá logické, ale ne automatické pravidlo, že pro $f(x, y) = g(x)$ vychází $f(A, A')$ stejně jako $g(A)$.

Mezi potenciálně důležité aplikace patří, že $f(Q_1, \dots, Q_n)$ dává operátor násobení funkcí $f(x_1, \dots, x_n)$ a že dosazení složek hybnosti do funkce $\sum_j x_j^2$ dává operátor kinetické energie volné částice, i když k oběma těmto operátorům jsme došli již dříve jinými metodami. Tím spíše ale mohou oba příklady sloužit pro lepší představu, jak obecná funkce více proměnných v operátorech může v praxi vypadat.

Úplné soubory komutujících samosdružených operátorů

Soubor komutujících samosdružených operátorů $\mathcal{S} = (A_1, \dots, A_n)$ nazveme úplným, jestliže libovolná další pozorovatelná, která by s nimi byla kompatibilní, je již rovna nějaké funkci $A_1, \dots, A_n$. Omezujeme se zde na konečné soubory, což z hlediska matematické formulace není univerzální, ale pro praktické účely zcela stačí (n je obvykle 1, 2, 3, 4).

Důležitá formulace ekvivalentní této na **separabilním** $\mathcal{H}$ je taková, že $\mathcal{S}$ je ÚSKO, jestliže operátory, které komutují se všemi prvky $\mathcal{S}$, komutují také mezi sebou. To je algebraicky vyjádřeno podmínkou, že každý prvek *komutantu* množiny $\mathcal{S}$ patří také do komutantu tohoto komutantu, tedy *bikomutantu* $(\mathcal{S}')' = \mathcal{S}''$.

Proč tyto dvě formulace jsou ekvivalentní, je poměrně hluboké tvrzení, ale pro konečné $\mathcal{S}$ lze shrnout následovně:

1. Jestliže $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ komutuje s operátorem A , pak komutuje také s libovolnou funkcí operátoru A . To znamená, že každé $f(A) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ patří do *komutantu komutantu* jednoprvkové množiny $\{A\}$. (Z technických důvodů do pojmu „komutant“ zahrnujeme jen omezené operátory.)
2. Na **separabilním** $\mathcal{H}$ každý samosdružený operátor, který komutuje s každým takovým B , lze napsat jako nějaká funkce operátoru A . Toto velmi netriviální tvrzení (10.5.9) je historicky výsledkem prací mnoha průkopníků funkcionální analýzy a není teď v našich možnostech zkoumat, proč platí.
3. Pro množinu více než jednoho operátoru roli komutace s A nahrazuje komutace s projektorovou mírou získanou direktním součinem spektrálních měr $A_1, \dots, A_n$, rozšířit potom předchozí výsledek i na tento případ již není náročné.

Co si zapamatujeme, je, že existuje dobrý důvod v otázkách ÚSKO vyžadovat separabilitu.

Setkáme se ještě s třetí ekvivalentní formulací ÚSKO. (Všechny tři shrnuje v knize věta 14.2.1, ale její důkaz se opírá o obsah několika předchozích kapitol.) Soubor $\mathcal{S}$ je úplný právě tehdy, když existuje tzv. cyklický vektor $\varphi \in \mathcal{H}$ s vlastností, že množina $\{A\varphi \mid A \in \mathcal{S}''\}$ je v $\mathcal{H}$ totální. Co si pod touto abstraktní formulací představit?

Podle předchozího je každý operátor $A \in \mathcal{S}''$ vyjádřitelný jako funkce operátorů $A_1, \dots, A_n$. Protože z algebraických předpokladů je omezený, je možné jej vyjádřit jako integrál nějaké $f \in L^\infty(\mathbb{R}^n, dE)$ přes společnou projektorovou míru E . Jestliže výrazy

$$\left\{ \int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) \varphi \mid f \in L^\infty(\mathbb{R}^n, dE) \right\} \quad (6)$$

jsou husté v $\mathcal{H}$ a lze se tedy jimi blížit k jakémukoli $\psi \in \mathcal{H}$, budeme chtít ukázat, že existuje funkce f_ψ , ne již nutně omezená, tedy jen $f_\psi \in \Phi_E$, že $\mathcal{I}_E(f_\psi)\varphi = \psi$.

Lemma 1. Je-li φ cyklický vektor souboru $\mathcal{S}$, pak pro každou E -nenulovou množinu M je $\mu_\varphi(M) \neq 0$.

Důkaz. Uvažujme $M \in \mathcal{B}^n$ takovou, že $E(M) \neq 0$, ale $E(M)\varphi = 0$. Pro libovolnou funkci $f \in L^\infty(\mathbb{R}^n, dE)$ a každé $\chi \in \mathcal{H}$ je

$$\left(E(M)\chi, \int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) \varphi \right) = \left(\chi, E(M) \int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) \varphi \right) = \left(\chi, \int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) E(M)\varphi \right) = 0, \quad (7)$$

takže $\text{Ran } E(M)$ je ortogonální na $A\varphi$ pro každé $A \in \mathcal{S}''$, což je spor s totalitou. $\square$

Lemma 2. Každá funkce $f \in L^2(\mathbb{R}^n, d\mu_\varphi)$ splňuje $f \in \Phi_E$, vektor φ patří do $D(f(A_1, \dots, A_n))$ a platí

$$\|\mathcal{I}_E(f)\varphi\|^2 = \|f\|_{\mu_\varphi}^2, \quad (8)$$

takže zobrazení $V: L^2(\mathbb{R}^n, d\mu_\varphi) \rightarrow \mathcal{H}: f \mapsto \mathcal{J}_E(f)\varphi$ je izometrie.

Důkaz. Míry E a μ_φ mají jistě stejné σ -algebry. Pokud je f μ_φ -s.v. definovaná, je také E -s.v. definovaná podle lematu 1. To jsou předpoklady pro $f \in \Phi_E$. Pro $f \in L^2(\mathbb{R}^n, \mu_\varphi)$ dále

$$\left\| \int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) \varphi \right\|^2 = \left(\int_{\mathbb{R}^n} f(x) dE(x) \varphi, \int_{\mathbb{R}^n} f dE \varphi \right) = \left(\varphi, \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^2 dE(x) \varphi \right) = \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^2 d\mu_\varphi(x) < \infty, \quad (9)$$

což odpovídá na oba zbývající body, protože $\int |f|^2 d\mu_\varphi < \infty$ je přímo předpisem definičního oboru $f(A_1, \dots, A_n)$.

Po tomto důkazu si již stačí uvědomit, že z předpokladu ÚSKO do obrazu izometrie V patří množina totální v $\mathcal{H}$ (obraz množiny $L^\infty(\mathbb{R}^n, d\mu_\varphi)$, která díky konečnosti míry je $\subset L^2$), takže koncovým prostorem je jistě celé $\mathcal{H}$.

Definici ÚSKO mohou dokonce splňovat i některé *jednočlenné* soubory $\mathcal{S} = \{A_1\}$. Podmínka, že měření A nebo jeho funkcí dokáže v principu rozlišit mezi libovolnou dvojicí lineárně nezávislých vektorů, je zobecněním koncepcí čistě bodového a *nedegenerovaného* spektra. Říkáme, že takový operátor má **jednoduché spektrum**.

Poslední podmínka pro ně znamená, že existuje vektor $\varphi \in \mathcal{H}$ takový, že množina $\{E_{A_1}(M)\varphi \mid M \in \mathcal{B}^1\}$ je totální v $\mathcal{H}$ (zde se z historických důvodů nenazývá cyklický, ale generující vektor). Náš výsledek říká, že musí mít nenulovou projekci do všech $\text{Ran } E_{A_1}(M)$ a poté, že z něj libovolného $\psi \in \mathcal{H}$ můžeme dosáhnout jako $f_\psi(A_1)\varphi$. Ukážeme, že tuto vlastnost má operátor polohy na $\mathbb{R}$: za φ může sloužit libovolná $L^2(\mathbb{R})$ funkce, která je všude nenulová, například $\varphi(x) = 1/(x^2 + 1)$. Protože funkce operátoru Q jsou operátory násobení funkcí $f(Q) = T_f$, stačí pro obecné $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ volit $f_\psi(x) = \psi(x)/\varphi(x)$.

Jestliže podmínku $\{E_{A_1}(M)\varphi \mid M \in \mathcal{B}^1\}$ totální v $\mathcal{H}$ přijmeme jako definici jednoduchého spektra, pak takové operátory existují **pouze** na separabilních prostorech, protože tato množina je spočetně generovaná intervaly s krajními body v $\mathbb{Q}$.

Pro kvantovou fyziku je nakonec již jen důležité, jak pro daný stavový prostor získávat ÚSKO z jeho znalosti na nějakých jednodušších prostorech. K tomu slouží následující užitečná pravidla:

- Q_μ je operátor s jednoduchým spektrem na libovolném prostoru $(X, d\mu)$ se σ -konečnou mírou (automaticky zahrnuje polohu na intervalech v $\mathbb{R}$ a oblastech v $\mathbb{R}^n$),
- Jedná se opět o unitární ekvivalent: například operátor hybnosti na $\mathbb{R}$ má také jednoduché spektrum.
- Každý operátor s nedegenerovaným čistě bodovým spektrem na separabilním $\mathcal{H}$, například Hamiltonián jednorozměrného lineárního harmonického oscilátoru (LHO), má jednoduché spektrum a může tak sám sloužit za ÚSKO.
- pokud $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ jsou ÚSKO na $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$, pak množina

$$\{A \otimes I \mid A \in \mathcal{S}_1\} \cup \{I \otimes A' \mid A' \in \mathcal{S}_2\} \quad (10)$$

je ÚSKO na $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ (14.2.5–9, důkaz opět zabíhá do teorie operátorových algeber).

Pomocí nich oprávníme zcela všechny případy ÚSKO, se kterými jsme se setkali v kurzu O2KVAN, O2KVANM2.

ÚSKO a reprezentace stavu

Zakončíme krátkou poznámkou o reprezentaci vlnové funkce. V kvantové mechanice jste mluvili o polohové, hybnostní, energetické (LHO) reprezentaci a nemusí být zřejmé, proč pro prvky stejného stavového prostoru $L^2(\mathbb{R})$ v některých potřebujeme funkci (tj. „spojité“ mnoho hodnot) a v jiných nám stačí posloupnost („spočetné“ mnoho).

Každá z takových reprezentací se opírá o některý ÚSKO, konkrétně zmíněné příklady o jednorázových souborech, tedy každý o nějakou pozorovatelnou A s jednoduchým spektrem. Obecný vektor potom můžeme hledat v krocích, že z její projektorové míry „poskládáme“ operátor $\int_{\mathbb{R}} f(x) dE_A(x)$ a aplikujeme na generující vektor φ .

Funkce f jsme viděli, že je třeba brát z prostoru $L^2(\mathbb{R}, d\mu_\varphi)$, přičemž nosičem míry μ_φ je spektrum operátoru A (je nosičem E_A , ale lemma 1 dává implikaci $\mu_\varphi(M) = 0 \Rightarrow E_A(M) = 0$ a opačná je triviální), takže závisí jen na hodnotách f na $\sigma(A)$. Právě jsme ovšem měli možnost vidět, že i operátory s jednoduchým spektrem mohou spektrum pořád mít stejně dobře diskrétní i spojitě.

Pro operátor Q je

$$\mu_\varphi(M) = (\varphi, E_Q(M)\varphi) = (\varphi(x), \chi_M(x)\varphi(x)), \quad d\mu_\varphi(x) = |\varphi(x)|^2 dx \quad (11)$$

a podmínka $f \in L^2(\mathbb{R}, d\mu_\varphi)$ tedy je ekvivalentní tomu, že $\tilde{f}(x) := f(x)\varphi(x) \in L^2(\mathbb{R})$.

Pro LHO je míra soustředěna na spočetném spektru a proto podmínka L^2 -integrability funkce f znamená

$$\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 d\mu_\varphi(x) = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} |f(\lambda)|^2 (\varphi, E_A(\{\lambda\})\varphi) = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} |f(\lambda)|^2 \|E_\lambda \varphi\|^2 \quad (12)$$

a převádí se na ℓ^2 -podmínku jisté posloupnosti.

Po vymezení se na L^2 -integrabilní funkce a ℓ^2 -integrabilní posloupnosti je zřejmé, že oba druhy objektů patří do vzájemně izometrických prostorů, a tedy je mezi nimi bijektivní korespondence.

Hodnoty pozorovatelných veličin

Z vysloveného postulátu o měření lze odvodit několik dalších skutečností dobře známých z kvantové mechaniky, občas ovšem s upozorněními na předpoklady.

Střední hodnota

Nechť $A \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$. Pro každý stav $\psi \in \mathcal{H}$ a každou množinu $M \in \mathcal{B}^1$ lze mluvit o pravděpodobnosti naměření hodnoty A v M , ale ne pro každý stav toto pravděpodobnostní rozdělení toto pravděpodobnostní rozdělení má střední hodnotu dobře definovanou (představme si například stav

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-1} \varphi_n \quad (1)$$

pro LHO s energetickou bází $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$: norma ψ je konečná, ale pokus o určení střední hodnoty energie vede na řadu $\sum_{n \in \mathbb{N}} n |(\varphi_n, \psi)|^2 = \sum_{n \in \mathbb{N}} 1/n$, která diverguje).

Věnujme se nejprve střední hodnotě A v čistém stavu E_ψ . Nechť a značí odpovídající náhodnou veličinu. Pro $\Delta \in \mathcal{B}^1$ je pravděpodobnost

$$P(a \in \Delta) = \text{Tr}(E_A(\Delta)E_\psi) = (\psi, E_A(\Delta)\psi), \quad (2)$$

což ale není nic jiného, než $\mu_\psi^{(A)}(\Delta)$. Číselná míra $\mu_\psi^{(A)}$ získaná ze spektrální míry A pro jednotkový vektor ψ má tedy přímočarý význam pravděpodobnostní míry výsledků měření pozorovatelné A ve stavu E_ψ . Střední hodnotu potom můžeme počítat podle vzorce

$$\langle A \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_\psi^{(A)}(\lambda) = \left(\psi, \int_{\mathbb{R}} \lambda dE_A(\lambda) \psi \right) = (\psi, A\psi) \quad (3)$$

a je evidentní, že pro $\psi \in D(A)$ se jedná o konečné číslo a pro $\psi \notin D(A)$ není výraz definován.

Pro smíšený stav roli (2) přejímá výraz $\mu_W^{(A)}(\Delta) = \text{Tr}(E_A(\Delta)W)$ a střední hodnotu pak můžeme opět psát jako integrál λ s touto číselnou mírou

$$\langle A \rangle_W = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_W^{(A)}(\lambda), \quad (4)$$

který může a nemusí konvergovat. Můžeme se ptát, za jakých předpokladů lze integrál a λ „vnořit“ dovnitř stopy a pravou stranu hledat jako $\text{Tr}(AW)$. Evidentně samotná smysluplnost takového zápisu je podmíněna tím, aby AW byl jaderný operátor. Toto je zaručeno, pokud A je omezený, ale i pro neomezený operátor se může stát, že jeho složení s jaderným operátorem padne do $\mathcal{J}_1(\mathcal{H})$.

Pokud tento předpoklad ustanovíme, vyplývá z něj

- A je definovaný na celém $\text{Ran } W$,
- pro každý rozklad W do čistých stavů jako $W = \sum_n \mu_n E_{\varphi_n}$ tedy všechna φ_n patří do $D(A)$,
- hodnoty $\langle A \rangle_{\varphi_n} = (\varphi_n, A\varphi_n)$ jsou tedy konečné a $\text{Tr}(AW)$ je jejich váženým průměrem s vahami μ_n .

Podmínka $AW \in \mathcal{J}_1(\mathcal{H})$ je tedy postačující pro to, aby výraz (4) byl dobře definovaný a byl roven stopě AW . Není však nutná – lze najít kombinace A, W , pro které (4) konverguje, ačkoli AW jaderný není.

Poznámka: Pro neomezený A nezaručuje $AW \in \mathcal{J}_1(\mathcal{H})$, že by také WA byl jaderný. Dokonce se ani nejedná o spojitý operátor, protože jeho definiční obor je $D(A) \neq \mathcal{H}$. Díky samosdruženosti A a W a omezenosti W ale platí $(WA)^* = A^*W^* = AW$ a tedy do $\mathcal{J}_1(\mathcal{H})$ patří *uzávěr* operátoru WA , protože

$$\overline{WA} = (WA)^{**} = (AW)^* \quad (5)$$

a protože prostor $\mathcal{J}_1$ je vůči $*$ uzavřený. Stopa tohoto operátoru se se stopou AW shoduje.

Neurčitost měření

Střední kvadratickou odchylku pozorovatelné veličiny A definujeme tradičně,

$$(\Delta A)_W := \sqrt{\langle A^2 \rangle_W - \langle A \rangle_W^2}, \quad (6)$$

její konečnost zaručí postačující podmínka $AW, A^2W \in \mathcal{F}_1(\mathcal{H})$. Výraz na pravé straně lze psát několika ekvivalentními způsoby, z nichž vyzdvihneme

$$(\Delta A)_W^2 = \int_{\mathbb{R}} (\lambda - \langle A \rangle_W)^2 d\mu_W^{(A)}(\lambda), \quad (7)$$

protože nevyžaduje konstruovat vedle spektrální míry A ještě E_{A^2} .

Jestliže pro dvě pozorovatelné A_1, A_2 doplníme k těmto předpokladům ještě $A_1A_2W, A_2A_1W \in \mathcal{F}_1(\mathcal{H})$, lze psát **relaci neurčitosti** ve tvaru

$$(\Delta A_1)_W(\Delta A_2)_W \geq \frac{1}{2} |\text{Tr}((A_1A_2 - A_2A_1)W)| \quad (8)$$

a dokázat naprosto identicky jako v kvantové mechanice.

Poznámka: Operátor $A_1A_2 - A_2A_1$, vystupující v (8) na místě pozorovatelné, nemá vlastnosti pozorovatelné veličiny. Nemusí vůbec být *hustě definovaný*: pro $(A_1A_2 - A_2A_1)W \in \mathcal{F}_1$ stačí, aby jeho definiční obor pokrýval celé $\text{Ran } W$ (které například má netriviální kodimenzi, pokud $\sigma_p(W) \ni 0$). Pokud je, dosáhneme sice *symetrického* operátoru, doplníme-li prefaktor i , ale ne nutně samosdruženého. Příklad 16/2 v B–E–H ukazuje jednoduchou volbu A_1, A_2 , pro kterou $i(A_1A_2 - A_2A_1)$ má nestejně indexy defektu a neumožňuje tak ani samosdružené rozšíření.

Příklad: Pro komutující operátory A_1, A_2 je $i(A_1A_2 - A_2A_1)$ zúžením nulového operátoru na $D(A_1A_2) \cap D(A_2A_1)$. Pro operátory Q a P na $\mathbb{R}$ je $i(PQ - QP)$ zúžením jednotkového operátoru na $D(PQ) \cap D(QP)$ a v případě, že jsou splněny předpoklady $PW, QW, P^2W, Q^2W, PQW, QPW \in \mathcal{F}_1(L^2(\mathbb{R}))$ (z nichž některé jsou závislé), pak platí $(\Delta P)_W(\Delta Q)_W \geq 1/2$. Snadno ale najdeme příklady, kdy splněny nejsou – jedná se pak zpravidla o situace, kdy jedna nebo obě odchylky nejsou dobře definované.

Ke znalostem z kvantové mechaniky doplníme jen jednu zajímavou poučku, která by se metodami z fyziky dokazovala dosti nesnadno, ale s projektorovou mírou je přímočará.

Věta (přesnost dosažitelná měřením.). Pro každé $\lambda \in \sigma(A)$ a každé $\varepsilon > 0$ existuje čistý stav E_ψ takový, že

$$|\langle A \rangle_\psi - \lambda| \leq \varepsilon, \quad (\Delta A)_\psi \leq 2\varepsilon. \quad (9)$$

Důkaz. Nutnou a postačující podmínkou pro $\lambda \in \sigma(A)$ je, že $E_A(U_\varepsilon(\lambda))$ je nenulový projektor pro každé $\varepsilon > 0$. Pro dané ε tedy označíme tento projektor E a zvolíme libovolný jednotkový vektor $\psi \in \text{Ran } E$. Protože $E\psi = \psi$, platí

$$\mu_\psi^{(A)}(\Delta) = (\psi, E_A(\Delta)\psi) = (\psi, E_A(\Delta)E_A(U_\varepsilon(\lambda))\psi) = (\psi, E_A(\Delta \cap U_\varepsilon(\lambda))\psi) = \mu_\psi^{(A)}(\Delta \cap U_\varepsilon(\lambda)) \quad (10)$$

a tedy míra $\mu_\psi^{(A)}$ je soustředěna na $U_\varepsilon(\lambda)$. Pro střední hodnotu A potom

$$\langle A \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} x d\mu_\psi^{(A)}(x) = \int_{U_\varepsilon(\lambda)} x d\mu_\psi^{(A)}(x), \quad (11)$$

ale funkce, kterou středujeme, je po posledním kroku omezená na interval $(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ a střední hodnota tedy rovněž tak. Pro rozptyl veličiny A využijeme rovnici (7),

$$(\Delta A)_W^2 = \dots = \int_{\lambda - \varepsilon}^{\lambda + \varepsilon} (x - \langle A \rangle_\psi)^2 d\mu_\psi^{(A)}(x) \quad (12)$$

a skutečnost, že pro $x \in (\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)$ je $0 \leq (x - \langle A \rangle_\psi)^2 \leq (2\varepsilon)^2$. $\square$

Kanonické komutační relace

Komutační relace mezi polohou a hybností se nazývá kanonická. Viděli jsme ale již v příkladu výše, že **není** oprávněné psát

$$QP - PQ = iI, \quad Q_j P_k - P_k Q_j = i\delta_{jk}I, \quad (13)$$

operátor na levé straně, ač hustě definovaný (do jeho definičního oboru spadá Schwartzův prostor), je pouze zúžením jednotkového operátoru. Může být tedy žádoucí vyjádřit skutečnost, že „komutují na jednotku“, způsobem, který na omezení definičních oborů nenarazí.

Viděli jsme na kapitole o komutaci samosdružených operátorů, že otázku komutativity A_1, A_2 lze převést několika způsoby na otázku komutativity omezených operátorů. Počítat funkcionální realizaci rezolventy, arkustangenty nebo Cayleyho obrazu operátoru hybnosti není žádná příjemná vyhlídka, ale připomeňme poslední zmíněnou ekvivalentní formulaci:

$$A_1, A_2 \text{ komutují} \iff \text{komutují } e^{itA_1}, e^{isA_2} \text{ pro všechna } s, t \in \mathbb{R}. \quad (14)$$

Porovnání součinů takovýchto exponenciál v obou pořadích nám tedy o dvou operátorech může říci, „jak moc“ nekomutují, a tak nahradit roli rozdílu součinu operátorů. Exponenciálu itP jsme viděli spočítanou na nedávném cvičení a exponenciála isQ je jednoduchý operátor násobení funkcí, použít tedy tyto dva je snadné. Rozepsáním působení obou unitárních operátorů na vektor a porovnáním jejich složení v obou pořadích dostáváme **Weylovy relace**. Pro $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$:

$$\exp(itP)\exp(isQ) = e^{ist}\exp(isQ)\exp(itP). \quad (15)$$

V případě prostoru $L^2(\mathbb{R}^n)$ musíme exponenciály operátoru nahradit

$$U(t) = \exp\left(i \sum_{k=1}^n t_k P_k\right), \quad V(s) = \exp\left(i \sum_{k=1}^n s_k Q_k\right), \quad (16)$$

na něž lze pohlížet jako na funkce komutujících operátorů P_k , resp. Q_k , a Weylovy relace v tomto případě znějí

$$U(t)V(s) = e^{it \cdot s} V(s)U(t). \quad (17)$$

Jednou z výhod tohoto postupu je, že zachytí některé patologické situace. Uvažujme operátory Q a P na prostoru $\mathcal{H} = L^2((0, 2\pi))$, z toho P s periodickou okrajovou podmínkou. Operátor $i(PQ - QP)$ je definován na prostoru

$$\begin{aligned} D(PQ - QP) &= \{\psi \in D(Q) \mid Q\psi \in D(P)\} \cap \{\psi \in D(P) \mid P\psi \in D(Q)\} \\ &= \{\psi \in \mathcal{H} \mid \psi, x\psi \text{ absolutně spojitě}, \psi' \in \mathcal{H}, (x\psi)' \in \mathcal{H}, \psi(0) = \psi(2\pi), 0\psi(0) = 2\pi\psi(2\pi)\} \\ &= \{\psi \in H^1((0, 2\pi)) \mid x\psi' \in \mathcal{H}, \psi(0) = \psi(2\pi) = 0\}. \end{aligned} \quad (18)$$

Na tomto oboru platí

$$\forall \psi \in D(PQ - QP): QP\psi - PQ\psi = i\psi \quad (19)$$

a dokonce se jedná o hustý podprostor $\mathcal{H}$, přeci však operátory polohy a hybnosti na kružnici Heisenbergovu relaci nespĺňují. Konkrétně operátor

$$P: \{\psi \in H^1((0, 2\pi)) \mid \psi(0) = \psi(2\pi)\} \rightarrow \mathcal{H}: \psi(x) \mapsto -i\psi'(x) \quad (20)$$

má čistě bodové spektrum a pro libovolný jeho vlastní vektor φ je $(\Delta P)_\varphi = 0$. Operátor Q na tomto $\mathcal{H}$ je omezený a tedy $(\Delta Q)_\varphi < \infty$. Levá strana relace neurčitosti je tedy pro tento stav nula a porušuje nerovnost $\geq \|\varphi\|/2$. Problém nastává v tom, že všechny tyto protipříklady spadají přesně mimo $D(PQ - QP)$.

Zajímavá je otázka, jestli nějaká jiná dvojice (či $2n$ -tice) operátorů může splňovat (15), resp. (16), které můžeme považovat za cestu od Hamiltonovské mechaniky ke kanonické kvantizaci (opravující nedostatky intuitivnější (13)). Ukazuje se, že ano, ale volnost není tolik velká. Věta M. Stone a J. von Neumanna z roku 1931 ukazuje, že každá taková $2n$ -tice operátorů je buď přímo unitárně ekvivalentní $(P_k)_{k=1}^n, (Q_k)_{k=1}^n$, nebo lze redukovat systémem projektorů (E_α) takovým způsobem, že každý z podprostorů $\mathcal{H}_\alpha$ je izomorfní $L^2(\mathbb{R}^n)$ a části operátorů v $\mathcal{H}_\alpha$ jsou již unitárně ekvivalentní běžným složkám polohy a hybnosti, přes izomorfismy závislé na α .

Jinými slovy, pokud k Weylovým relacím přidáme požadavek ireducibility, pak až na izomorfismus jsou stavový prostor $L^2(\mathbb{R}^n)$ a operátory P_k, Q_k na něm, předepsané našim známým způsobem, jediným řešením. Nazývají se pak tzv. Schrödingerovou reprezentací kanonických komutačních relací.

Cesty ke spektru operátorů

Spektrum operátoru je podstatné tím, že určuje možné hodnoty pozorovatelných. Pro jiné účely potřebujeme i patřičnou projektorovou míru, ale vždy je dobré mít první představu o tom, jak spektrum vypadá a jaký má rozklad na bodovou a spojitou část. Předvedeme si dnes některé metody, jak k $\sigma(A)$ dojít, pokud operátor A byl vytvořen z nějakých jednodušších operátorů, jejichž spektra známe.

Funkce operátoru

O spektru $f(A)$, kde $f \in \Phi_{E_A}$, máme již jednu informaci: jedná se o esenciální spektrum funkce f při míře E_A . To je sice univerzálně pravda, ale není to obecně příliš praktický návod. Ukážeme si tvrzení, které nám o spektru řekne více.

Věta (10.5.4). Nechť $A \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$, nechť $f \in \Phi_{E_A}$.

1. Je-li $\lambda \in \sigma_p(A)$, pak $f(\lambda) \in \sigma_p(f(A))$ a vlastní vektory A příslušející λ jsou také vlastními vektory $f(A)$ příslušejícími $f(\lambda)$.
2. Je-li funkce f na spektru A spojitá, pak $\sigma(f(A)) = \overline{f(\sigma(A))}$.

Důkaz. Nechť ψ je vlastní vektor A příslušející vlastnímu číslu λ . Využijeme toho, že $E_A(\{\lambda\})$ je projektor na vlastní podprostor, a tedy $E_A(\{\lambda\})\psi = \psi$. Odsud plyne, že $\mu_\psi^{(A)}$ je soustředěna na množině $\{\lambda\}$: platí totiž

$$\mu_\psi^{(A)}(\{\lambda\}) = (\psi, E_A(\{\lambda\})\psi) = (\psi, \psi) = \mu_\psi^{(A)}(\mathbb{R}) \quad (1)$$

a pozitivita míry $\mu_\psi^{(A)}$ spolu s konečností nenechává jinou možnost, než že všechny množiny disjunktní s $\{\lambda\}$ zobrazuje na nulu.

Nechť nyní $T = f(A) - f(\lambda)I = \mathcal{J}_{E_A}(f(x) - f(\lambda))$. Z pravidel funkcionálního počtu využijeme rovnici

$$\|\mathcal{J}_{E_A}(f(x) - f(\lambda))\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |f(x) - f(\lambda)|^2 d\mu_\psi^{(A)}(x), \quad (2)$$

ale díky objevené vlastnosti míry $\mu_\psi^{(A)}$ stačí integrovat na množině $\{\lambda\}$, a na té je integrand nulový. Proto

$$\|f(A)\psi - f(\lambda)\psi\|^2 = 0, \quad f(A)\psi = f(\lambda)\psi. \quad (3)$$

Pro druhou část uvažujeme funkci, která je spojitá. Poznamenejme, že spojitost na spektru je ve skutečnosti postačující podmínkou pro $f \in \Phi_{E_A}$, protože implikuje obě vlastnosti definující tuto větší množinu. Můžeme psát: $C(\sigma(A)) \subset \Phi_{E_A}$.

Vezměme $\lambda \in \sigma(A)$ a $\mu = f(\lambda)$. Napíšeme podmínku spojitosti f ve tvaru

$$\forall \varepsilon > 0: \exists \delta > 0: f^{-1}(U_\varepsilon(\mu)) \supset U_\delta(\lambda) \quad (4)$$

a na obě strany $\supset$ použijeme spektrální míru E_A :

$$\forall \varepsilon > 0: \exists \delta > 0: E_A(f^{-1}(U_\varepsilon(\mu))) \geq E_A(U_\delta(\lambda)) \quad (5)$$

Nutnou a postačující podmínkou $\lambda \in \sigma(A)$ je ale

$$\forall \delta > 0: E_A(U_\delta(\lambda)) \neq 0, \quad (6)$$

takže i $E_A(f^{-1}(U_\varepsilon(\mu))) \neq 0$ pro všechna $\varepsilon > 0$, což je definičním vztahem pro $\mu = f(\lambda) \in R_{ess}^{(E_A)}(f) = \sigma(f(A))$.

Pro opačnou implikaci uvažujeme μ mimo *uzávěr* množiny $f(\sigma(A))$, takže μ leží mimo $f(\sigma(A))$ včetně nějakého ε -okolí:

$$\exists \varepsilon > 0 : U_\varepsilon(\mu) \cap f(\sigma(A)) = \emptyset \quad (7)$$

Na obě strany použijeme postupně f^{-1} a E_A a dozvídáme se

$$\exists \varepsilon > 0 : E_A(f^{-1}(U_\varepsilon(\mu)) \cap \sigma(A)) = 0. \quad (8)$$

Protože $\sigma(A)$ je nosičem E_A , $E_A(M \cap \sigma(A))$ a $E_A(M)$ jsou stejné. Tak se dozvídáme, že množina $f^{-1}(U_\varepsilon(\mu))$ je E_A -nulová pro nějaké $\varepsilon > 0$, což implikuje $f(\lambda) \notin R_{\text{ess}}^{(E_A)}(f)$.

Z předchozích dvou částí důkazu se dozvídáme:

$$\begin{aligned} f(\sigma(A)) &\subset \sigma(f(A)), \\ \mathbb{C} \setminus \overline{f(\sigma(A))} &\subset \mathbb{C} \setminus \sigma(f(A)), \end{aligned} \quad (9)$$

ale když nad první inkuzí uděláme *uzávěr*, což pravou stranu nezmění, dostáváme nutnou a postačující podmínku rovnosti mezi množinami $\sigma(f(A))$ a $\overline{f(\sigma(A))}$. $\square$

Poznámky: Opatrnost, s jakou je věta formulována, je opodstatněná:

- V bodovém spektru $f(A)$ se mohou objevit i hodnoty, které nejsou žádným obrazem vlastních hodnot A . Například Q má bodové spektrum prázdné, ale do $\sigma_p(T_f) = \sigma_p(f(Q))$ patří každá hodnota, které $f(x)$ nabývá na nějakém nenulovém intervalu.
- Uzávěr je důležitý, protože obraz uzavřené množiny při spojitěm zobrazení nemusí být uzavřený. V některých případech to však zajištěno je, například pokud $\sigma(A)$ je omezené (tedy pro A hermitovský).

Druhá část věty má naprosto přímočaré zobecnění i na funkce n komutujících operátorů A_1 až A_n (10.7.6): je-li $f \in C(\sigma(A_1) \times \dots \times \sigma(A_n))$, pak spektrum operátoru $f(A_1, \dots, A_n)$ je rovno *uzávěru* množiny $f(\sigma(A_1) \times \dots \times \sigma(A_n))$. O bodovém spektru ovšem mnoho říct nelze.

Příklady:

- Spektrum hybnosti na $L^2(\mathbb{R})$ je $\sigma(P) = \mathbb{R}$, totéž platí pro operátory složek hybnosti na $L^2(\mathbb{R}^n)$. Protože obrazem množiny $\mathbb{R}$ při $x \mapsto x^2$, stejně jako množiny $\mathbb{R}^n$ při $x \mapsto x_1^2 + \dots + x_n^2$, je $\langle 0, +\infty \rangle$, je tato množina spektrem operátoru volné energie v obou situacích.
- Spektrem operátoru $H = P^2 + Q^2$ na $L^2(\mathbb{R})$ je množina lichých přirozených čísel. Pro $\mu \in \rho(H)$ dosazením H do $f(\lambda) = 1/(\lambda - \mu)$ dostáváme rezolventu $R_H(\mu)$. Z věty vyplývá, že $1/(2n + 1 - \mu)$ jsou vlastní čísla R_H s vlastními vektory stejnými, jako má H , jedná se tedy o operátor s čistě bodovým, nedegenerovaným spektrem. Kromě těchto hodnot je ve spektru ještě jejich hromadný bod, 0, který není obrazem žádného λ – musí tedy být prvkem $\sigma_c(R_H(\mu))$. Tyto spektrální vlastnosti odpovídají kompaktnímu operátoru; lze se snadno přesvědčit, že skutečně $R_H(\mu) \in \mathcal{J}_\infty(\mathcal{H})$ pro každé $\mu \in \rho(H)$.

Samosdružená rozšíření

Mnoho se o spektru můžeme dozvědět i v rámci teorie samosdružených rozšíření symetrických operátorů.

Připomeňme, že pro uzavřený operátor T definujeme oblast regularity jako množinu hodnot

$$\pi(T) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \exists c > 0 : \forall \psi \in D(T) : \|T\psi - \lambda\psi\| \geq c\|\psi\|\}. \quad (10)$$

Zabývejme se jejím doplněm. Do něj patří čísla, pro která $\|T\psi - \lambda\psi\|$ pro jednotková ψ nemá spodní hranici jinou než nula. To může mít pouze dvě příčiny,

1. existuje nenulové $\psi \in D(T)$ takové, že $T\psi = \lambda\psi$, tedy $\lambda \in \sigma_p(T)$,
2. $\lambda \notin \sigma_p(T)$, ale existuje posloupnost jednotkových $\psi_n \in D(T)$ takových, že $(T - \lambda I)\psi_n$ jsou vektory s normou limitně klesající k nule.

Ve druhém případě můžeme psát: $(T - \lambda I)^{-1}$ je na svém definičním oboru, kterým je $\text{Ran}(T - \lambda I)$, neomezený operátor. Snadno nahlédneme, že se jedná o nutnou i postačující podmínku.

V prvním případě tedy má rovnice $T\psi = \lambda\psi$ nenulové řešení, ve druhém se této vlastnosti lze alespoň v jistém smyslu blížit. Uzavřenou množinu $\mathbb{C} \setminus \pi(T)$ z tohoto důvodu občas nazýváme *přibližně bodovým spektrem* $\sigma_{\text{ap}}(T)$. Je evidentní, že pokud dva uzavřené operátory T, S splňují $T \subset S$, pak $\sigma_{\text{ap}}(T) \subset \sigma_{\text{ap}}(S)$: vlastní vektor či posloupnost vektorů z $D(T)$ zaručující $\lambda \in \sigma_{\text{ap}}(T)$ můžeme pro operátor S jednoduše použít stejnou.

Pro normální operátor T je $\pi(T) = \rho(T)$ a rovnají se tedy i jejich doplňky. **Celé spektrum každého normálního operátoru je tedy přibližně bodové.** Zejména si to budeme pamatovat pro samosdružené operátory.

Uvažujme nyní symetrický operátor A s indexy defektu (n, n) a jeho uzavřené symetrické rozšíření A' . Podle druhé von Neumannovy formule je $D(A')$ roven $D(A)$ zvětšenému o nějaký podprostor G , $\dim G = m \leq n$. Podle předchozího odstavce se přibližně bodové spektrum A může při rozšíření na A' pouze zvětšit.

Může se stát, že vektory přidané do definičního oboru zahrnují nějaké vlastní vektory A' , ovšem nejvýše m takových lineárně nezávislých. Bodové spektrum se tedy může rozšířit o vlastní hodnoty s násobností nejvýše m , nebo se pro existující vlastní podprostory může navýšit dimenze jejich vlastních podprostorů.

Může také přibýt bod $\lambda \in \mathbb{C}$, které splňuje druhou z možností výše, tedy pro který je $A' - \lambda I$ invertibilní a $(A' - \lambda I)^{-1}$ neomezený, i když $(A - \lambda I)^{-1}$ nebyl. (Že nemusíme ověřovat invertibilitu $A - \lambda I$, je jednoduché cvičení pro posluchače.) Bod $\lambda \in \pi(A)$ tedy přechází do $\sigma_{\text{ap}}(A')$. Ovšem o oblasti regularity víme, že $A - \lambda I$ má uzavřený obor hodnot. Zvětšením oboru $D(A)$ o podprostor G dojde ke zvětšení

$$\text{Ran}(A' - \lambda I) = \text{Ran}(A - \lambda I) + (A - \lambda I)G. \quad (11)$$

Touto operací nemůže z uzavřeného podprostoru vzniknout neuzavřený, pokud prostor G je konečnědimenzionální, tedy zejména, pokud indexy defektu jsou **konečné**. V takovém případě je operátor $(A' - \lambda I)^{-1}$ uzavřeným operátorem definovaným na uzavřeném podprostoru, a tedy omezený, a možnost, kterou jsme zkoumali, je vyloučena.

Shrňme tato pozorování:

- $\sigma_{\text{ap}}(A') \supset \sigma_{\text{ap}}(A)$,
- $\sigma_{\text{p}}(A') \supset \sigma_{\text{p}}(A)$, $\dim \text{Ker}(A - \lambda I) \leq \dim \text{Ker}(A' - \lambda I) \leq \dim \text{Ker}(A - \lambda I) + m$,
- pro konečné $\dim G$ platí $\sigma_{\text{ap}}(A') \setminus \sigma_{\text{p}}(A') \subset \sigma_{\text{ap}}(A) \setminus \sigma_{\text{p}}(A)$ (množina se nemůže zvětšit, zmenšit ale ano, pokud z některého jejího bodu vznikla rozšířením vlastní hodnota).

Pro **konečné** indexy defektu tedy k přibližně bodovému spektru mohou v rámci symetrického, potažmo samosdruženého rozšíření přibýt pouze vlastní hodnoty konečné násobnosti. Pokud tedy nějakým způsobem $\sigma_{\text{ap}}(A)$ zjistíme, stačí pro operátor A' dořešit rovnici vlastních čísel (která je přímočará) a známe celé spektrum.

Esenciální a diskrétní spektrum

Alternativou k hledání σ_{ap} uzavřeného operátoru T je takzvané *esenciální spektrum* σ_{ess} . Podmínka náležitosti

$$\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(T) \iff \exists (\psi_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D(T): (\forall n \in \mathbb{N}: \|\psi_n\| = 1), T\psi_n - \lambda\psi_n \rightarrow 0, \psi_n \xrightarrow{w} 0. \quad (12)$$

je oproti $\sigma_{\text{ap}}(T)$ posílena o požadavek, že posloupnost jednotkových vektorů (ψ_n) konverguje k nule ve slabé topologii, tedy například se jedná o vzájemně ortogonální vektory. (Alternativně se setkáme s formulací, že nemá konvergentní podposloupnost.) Odsud je zřejmé, že $\sigma_{\text{ess}}(A) \subset \sigma_{\text{ap}}(A)$. Podmínka (12) je známa jako **Weylovo kritérium** (ve variantách pro σ_{ess} i pro σ_{ap}).

O něco více můžeme říci pro uzavřené *symetrické* operátory. Do esenciálního spektra $A \in \mathcal{L}_{\text{cs}}(\mathcal{H})$ patří $\lambda \in \mathbb{C}$ právě tehdy, je-li buď *vlastní hodnotou nekonečné násobnosti*, nebo $(A_\lambda - \lambda I)^{-1}$ je *neomezený operátor*, kde A_λ je

část A v prostoru $\text{Ker}(A - \lambda I)^\perp$. (Symetrie A je zde využita k tomu, že A je jádrem $A - \lambda I$ redukován, díky čemuž konstrukce A_λ má smysl.)

Druhá část formulace umožňuje být prvkem σ_{ess} i některým vlastním hodnotám konečné násobnosti. To v případě, že by stále byly součástí přibližně bodového spektra operátoru A_λ , který z A vznikne, odstraníme-li vlastní podprostor příslušející λ . Jedná se přesně o ty vlastní hodnoty, které jsou současně **hromadnými body** a.p. spektra A , protože jejich přítomnost v $\sigma_{\text{ap}}(A)$ je i po odstranění vlastního prostoru stále zaručena uzavřeností množiny. Jediné body, které jsou v $\sigma_{\text{ap}}(A)$ oproti $\sigma_{\text{ess}}(A)$ navíc, jsou tedy *izolované* vlastní hodnoty *konečné* násobnosti. Tato množina se nazývá *diskrétní spektrum* $\sigma_{\text{d}}(A)$.

Pomocí esenciálního, příp. diskrétního spektra můžeme přeformulovat předchozí výsledek. Pro uzavřené symetrické rozšíření A' uzavřeného symetrického operátoru A platí

- $\sigma_{\text{p}}(A') \supset \sigma_{\text{p}}(A)$,
- $\sigma_{\text{ess}}(A') \supset \sigma_{\text{ess}}(A)$,

v případě konečných indexů defektu $n_\pm(A)$ konkrétněji

- $\sigma_{\text{d}}(A') \supset \sigma_{\text{d}}(A)$, protože z vlastní hodnoty konečné násobnosti nemůže vzniknout nekonečné násobnosti nebo z izolované neizolovaná,
- $\sigma_{\text{ess}}(A') = \sigma_{\text{ess}}(A)$, protože množina se nemůže zvětšit ze stejného důvodu, jako nemohla $\sigma_{\text{ap}} \setminus \sigma_{\text{p}}$, ale zmenšit se také nemůže.

Poslední rovnice je velice důležitá: pro $A \in \mathcal{L}_{\text{cs}}(\mathcal{H})$ s konečnými indexy defektu má **každé jeho $\mathcal{L}_{\text{cs}}$ rozšíření esenciální spektrum stejné a může se lišit jen v diskrétní části.**

Poznámka: Inkluze pro σ_{p} , σ_{ap} a σ_{ess} platí pro *jakékoli* uzavřené rozšíření *jakéhokoli* uzavřeného operátoru, symetrie nehraje roli. Všechny množiny jsou určeny existencí nějakých vektorů nebo posloupností vektorů v definičním oboru operátoru, která se v rozšíření nemůže pokazit.

Stabilita esenciálního spektra

Esenciální spektrum má ještě jeden speciální význam pro **samosdružené** operátory s poruchou, například operátory energie. Platí (bez důkazu, viz věta 10.4.9 a komentář k §10.4):

Věta. Nechť $A \in \mathcal{L}_{\text{sa}}(\mathcal{H})$, nechť C je *relativně kompaktní* vůči A . Pak $\sigma_{\text{ess}}(A + C) = \sigma_{\text{ess}}(A)$.

Relativní kompaktnost je zde definována analogicky relativní omezenosti (viz 25.3.): C je relativně kompaktní vůči A , je-li $CR_A(\mu)$ kompaktní operátor pro libovolné $\mu \in \rho(A)$ (pokud platí pro jednu hodnotu, platí již pro všechny díky rezolventním formulím).

Esenciální spektrum je nedocenitelným pomocníkem v argumentaci, jak vypadá spojitá část spektra pozorovatelných, protože jej stačí najít v nějaké jednodušší situaci (symetrický operátor před rozšířením, operátor bez poruchy) a dohledat jen vlastní vektory. Příklady uvidíme na cvičení.

Třetí postulát kvantové fyziky

Pro vyslovení třetího postulátu potřebujeme tentokrát doplnit jen jednu rychlou definici.

Definice. Operátorovou funkci $U: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})$ nazveme **unitárním propagátorem**, splňuje-li

$$\forall r, s, t \in \mathbb{R}: U(t, s)U(s, r) = U(t, r) \quad (1)$$

a je-li v obou parametrech silně spojitá.

Postulát 3 (o časovém vývoji).

- a) Časový vývoj *uzavřeného* kvantového systému je popsán unitárním propagátorem: existuje takové $U(t, s)$, že pro všechna t, s je

$$W_t = U(t, s)W_s U(t, s)^{-1}, \quad \text{resp.} \quad \psi_t = U(t, s)\psi_s \text{ (pro čistý stav)}. \quad (2)$$

- b) Propagátor *konzervativního* systému $U(t, s)$ splňuje $\forall t, s, \tau \in \mathbb{R}: U(t + \tau, s + \tau) = U(t, s)U(s, \tau)$ a je určen pozorovatelnou energie – Hamiltoniánem jako

$$U(t, s) = e^{-i(t-s)H}. \quad (3)$$

- c) Časový vývoj systému s časově závislým Hamiltoniánem je pro smíšené, resp. čisté stavy určen rovnicemi

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt}(W_t \psi) &= (H(t)W_t - W_t H(t))\psi, \\ i \frac{d}{dt}\psi_t &= H(t)\psi_t. \end{aligned} \quad (4)$$

Všechny tři části postulátu spolu souvisejí. Část a) je univerzálně platná, ale neurčuje žádnou spojitost s fyzikou. Část b) ukazuje, jak může propagátor být jednoduše vyjádřen pomocí operátoru energie, ale funguje jen pro konzervativní systémy. Část c) nakonec zobecňuje Schrödingerovu rovnici, která plyne z b), i na systémy ne-konzervativní. Toto pochopitelně otevírá několik otázek o vzájemné konzistenci požadavků, kterou dnes a zítra prozkoumáme.

Stoneův teorém

Nejprve prozkoumáme, jak souvisí části a) a b). Dodatečná podmínka na propagátor $U(t + \tau, s + \tau) = U(t, s)U(s, \tau)$ vyjadřuje nezávislost časového vývoje fyzikální soustavy na volbě počátku časové reference, což je jednoduše definice konzervativity. Unitární propagátor je tak plně předepsán jednodušším zobrazením $U: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})$ jako $U(t, s) = U(t - s)$ (použití stejného symbolu U typicky nepůsobí žádné zmatení), které má vlastnosti **silně spojitě jednoparametrické grupy unitárních operátorů**, či jednodušeji silně spojitě jednoparametrické unitární grupy (v tomto textu budeme zkráceně psát SSUG).

Požadavek silné spojitosti je při vyjádření b) motivován tím, že podle pravidel funkcionálního počtu z *bodové* spojitosti funkcí e^{-itx} v parametru t plyne *silná* spojitost e^{-itH} z hlediska stejného parametru. Ukážeme, že je i postačující podmínkou k opačnému závěru. Pro tento účel prozkoumáme hlavní vlastnosti silně SSUG.

Z grupové vlastnosti $U(t + s) = U(t)U(s)$ a z podmínek unitarity okamžitě plynou následující vlastnosti:

- libovolné dva prvky SSUG komutují,
- $U(0) = I$,
- $U(-t) = U(t)^{-1} = U(t)^*$.

Pro pevné $\psi \in \mathcal{H}$ dále zkoumejme vektorovou funkci $f : t \mapsto U(t)\psi$. Ze silné spojitosti plyne, že pro $t \rightarrow 0$ konverguje $f(t)$ k ψ , přičemž může a nemusí konvergovat také derivace v nule, definovaná limitou

$$f'(0) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(t) - f(0)}{t} = \lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{U(t) - I}{t} \psi \right). \quad (5)$$

Sestavíme množinu D všech takových ψ . Linearita vystupujících zobrazení implikuje, že se jedná o podprostor $\mathcal{H}$, a že

$$T : D \rightarrow \mathcal{H} : \psi \mapsto \lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{U(t) - I}{it} \psi \right) \quad (6)$$

tedy předepisuje nějaký lineární operátor. Takto definované T nazveme **generátorem** SSUG $U(t)$.

Poznámky: Jakmile $\psi \in D$, patří do D také $U(s)\psi$ pro každé s a operátor T s $U(s)$ komutuje. Obojí plyne z následujícího rozpisu:

$$TU(s)\psi = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)U(s)\psi - U(s)\psi}{it} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(s)(U(t)\psi - \psi)}{it} = U(s) \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)\psi - \psi}{it} = U(s)T\psi. \quad (7)$$

Věta (11.1.1). Jestliže $A \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$, pak $U : t \mapsto e^{itA}$ je SSUG a A je její generátor.

Důkaz. Všechny podmínky SSUG plynou z pravidel funkcionálního počtu, o silné spojitosti jsme v této souvislosti mluvili již výše a ostatní jsou podobně přímočarými důsledky. Přesvědčme se tedy o druhé části tvrzení. Označme T generátor $U(t)$.

Nechť $\psi \in D(A)$. Limitu na pravé straně (6) můžeme pro $U(t) = e^{itA}$ ekvivalentně vyjádřit pomocí funkce operátoru A jako

$$\lim_{t \rightarrow 0} f_t(A)\psi, \quad f_t(x) = (e^{itx} - 1)/(it). \quad (8)$$

Funkce f_t je pro $t \neq 0$ omezená a spojitá, což jsou postačující podmínky i pro $f_t \in L^\infty(\mathbb{R}, dE_H)$. Dále funkce $x \mapsto x$ patří do $L^2(\mathbb{R}, dE_H)$. Vyjádříme

$$\|(f_t(A) - A)\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |f_t(x) - x|^2 d\mu_\psi^{(A)}. \quad (9)$$

V integrandu na pravé straně vystupuje funkce shora omezená funkcí $(2|x|)^2$, která je podle $d\mu_\psi^{(A)}$ pro $\psi \in D(A)$ L^1 -integrabilní a tvoří tak integrabilní majorantu potřebnou pro převedení na integrál limitní funkce. Ovšem

$$\forall x \in \mathbb{R} : \lim_{t \rightarrow 0} f_t(x) = x \quad (10)$$

a tedy

$$\lim_{t \rightarrow 0} \|(f_t(A) - A)\psi\|^2 = 0, \quad \lim_{t \rightarrow 0} f_t(A)\psi = A\psi. \quad (11)$$

Odsud také $\psi \in D(T)$ a $T\psi = A\psi$.

Nechť naopak $\psi \in D(T)$. Limita $\lim_{t \rightarrow 0} f_t(A)\psi$ tedy existuje a je rovna $T\psi =: \varphi$. Stejný výsledek platí pro normy:

$$\forall \varepsilon > 0 : \exists \delta > 0 : \forall t \in \mathbb{R}, |t| < \delta : \|f_t(A)\psi\| - \|\varphi\| < \varepsilon \quad (12)$$

Za ε zvolíme libovolně. Pro $|t| < \delta$ je

$$\begin{aligned} \|f_t(A)\psi\|^2 &< (\|\varphi\| + \varepsilon)^2, \\ \int_{\mathbb{R}} |f_t(x)|^2 d\mu_\psi^{(A)}(x) &< (\|\varphi\| + \varepsilon)^2. \end{aligned} \quad (13)$$

Protože na levé straně jedná o integrály nezáporných funkcí, můžeme použít Fatouovo lemma. Podle něj můžeme integrovat $\liminf_{t \rightarrow 0} |f_t(x)|^2 = \lim_{t \rightarrow 0} |f_t(x)|^2 = x^2$ a integrál bude shora omezen $\liminf_{t \rightarrow 0}$ integrálů, ale protože všechny sdílejí (alespoň na δ -okolí nuly) stejnou horní mez, je tento výraz konečný. Rovnice

$$\int_{\mathbb{R}} x^2 d\mu_\psi^{(A)}(x) < \infty \quad (14)$$

je však předpisem pro náležitost ψ do $D(A)$. Spolu s předchozím výsledkem již $A = T$. $\square$

Neméně důležitá je věta, která ukazuje opačný směr, ale kterou již ponecháme bez důkazu.

Věta (Stone, 11.1.2). Ke každé SSUG $U: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})$ existuje právě jeden samosdružený operátor A takový, že $\forall t \in \mathbb{R}: U(t) = e^{itA}$.

Toto pro **konzervativní** systémy opravňuje současnou platnost částí a) a b) postulátu: splňuje-li propagátor $U(t, s)$ podmínku invariance vůči časovému posunu, pak $t \mapsto U(t, 0)$ tvoří SSUG, ke které nalezneme generátor a podle Stoneovy věty je samosdruženým operátorem. Část b) potom říká, že tímto operátorem musí být (záporně vzatý) Hamiltonián. Naopak, vyjdeme-li z rovnice (3), první věta říká, že $U(s + \tau, s)$ je SSUG z hlediska parametru τ , z čehož snadno odvodíme, že splňuje (1).

Poznámka: Pro *hermitovský* operátor A je operátorová funkce $U(t) = e^{itA}$ *stejněměrně* spojitá. Naopak generátorem stejnoměrně spojitě jednoparametrické unitární grupy je omezený operátor, protože limitu $(U(t) - I)/(it)$ lze provést v operátorové normě. Platí tedy analogie obou tvrzení za těchto úprav předpokladů i závěrů. Ovšem v kvantové fyzice Hamiltoniány běžně omezené nejsou.

Schrödingerova rovnice

Třetí část postulátu je ještě zcela jiné formy než první dvě a mluví o vývoji stavu jako o diferenciální rovnici. Podíváme se nejprve, jak rovnice tohoto tvaru vznikne z (2) v případě konzervativního systému, o kterém již máme dodatečnou informaci poskytnutou částí b).

Věta. Nechť $H \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$ je Hamiltonián konzervativního systému, nechť pro některé $s \in \mathbb{R}$ je $\psi_s \in D(H)$. Pak funkce $\mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H}: t \mapsto \psi_t$, předepsaná (2), splňuje $\forall t \in \mathbb{R}: \psi_t \in D(H)$, je diferencovatelná a pro její derivaci platí

$$i \frac{d\psi_t}{dt} = H\psi_t. \quad (15)$$

Důkaz. Pro $\psi \in D(H)$ máme $\forall t \in \mathbb{R}: U(t)\psi \in D(H)$ v důsledku skutečnosti, že $U(t)$, jakožto funkce H , komutuje s H současně jako omezený operátor:

$$U(t-s)H \subset HU(t-s), \quad \psi_s \in D(H) \Rightarrow \psi_t = U(t-s)\psi_s \in D(H). \quad (16)$$

Derivaci na levé straně (15) lze psát jako

$$i \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\psi_{t+\tau} - \psi_t}{\tau} = i \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau+t-s)\psi_s - U(t-s)\psi_s}{\tau} = -U(t-s) \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau)\psi_s - \psi_s}{i\tau} \quad (17)$$

Ovšem na pravé straně rozeznáváme definiční vztah pro generátor $U(t)$ působící na $\psi_s \in D(H)$. Protože generátorem je $-H$, existence limity je podmínkou $\psi_s \in D(H)$ zaručena a hodnota pravé strany rovnice je $U(t-s)H\psi_s = HU(t-s)\psi_s = H\psi_t$. $\square$

Věta (17.1.1). Nechť W_s je statistický operátor vystupující v (2) a H Hamiltonián uzavřeného systému. Platí-li $W_s D(H) \subset D(H)$, pak pro všechna $\psi \in D(H)$ je funkce $\mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H}: t \mapsto W_t \psi$ diferencovatelná a splňuje rovnici

$$i \frac{d}{dt} W_t \psi = (H W_t - W_t H) \psi. \quad (18)$$

Důkaz. Ze vztahu $U(t)D(H) \subset D(H)$ odvodíme

$$W_t D(H) = U(t-s)W_s U(s-t)D(H) \stackrel{(16)}{\subset} U(t-s)W_s D(H) \stackrel{\text{předp.}}{\subset} U(t-s)D(H) \stackrel{(16)}{\subset} D(H), \quad (19)$$

takže vlastnost $W_t D(H) \subset D(H)$ se také, podobně jako v minulé větě $\psi_t \in D(H)$, přenáší z s na všechna $t \in \mathbb{R}$, což dává smysl pravé straně (18). Pro levou stranu potom

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{W_{t+\tau} - W_t}{\tau} \psi = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau)W_t U(-\tau) - W_t}{\tau} \psi = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(\tau)W_t U(-\tau) - U(\tau)W_t + U(\tau)W_t - W_t}{\tau} \psi \quad (20)$$

Po poslední úpravě lze limitu rozdělit na dvě části, které zvlášť konvergují k $iW_t H \psi$ a $-iH W_t \psi$. $\square$

Všimněme si obzvlášť, že rovnice (18) je formulována v „silném“ smyslu, akcí na vektor ψ . Důvodem je, že operátor vystupující na její pravé straně zpravidla není omezený. Takový by nemohl být limitou omezených operátorů ve stejnoměrné topologii, a tedy ani derivací.

Nyní je evidentní, že část c) postulátu je formulována jako zobecnění těchto dvou závěrů, platných pro konzervativní systémy, náhradou operátoru H za operátorovou funkci $H(t)$. Tam ale záruky, které dávají konzervativní systémy, končí. Zatímco pro konzervativní systém je Schrödingerova rovnice ekvivalentní formulaci (3) (protože $e^{-i(t-s)H}\psi_s$ je jejím řešením na $D(H)$ a odsud spojitě rozšíříme), která je části a) ekvivalentní a jen dodává význam generátoru časového vývoje, v části c) se může ledacos pokazit:

- vektor ψ_s , který byl v $D(H(s))$, se může vyvinout na $\psi_t \notin D(H(t))$,
- množina počátečních vektorů, pro které Schrödingerova rovnice má řešení na daném časovém intervalu, nemusí být hustá (a určovat tak propagátor jednoznačně), a pokud je, není zaručeno, že vývojový operátor má vlastnosti propagátoru,
- naopak, derivací akce propagátoru na ψ nemusíme dostat samosdružený operátor.

Je tedy třeba brát části a) a c) tak, že se vzájemně doplňují. O vývoji nekonzervativního systému tak třetí postulát požaduje, aby byl jednak unitární, ale k tomu ještě určený Schrödingerovou rovnicí. O některých situacích, kdy z časově závislého Hamiltoniánu můžeme unitární propagátor s jistotou sestavit, se pobavíme na příští hodině.

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 λ , 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 (σ_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 $\sigma(x) = \sum_{j < n} \alpha_j \chi_n$ 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

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

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

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

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 OZKVANM2, platí (část s integrálem) pouze, pokud $\psi \in L^2(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R})$. Jinak je potřeba psát

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

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),

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

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.

Feynmanův integrál

V dnešní hodině zkusíme poskytnout základní oprávnění výpočtu propagátoru pomocí integrálu Feynmanova tvaru. Myšlenka je založena na větě známé jako Trotterova formule:

Věta (11.2.1). Necht $A, B \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H})$ takové, že $C = \overline{A + B}$ je také samosdružený. Potom pro každé $t \in \mathbb{R}$ platí

$$e^{itC} = \text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} \left(e^{itA/n} e^{itB/n} \right)^n. \quad (1)$$

Tento výsledek má přímočaré využití pro Hamiltoniány tvaru $P^2/(2m) + V$ (případně s uzávěrem): umožňuje k propagátoru e^{-itH} dospět střídavou aplikací propagátoru odpovídajícího samotné kinetické energii a jiného odpovídajícího samotnému V .

Propagátor volné částice v $L^2(\mathbb{R}^d)$ máme z minula,

$$(U_1(t)\psi)(\mathbf{x}) = \text{l.i.m.}_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi it} \right)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left(\frac{im}{2t} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2\right) \psi(\mathbf{y}) \eta_n(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (2)$$

a pro operátor $V = T_{v(\mathbf{x})}$ je exponenciála snadná,

$$U_2(t) = e^{-itV} : \quad (U_2(t)\psi)(\mathbf{x}) = e^{-itv(\mathbf{x})} \psi(\mathbf{x}). \quad (3)$$

Pro součin U_1 a U_2 vyhodnocených v t/N dostáváme předpis

$$(U_1(t/N)U_2(t/N)\psi)(\mathbf{x}) = \text{l.i.m.}_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi it} \right)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left(\frac{imN}{2t} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2 - \frac{it}{N} v(\mathbf{y})\right) \psi(\mathbf{y}) \eta_n(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (4)$$

Pro druhou mocninu operátoru by to znamenalo tuto $L^2(\mathbb{R}^d)$ funkci nalézt a dosadit do stejného předpisu znovu. Nicméně vzhledem k tomu, že se jedná o aplikaci spojitého ($\Leftarrow$ unitárního) operátoru, limitní přechod v L^2 -normě, vyjádřený l.i.m., můžeme provést i na výsledcích vnějšího operátoru. Proto

$$((U_1(t/N)U_2(t/N))^2\psi)(\mathbf{x}) = \text{l.i.m.}_{n_1 \rightarrow \infty} \text{l.i.m.}_{n_2 \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi it} \right)^{2d/2} \int_{\mathbb{R}^d} K_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \left(\int_{\mathbb{R}^d} K_2(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \psi(\mathbf{z}) \eta_{n_2}(\mathbf{z}) d\mathbf{z} \right) \eta_{n_1}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (5)$$

kde

$$K_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp\left(\frac{imN}{2t} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2 - \frac{it}{N} v(\mathbf{y})\right). \quad (6)$$

Díky Fubiniově větě můžeme vnořenou integraci přepsat jako integrál přes dvě proměnné z $\mathbb{R}^d$ a integrandy sloučit do jednoho. Opakováním této myšlenky dospíváme ke vzorci

$$\begin{aligned} (U(t)\psi)(\mathbf{x}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} ((U_1(t/N)U_2(t/N))^N \psi)(\mathbf{x}) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi it} \right)^{Nd/2} \text{l.i.m.}_{n_1, \dots, n_N \rightarrow \infty} \int_{(\mathbb{R}^d)^{\times N}} K_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1) K_N(\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2) \dots K_N(\mathbf{y}_{N-1}, \mathbf{y}_N) \times \\ &\quad \psi(\mathbf{y}_N) \eta_{n_1}(\mathbf{y}_1) \dots \eta_{n_N}(\mathbf{y}_N) d\mathbf{y}_1 \dots d\mathbf{y}_N. \end{aligned} \quad (7)$$

V posledním vzorci můžeme ještě sloučit funkce

$$K_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1) \dots K_N(\mathbf{y}_{N-1}, \mathbf{y}_N) = \exp\left(\frac{imN}{2t} \sum_{k=1}^N \|\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_{k-1}\|^2 - \frac{it}{N} \sum_{k=1}^N v(\mathbf{y}_k)\right), \quad (8)$$

kde $\mathbf{y}_0 := \mathbf{x}$.

Toto je vyjádření Feynmanova integrálu platné pro jakýkoli Hamiltonián tvaru součtu kinetické energie a potenciálového členu, který je operátorem násobení funkcí, dokud se jedná o (v podstatě) samosdružený operátor.

Souvislost se známějším dráhovým integrálem je taková, že (8) lze psát způsobem

$$\begin{aligned} K_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1) \dots K_N(\mathbf{y}_{N-1}, \mathbf{y}_N) &= \exp \left(\frac{imt}{2N} \sum_{k=1}^N \|\mathbf{u}_k\|^2 - \frac{it}{N} \sum_{k=1}^N v(\mathbf{y}_k) \right) \\ &= \exp \left(\frac{it}{N} \sum_{k=1}^N \left(\frac{m\|\mathbf{u}_k\|^2}{2} - v(\mathbf{y}_k) \right) \right) \end{aligned} \quad (9)$$

kde

$$\mathbf{u}_k := \frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_{k-1}}{t/N} \quad (10)$$

odpovídá rychlosti rovnoměrného přímočarého pohybu mezi body $\mathbf{y}_{k-1}$ a $\mathbf{y}_k$ za čas t/N . Vzorec (7) tedy popisuje limitu „dráhových integrálů“, kde pro každé N uvažujeme lomenou čáru o $N + 1$ vrcholech v ekvidistančních časech mezi 0 a t . Přitom pro „Lagrangian“ $m\|\mathbf{u}_k\|^2/2 - v_k$ je třeba rychlost dosazovat z přímých úseků, ale potenciál vyhodnocovat ve vrcholech čáry. Taková funkce, po částech konstantní na intervalech $(0, t/N), (t/N, 2t/N), \dots, (t - t/N, t)$, by pak v integrálu od 0 do t skutečně dala exponent vystupující v (8). Toto je smysl, ve kterém je třeba uvažovat dráhovou integraci, pokud chceme vyloučit pochyby, zda konverguje.

Poznámka: o akci

Fyzikální výrazy jsou v předchozím odstavci uvedené v uvozovkách zcela záměrně. Fyzikálně by akce podél dráhy $\gamma(s)$, $s \in \langle 0, t \rangle$ byla určena vzorcem

$$S(\gamma) = \int_0^t \left(\frac{m}{2} \|\dot{\gamma}(s)\|^2 - V(\gamma(s)) \right) ds. \quad (11)$$

I pokud bychom doslova uvažovali lomenou čáru dosahující vrcholů $\mathbf{y}_0$ až $\mathbf{y}_N$ v časech s odpovídajících celočíselným násobkům t/N mezi 0 a t , dostaneme výraz

$$S(\gamma) = \sum_{k=1}^N \frac{Nm\|\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_{k-1}\|^2}{2t} - \int_0^t V(\gamma(s)) ds, \quad (12)$$

který se od exponentu na pravé straně (8) liší v potenciálovém členu. Je tedy důležité tento rozdíl udržovat na paměti. Může se stát, a pro mnoho potenciálů to tak dopadne, že pokud ve (7) nahradíme integrační jádro vzorcem

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N) := \exp(iS(\gamma)), \quad (13)$$

kde γ vyjadřuje výše popsanou lomenou čáru, hodnota limity zůstane, i když jednotlivé konvergenty se změní. Výsledek pak ale už nemůžeme opravňovat Trotterovou formulí, díky čemuž získá dodatečné předpoklady. Pro jaké případy tomu tak je, je předmětem celých monografií.

Poznámka: o integraci

Poslední poznámka, kterou si k fyzikální formulaci dovolíme, se týká pojmu integrace podél všech spojitých drah, tedy možnosti zápisu výrazu tvaru (7) bez limity přes N . Je poměrně známým varováním, že takový integrál nemá dobře definovanou míru. Podíváme se na jeden argument, proč tomu tak je.

Za prostor všech funkcí, přes které bychom rádi integrovali, můžeme zvolit $H = L^2((0, t), \mathbb{R}^d)$. Jedná se o reálný Hilbertův prostor nekonečné dimenze. Máme tedy pojem míry a metriky, konkrétně vzdálenost dvou křivek

$$\rho(\beta, \gamma) = \sqrt{\int_0^t \|\beta(s) - \gamma(s)\|^2 ds} \quad (14)$$

má dobrou fyzikální interpretaci.

Z H můžeme udělat měřitelný prostor tak, že vybudujeme σ -algebru nad množinou všech koulí v H . Na tomto prostoru bychom chtěli zavést míru μ , která má vlastnosti:

1. pokud $M \subset H$ je omezená borelovská množina, pak $\mu(H) < \infty$,
2. míra je invariantní vůči posunu: $\mu(\gamma + M) = \mu(M)$.

Druhá vlastnost vyjadřuje, že stejné variace oproti různým křivkám by měly mít stejnou váhu.

V prostoru H ale snadno najdeme protipříklad: vzhledem k tomu, že má nekonečnou dimenzi, existuje nějaká ortonormální báze $(\varphi_n)_{n < \omega}$. Pro libovolné její dva prvky platí

$$\rho(\varphi_m, \varphi_n) = \sqrt{2}\delta_{mn}. \quad (15)$$

Koule o poloměru $1/2$ kolem každého φ_n jsou tedy vzájemně disjunktní: jsou příliš malé na to, aby se protnuly.

Vezměme množinu

$$M = \bigcup_{n < \omega} B_{1/2}(\varphi_n). \quad (16)$$

Každý její bod je vzdálen méně než $3/2$ od počátku, takže $M \subset B_{3/2}(0)$. Pokud ovšem míra μ má splňovat požadavky stanovené výše, musela by všem koulím o stejném poloměru přiřazovat stejnou konečnou hodnotu. To je však sporem s tím, že by mělo být

$$\mu(M) = \sum_{n < \omega} \mu(B_{1/2}(\varphi_n)) \leq \mu(B_{3/2}(0)) < \infty. \quad (17)$$

Tento argument neznamena, že by na H *nešla* zavést míra, ale dokázali jsme, že nemůže mít vlastnosti, na které jsme zvyklí z Lebesgueovy míry.

Čtvrtý postulát kvantové fyziky

Čtvrtý (a poslední) postulát – o složených systémech – vyslovíme nezvykle ve dvou oddělených částech.

Postulát 4a: Stavový prostor systému S složeného z konečného počtu podsystémů $S_1, \dots, S_N$ je tenzorovým součinem stavových prostorů těchto podsystémů, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$.

S touto částí a všemi jejími důsledky jsme velmi dobře obeznámeni. Zaslouží si snad jen jedinou poznámku, že vždy uvažuje složení *konečně mnoha* systémů. Důvodem pro absenci zobecnění na vyšší kardinality je jednoduše skutečnost, že většinou není zkoumat nekonečné počty částic fyzikálně opodstatněné. Případný zájem o rozšíření na $N \geq \omega$ by s sebou nesl potřebu dodefinovat tenzorový součin odpovídajícího počtu prostorů (čehož nelze dosáhnout iterativně součinem dvojic prostorů) a přestaly by platit některé záruky, které nám konečný tenzorový součin dává. Jednou z takových je, že uvažujeme-li prostory $\mathcal{H}_1, \dots, \mathcal{H}_N$ separabilní, pak je separabilní i jejich tenzorový součin – pro součin nekonečně mnoha prostorů toto může být porušeno.

Druhá část se týká systémů nerozlišitelných částic, ale budeme si pro ni potřebovat zavést několik prvků značení. Pokud náš složený systém (nebo nějaký jeho podsystém) je tvořen N identickými částmi, pak za stavové prostory $\mathcal{H}_1, \dots, \mathcal{H}_N$ dosazujeme N kopií stejného Hilbertova prostoru, označme jej $\mathcal{H}_1$. Je tedy

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1^{\otimes N} =: \mathcal{H}_{(N)}. \quad (1)$$

Pro $N \in \mathbb{N}$ budeme označovat $\mathcal{S}_N$ grupu permutací množiny $\{1, 2, \dots, n\}$. Pro prvek $\sigma \in \mathcal{S}_N$ a zvolený Hilbertův prostor $\mathcal{H}_1$ nechť U_σ označuje unitární operátor na $\mathcal{H}_{(N)}$ předepsaný vztahem

$$U_\sigma(\varphi_1 \otimes \dots \otimes \varphi_N) := \varphi_{\sigma(1)} \otimes \dots \otimes \varphi_{\sigma(N)}. \quad (2)$$

Pro libovolné dvě permutace $\sigma, \tau \in \mathcal{S}_N$ je $U_\sigma U_\tau = U_{\sigma \circ \tau}$, zobrazení $\sigma \mapsto U_\sigma$ je tedy unitární reprezentací grupy $\mathcal{S}_N$ na prostoru $\mathcal{H}_{(N)}$.

Pro stejnou volbu N a $\mathcal{H}_1$ označíme

$$S_N := \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} U_\sigma, \quad A_N := \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn } \sigma U_\sigma. \quad (3)$$

Podíváme se na nejvýznamnější vlastnosti této dvojice operátorů (na přednášce s důkazy):

1. Pro každé $N \in \mathbb{N}$ se jedná o dvojici projektorů.
2. Pro $N = 1$ je $S_1 = A_1 = I$. Pro $N > 1$ se jedná o vzájemně ortogonální projektory.
3. Platí $S_2 + A_2 = I$. Pro $N > 2$ však pouze $S_N + A_N \leq I$.
4. Pro každé $\sigma \in \mathcal{S}_N$ je

$$U_\sigma S_N = S_N, \quad U_\sigma A_N = \text{sgn } \sigma A_N. \quad (4)$$

Pro tvrzení, která budou platit obdobně pro S_N nebo A_N , budeme používat zástupný symbol P_N .

Postulát 4b: Stavový prostor N identických bosonů (resp. fermionů) s jednočásticovým stavovým prostorem $\mathcal{H}_1$ lze vymezit na podprostor $S_N \mathcal{H}_{(N)}$ (resp. $A_N \mathcal{H}_{(N)}$) prostoru $\mathcal{H}_{(N)} = \mathcal{H}_1^{\otimes N}$.

Části b) je potřeba rozumět tak, že ne všechny stavy na prostoru $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$, který by jinak předepisovala část a), jsou přípustnými stavy soustavy nerozlišitelných bosonů / fermionů: musí se jednat o statistické operátory redukované odpovídajícím projektorem P_N , jejichž obor hodnot spadá do $P_N \mathcal{H}_{(N)}$. (Pro čisté stavy to znamená, že stavový vektor musí být prvkem $P_N \mathcal{H}_{(N)}$.) Takové operátory je potom možné ztotožnit s jejich zúžením na posledně jmenovaný prostor. Tento prostor je, jakožto obor hodnot projektoru, uzavřeným prostorem, a se zúžením skalárního součinu z $\mathcal{H}_{(N)}$ je Hilbertův. Pro $N = 1$ není mezi $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_{(1)}$, $S_1 \mathcal{H}_{(1)}$ a $A_1 \mathcal{H}_{(1)}$ rozdíl.

Je samozřejmě potřeba zabývat se konzistencí takového zúžení. Ta se opírá o matematické vyjádření **principu nerozlišitelnosti** částic. Fyzikálně nerozlišitelnost znamená, že neexistuje pozorování, které by od sebe odlišilo

stavy $\varphi, \chi \in \mathcal{H}_{(N)}$, které splňují $\chi = U_\sigma \varphi$ pro nějakou permutaci $\sigma \in \mathcal{S}_N$. Matematicky tento požadavek vyjádříme tak, že pro každou *přípustnou* pozorovatelnou A , každou $\Delta \in \mathcal{B}^1$ a každý stav $\psi \in \mathcal{H}_{(N)}$ musí platit

$$\begin{aligned} w(\Delta, A; \psi) &= w(\Delta, A; U_\sigma \psi) \\ (\psi, E_A(\Delta) \psi) &= (U_\sigma \psi, E_A(\Delta) U_\sigma \psi) = (\psi, U_\sigma^{-1} E_A(\Delta) U_\sigma \psi). \end{aligned} \quad (5)$$

Díky obecnému kvantifikátoru $\forall \psi \in \mathcal{H}_{(N)}$ poslední řádka ale znamená, že $E_A(\Delta) - U_\sigma^{-1} E_A(\Delta) U_\sigma$ je nulový operátor, a potažmo, že $E_A(\Delta)$ a U_σ komutují. Nakonec, jestliže s operátorem U_σ komutuje každý prvek spektrální míry E_A , znamená to, že s ním komutuje i pozorovatelná A sama. Dostáváme tak hledané matematické vyjádření principu: **Přípustné pozorovatelné na systému N nerozlišitelných částic jsou takové, které komutují se všemi operátory $U_\sigma, \sigma \in \mathcal{S}_N$.**

Vraťme se tedy k otázce bezspornosti formulace části b) postulátu. Komutuje-li $A \in \mathcal{L}_{sa}(\mathcal{H}_{(N)})$ s operátory U_σ pro všechna $\sigma \in \mathcal{S}_N$, pak podle (3) komutuje také s projektory P_N . To je nutnou a postačující podmínkou pro to, aby jimi byla redukována. Pokud potom v nějaký okamžik vymezíme stav soustavy na vektor z prostoru daného částí b), je třeba si uvědomit, že jediné dva způsoby, jakými se v rámci naší (nyní již kompletně vyslovené) sady postulátů může měnit, je

- změna stavu po měření: $\tilde{W} = EWE / \text{Tr}(EW)$, kde $E = E_A(\Delta)$ pro nějakou pozorovatelnou A ,
- časový vývoj daný Schrödingerovou rovnicí, tedy pozorovatelnou H .

Jestliže *každá* pozorovatelná je vázána požadavkem reducibility na prostor $P_N \mathcal{H}_{(N)}$, pak totéž platí pro jejich projektorové míry a výsledek měření nemůže tento prostor opustit. Podobně rychle ukážeme, že vlastnost $P_N W = W P_N$ se přenáší i na dW/dt (pro H omezené, jinak s potřebnými úpravami) a předchozí závěr platí tak i pro časový vývoj.

V případě zahrnutí nerozlišitelných částic do popisovaného kvantového systému tak čtvrtý postulát omezuje obecnost prvního: ne každý ze stavů prostoru daného 4a) je přípustným stavem fyzikální soustavy a ne každý samodružený operátor může popisovat nějakou přípustnou pozorovatelnou veličinu. Obě omezení ale můžeme obejít, pokud se vymezíme na podprostor předepsaný 4b).

Prostory funkcí

Uvažujme $\mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}^3)$. Platí, že N -násobným tenzorovým součinem tohoto prostoru sama se sebou dostaneme prostor $\mathcal{H}_{(N)} = L^2(\mathbb{R}^{3N})$. Tenzorovým součinem funkcí $\varphi_1, \dots, \varphi_N$ z $L^2(\mathbb{R}^3)$ dostaneme funkci

$$\varphi : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{C} : \varphi(x_1, \dots, x_N) = \varphi_1(x_1) \varphi_2(x_2) \dots \varphi_N(x_N). \quad (6)$$

Operátor $U_\sigma, \sigma \in \mathcal{S}_N$ na ni působí dle vzorce (2) jako

$$(U_\sigma \varphi)(x_1, \dots, x_N) = \varphi_{\sigma(1)}(x_1) \dots \varphi_{\sigma(N)}(x_N) = \varphi_1(x_{\sigma^{-1}(1)}) \dots \varphi_N(x_{\sigma^{-1}(N)}) = \varphi(x_{\sigma^{-1}(1)}, \dots, x_{\sigma^{-1}(N)}) \quad (7)$$

Poslední vzorec má zobecnění na celé $\mathcal{H}_{(N)}$ a snadno nahlédneme, že toto rozšíření představuje současně lineární rozšíření (7) na $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$ a spojitě rozšíření na $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$. Předpis

$$(U_\sigma \psi)(x_1, \dots, x_N) = \psi(x_{\sigma^{-1}(1)}, \dots, x_{\sigma^{-1}(N)}) \quad (8)$$

popisuje tedy akci U_σ na libovolnou $\psi \in \mathcal{H}_{(N)}$.

K předpisu obecného vektoru z $S_N \mathcal{H}_{(N)}$ můžeme dojít přes vlastnost (4) snáze než přes definici (3). Taková funkce totiž musí splňovat

$$\xi = S_N \xi = U_\sigma S_N \xi, \quad \forall \sigma \in \mathcal{S}_N \quad \Rightarrow \quad \forall \sigma \in \mathcal{S}_N : \xi(x_{\sigma(1)}, x_{\sigma(2)}, \dots, x_{\sigma(N)}) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \xi(x_1, \dots, x_N). \quad (9)$$

Prostor $S_N \mathcal{H}_{(N)}$ je tedy tvořen funkcemi, které jsou s.v. symetrické vůči libovolné záměně svých argumentů. Analogicky pro $\eta \in A_N \mathcal{H}_{(N)}$

$$\eta = A_N \eta = \text{sgn } \sigma U_\sigma \eta, \quad \forall \sigma \in \mathcal{S}_N \quad \Rightarrow \quad \forall \sigma \in \mathcal{S}_N : \eta(x_{\sigma(1)}, x_{\sigma(2)}, \dots, x_{\sigma(N)}) \stackrel{\text{s.v.}}{=} \text{sgn } \sigma \eta(x_1, \dots, x_N). \quad (10)$$

Protože další akce S_N , resp. A_N na ξ , resp. η nechává tyto vektory invariantní, jsou podmínky na pravé straně pro náležitost do $P_N \mathcal{H}_{(N)}$ současně nutné a postačující.

Fockův prostor

Čtvrtý postulát dává nástroje pro popis systému složeného z pevného počtu částic, ale ve fyzice mikrosvěta není nouze o situace, ve kterých se počet částic nezachovává. Nemusíme kvůli tomu tvrzení postulátu měnit. Pouze N -částicový prostor použijeme pro konstrukci většího stavového prostoru, který bude zahrnovat i jiné stavy. Pokud uvažujeme všechna $N \in \mathbb{N}_0$, získáme takto Fockův prostor.

V rámci této kapitoly budeme uvažovat, že popisujeme soubory stejného jednoho druhu elementární částice. Pokud při interakcích vznikají a zanikají různé druhy částic, je potřeba sestavit Fockův prostor pro každý z nich zvlášť a uvažovat systém vzniklý složením *těchto* komponent.

Nekonečný direktní součet prostorů a operátorů

Pro konstrukci Fockova prostoru se potřebujeme blíže seznámit s rozšířením koncepce direktního součtu prostorů na nekonečný počet.

Uvažujme pro tento účel nějakou indexovou množinu I a zobrazení, které každému prvku $\alpha \in I$ přiřazuje nějaký Hilbertův prostor $\mathcal{H}_\alpha$ (ne nutně různé). Direktní součet sestavíme následovně:

$$\bigoplus_{\alpha \in I} \mathcal{H}_\alpha =: \mathcal{H}_\oplus := \left\{ X: \alpha \in I \mapsto \mathcal{H}_\alpha \mid \sum_{\alpha \in I} \|X(\alpha)\|_{\mathcal{H}_\alpha}^2 < \infty \right\}. \quad (1)$$

Zobrazení X si můžeme představit jako zobecnění posloupnosti „ α -tý vektor z $\mathcal{H}_\alpha$ “, pokud by I byla přirozená čísla. Podle našich pravidel pro zobecněné sumy v sobě druhá podmínka zahrnuje podmínku, že každá taková zobecněná posloupnost má nejvýše spočetný počet prvků, které *nejsou* nulový vektor.

Na prostoru $\mathcal{H}_\oplus$ zavedeme skalární součin jako

$$(X, Y) := \sum_{\alpha \in I} (X(\alpha), Y(\alpha))_{\mathcal{H}_\alpha}. \quad (2)$$

Tato suma má také nejvýše spočetný počet nenulových členů a její absolutní integrabilita je zaručena Cauchyovou a Hölderovou nerovností spolu s definicí (1), což zajišťuje korektnost definice. Skalární součin (2) indukce normu

$$\|X\|^2 = \sum_{\alpha \in I} \|X(\alpha)\|_{\mathcal{H}_\alpha}^2, \quad (3)$$

rovněž podle předpokladu dobře definovanou pro každý prvek.

Přesvědčíme se ještě o uzavřenosti vůči této normě. Pokud uvažujeme posloupnost $(X_n)_{n=1}^\infty$ vektorů z $\mathcal{H}_\oplus$, můžeme najít sjednocení všech podmnožin $\alpha \in I$, na kterých některé ze zobrazení X_n je nenulové – jako spočetné sjednocení nejvýše spočetných množin je to také nejvýše spočetná množina. Díky konstrukci normy zaručuje Cauchyova podmínka posloupnosti $(X_n)_{n=1}^\infty$ skutečnost, že v každém bodě $\alpha \in I$ posloupnosti $(X_n(\alpha))_{n=1}^\infty$ konvergují zvlášť. Lze tedy z těchto individuálních limit, kterých je nejvýše spočetně mnoho, sestavit nové zobrazení X , doplněné všude jinde nulami. Přímočaré dosazení do patřičných vzorců ukáže, že X splňuje podmínku (1) a v normě (3) je limitou $(X_n)_{n=1}^\infty$.

Takto sestavený nekonečný direktní součet splňuje následující vlastnosti, které bychom od operace $\oplus$ očekávali:

- podprostory dané zobrazeními X , která jsou nenulová v nejvýše jednom, pevně zvoleném, bodě $\alpha \in I$, jsou uzavřené, vzájemně ortogonální podprostory $\tilde{\mathcal{H}}_\alpha \subset \mathcal{H}_\oplus$, izomorfní $\mathcal{H}_\alpha$,
- rozklad libovolného vektoru $X \in \mathcal{H}_\oplus$ do těchto $\tilde{\mathcal{H}}_\alpha$ je jednoznačný a daný ortogonálními projekcemi,
- druhá mocnina $\|X\|$ je součtem druhých mocnin norem těchto projekcí (zobecněná Parsevalova rovnost),
- z projekcí $X \in \mathcal{H}_\oplus$ na $\tilde{\mathcal{H}}_\alpha$ je nejvýše spočetně mnoho nenulových a jejich součet konverguje k X (zobecněný Fourierův rozvoj),
- jestliže množina I je konečná, podmínka v (1) se stane triviálně splněnou a tato obecná konstrukce dá výsledek identický dříve zavedenému direktnímu součtu Hilbertových prostorů.

Zcela analogicky potom můžeme konstruovat direktní součet libovolného systému vzájemně ortogonálních uzavřených podprostorů $\mathcal{H}$ jako podprostor $\mathcal{H}$.

Direktní součet operátorů

Myšlenku konstrukce direktního součtu prostorů $(\mathcal{H}_\alpha)_{\alpha \in I}$ reflektuje i konstrukce direktního součtu sady operátorů $(T_\alpha)_{\alpha \in I}$ definovaných na nich (nebo na definičních oborech $D(T_\alpha) \subset \mathcal{H}_\alpha$). Abychom dodrželi podmínku definice (1), která zajišťuje dobrou definovanost skalárního součinu a normy na $\bigoplus_{\alpha \in I} \mathcal{H}_\alpha$, je potřeba definiční obor $T_\oplus := \bigoplus_{\alpha \in I} T_\alpha$ vymezit předpisem

$$D(T_\oplus) := \left\{ X \in \mathcal{H}_\oplus \mid \forall \alpha \in I: X(\alpha) \in D(T_\alpha), \sum_{\alpha \in I} \|T_\alpha X(\alpha)\|^2 < \infty \right\}, \quad (4)$$

$$T_\oplus : D(T_\oplus) \rightarrow \mathcal{H}_\oplus : (T_\oplus X)(\alpha) = T_\alpha X(\alpha).$$

Kontrola absolutní konvergence je opět nadbytečná, je-li množina I konečná.

V komentáři k §7.4 se dozvídáme několik poznatků o této konstrukci, které pouze vypíšeme:

- Jsou-li T_α omezené pro všechna $\alpha \in I$ a zároveň $\sup_{\alpha \in I} \|T_\alpha\|_{\mathcal{H}_\alpha} < \infty$, potom $T_\oplus$ je omezený a $\|T\| = \sup_{\alpha \in I} \|T_\alpha\|_{\mathcal{H}_\alpha}$.
- Jsou-li T_α hustě definované na $\mathcal{H}_\alpha$ pro všechna $\alpha \in I$, je také $T_\oplus \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_\oplus)$. Za tohoto předpokladu také $T_\oplus^* = \bigoplus_{\alpha \in I} T_\alpha^*$.
- Jsou-li T_α pro všechna $\alpha \in I$ uzavřené, resp. symetrické, resp. samosdružené, resp. v podstatě samosdružené, platí tato vlastnost také pro $T_\oplus$.

Direktní součet operátorů souvisí s poněkud jednodušším konceptem algebraického součtu. Pro stejné $(T_\alpha)_{\alpha \in I}$ definujeme

$$T_\Sigma : \Sigma_{\alpha \in I} \widetilde{D(T_\alpha)} \rightarrow \mathcal{H}_\oplus \quad (5)$$

stejným předpisem jako $T_\oplus$. Rozdíl je v tom, že definičním oborem je pouze algebraický součet podprostorů $\mathcal{H}_\oplus$

$$\Sigma_{\alpha \in I} \widetilde{D(T_\alpha)} = \left(\bigcup_{\alpha \in I} \widetilde{D(T_\alpha)} \right)_{\text{lin}} \subset D(T_\oplus), \quad (6)$$

kde vlnka značí použití izometrie mezi komponentním prostorem $\mathcal{H}_\alpha$ a podprostorem $\tilde{\mathcal{H}}_\alpha \subset \mathcal{H}_\oplus$.

Jsou-li T_α uzavřené, je $T_\oplus$ uzavřený, ale pro I nekonečnou T_Σ obecně ne. Je však $T_\oplus$ uzávěrem T_Σ . Obecněji pro neuzavřené, ale uzavíratelné operátory platí, že uzávěry $T_\oplus$ a T_Σ se rovnají. Pro I konečné jsou obě konstrukce shodné.

Fockův prostor

Z minula máme stavový prostor N identických bosonů, resp. fermionů daný jako

$$P_N \mathcal{H}_N, \quad \mathcal{H}_N := \mathcal{H}_1^{\otimes N}, \quad (7)$$

kde $P = S$, resp. A . Označení $\mathcal{H}_N$, které pro dnešek přijmeme, je konzistentní s $\mathcal{H}_1$. Dodefinujeme pro stručnost ještě

$$\mathcal{H}_0 := \mathbb{C}, \quad S_0, A_0 := 1. \quad (8)$$

Tato volba je pro „prázdný tenzorový součin“ smysluplná v tom smyslu, že rovnost $\mathcal{H}_{n+1} = \mathcal{H}_n \otimes \mathcal{H}_1$ s ní platí i pro $n = 0$. Fockův prostor pak zavedeme vzorcem

$$\mathcal{F}_P(\mathcal{H}_1) := \bigoplus_{N=0}^{\infty} P_N \mathcal{H}_N. \quad (9)$$

Všechny N -částicové podprostory, symetrizované či antisymetrizované, v něm tedy vystupují jako ortogonální podprostory, dále obsahuje lineární kombinace napříč různými počty částic a i jejich zobecnění na spočetně mnoho členů. Ortonormální bázi Fockova prostoru můžeme zkonstruovat v rámci tohoto vnoření $\mathcal{H}_N \rightarrow \mathcal{H}_N$ jednoduše sloučením ortonormálníchází jednotlivých $\mathcal{H}_N$. Odsud plyne důležitá poučka, že **pro separabilní jednočásticový prostor $\mathcal{H}_1$ jsou $\mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1), \mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1)$ separabilní také.**

Zavést můžeme také

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}_1) := \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N. \quad (10)$$

bez projekce na symetrický nebo antisymetrický podprostor. Ačkoli se nebude jednat o stavový prostor žádného druhu částic, je prakticky snazší v něm uvažovat některé operátory. Ty pak podle principu nerozlišitelnosti budou redukovány podprostory $\mathcal{F}_S$ i $\mathcal{F}_A$ a mohou tak zastoupit popis operátorů definovaných na nich. $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)$ umožňuje také přímočarý zápis báze pomocí tenzorových součinů jedné pevně zvolené báze $\mathcal{H}_1$ se sebou.

Zajímavý je prostor $\mathcal{H}_0 = \mathbb{C}$ dimenze 1. Za ortonormální bázi v něm můžeme volit jednoduše číslo 1. Na prostoru $\mathcal{H}_0$ existuje jediný statistický operátor, kterým je identita, na Fockově prostoru mu odpovídá $I \oplus 0 \oplus 0 \oplus \dots$, což je ortogonální projektor na $\mathcal{H}_0$. Takový stav reprezentuje nulový počet částic či *vakuum* s nulovým počtem částic. Odpovídající jednotkový vektor $(X(\alpha))_{n=0}^{\infty} = (1, 0_{\mathcal{H}_1}, 0_{\mathcal{H}_2}, \dots)$ můžeme označit Ω_0 . Na konkrétní volbě fáze zvoleného čísla stav vakua nezávisí, ale v lineárních kombinacích, například

$$\alpha\Omega_0 + \beta\varphi, \quad \varphi \in \mathcal{H}_1, \quad (11)$$

začne být podstatná i relativní fáze mezi čísly α a β , například volby $\alpha = 1, \beta = \pm 1$ dávají pro $\|\varphi\| = 1$ dva vzájemně kolmé stavy z $\mathcal{F}_P(\mathcal{H}_1)$. Vakuum tedy neobsahuje žádnou kopii žádného stavu z $\mathcal{H}_1$, ale je stále třeba jej brát jako jeden z bazových vektorů, který vstupuje do lineárních kombinací, ne jako nulu.

Rozšíření jednočásticových operátorů na Fockův prostor

Uvažujme libovolný operátor $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1)$. Pro $N \in \mathbb{N}_0$ uvažujme operátor

$$T_N^{\Sigma} = T \otimes I \otimes \dots \otimes I + I \otimes T \otimes \dots \otimes I + \dots + I \otimes I \otimes \dots \otimes T. \quad (12)$$

Definičním oborem tohoto operátoru je hustý podprostor $D_T \otimes \dots \otimes D_T \subset \mathcal{H}_N$. Pokud T je omezené, můžeme rovnou uvažovat na místě $\otimes$ operaci $\otimes$ a dostat operátor definovaný na celém $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$. Pro $N = 0$ definujeme $T_0^{\Sigma} = 0_{\mathcal{H}_0}$. Tyto operátory jsou automaticky redukovány projektory S_N i A_N .

Vlastnosti husté definovanosti i reducibility operátory P_N se potom přenášejí i na operátor

$$T^{\Sigma} = \sum_{N=0}^{\infty} T_N^{\Sigma}. \quad (13)$$

(což je třeba v rychlosti ověřit) a hustě definovány jsou pak i jeho části v $\mathcal{F}_S$ a v $\mathcal{F}_A$.

Pokud T je samosdružený operátor pro jednu částici, pak T_{Σ} (stejně jako jeho části v $\mathcal{F}_P$) je v podstatě samosdružený a jeho uzávěr může sloužit jako pozorovatelná na Fockově prostoru (opět redukována projektory na $\mathcal{F}_P$). Jedná se o operátor, který můžeme psát jako

$$\overline{T^{\Sigma}} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \overline{T_N^{\Sigma}} =: T^{\oplus}. \quad (14)$$

Díky konstrukci se jedná o *celkové* pozorovatelné: celkovou hybnost systému, celkovou energii apod.

Operátory počtu částic

Zajímavou volbou za T pro předchozí sekci jsou projektory. Uvědomme si nejprve, že ačkoli volba pozorovatelné $T = I$ pro jednočásticový systém vůbec nijak zajímavá, platí pro ni

$$I_N^{\Sigma} = I \otimes \dots \otimes I + \dots + I \otimes \dots \otimes I = NI_{\mathcal{H}_N}, \quad (15)$$

takže pro součtový operátor máme

$$I^\oplus = \sum_{N=0}^{\infty} N E_{\mathcal{H}_N} \quad (16)$$

v silném smyslu (jedná se rovnou o spektrální rozklad). Protože N -částicové stavy jsou vlastními stavy příslušnými vlastní hodnotě N , jedná se o operátor celkového počtu částic. Jako zajímavost uvedme, že při přechodu od (15) k (16) operátory pozbyly omezenosti (v souladu s tím, že jejich normy nemají konečné supremum).

Podobně, pokud namísto I zvolíme ortogonální projektor E_φ na nějaký jednorozměrný podprostor $\mathcal{H}_1$, dostáváme operátor s významem pozorovatelné počtu částic v odpovídajícím stavu a platí, že celkový počet částic je roven součtu počtu částic ve stavech prvků nějaké ON báze $\mathcal{H}_1$, protože stejná relace platí mezi I_N^Σ a $(E_{\varphi_j})_N^\Sigma$ pro každé $N \in \mathbb{N}_0$.

Propagátory

Podobnou konstrukci jako pro pozorovatelné můžeme využít pro unitární operátory. Jediným rozdílem je, že je třeba začít s operátory

$$U_N^\Pi := U \otimes U \otimes \dots \otimes U, \quad U_0^\Pi := I \quad (17)$$

a z nich konstruovat (již stejně jako u pozorovatelných)

$$U^\Pi = \bigoplus_{N=0}^{\infty} U_N^\Pi = \overline{\sum_{N=0}^{\infty} U_N^\Pi}. \quad (18)$$

Tento operátor, jakožto direktní součet unitárních operátorů, je rovněž unitární. Snadno ověříme, že (4) jeho definiční obor oproti (1) nijak nezužuje, že skalární součin (2) se zachovává a že inverzí je $(U^{-1})^\Pi$. Je také redukován projekty na $\mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1)$, $\mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1)$.

Pokud za U dosadíme evoluční operátor jednočásticového systému, pak U^Π má význam vývoje soustavy neurčeného počtu takových identických, ale **neinteragujících** částic. Platí i více:

Věta (19.1.6). Nechť $U(\bullet)$ je SSUG na $\mathcal{H}_1$, jejímž generátorem je $H \in \mathcal{L}_{\text{sa}}(\mathcal{H}_1)$. Pak $U^\Pi: \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{F}(\mathcal{H})) : t \mapsto (U(t))^\Pi$ je SSUG na $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)$ generovaná operátorem $H^\oplus$, podobně $U_P^\Pi: t \mapsto (U(t))_P^\Pi$ je SSUG na $\mathcal{F}_P(\mathcal{H}_1)$ generovaná $H_P^\oplus$ pro $P \in \{S, A\}$.

Transformace $U(t) \mapsto U(t)^\Pi$ tedy jednočásticový propagátor zobrazí na propagátor vyhovující postulátu časového vývoje složeného systému a jeho odpovídající Hamiltonián je vskutku operátor celkové energie podle předchozí sekce.

Kreační a anihilační operátory – pevná báze

Součtové a součinnové operátory z minulé hodiny jsou redukovány projektory na podprostory Fockova prostoru o konstantních počtech částic, tedy na těchto prostorech operují nezávisle. Aby Fockův prostor byl více než jen současným zápisem variant chování složeného systému pro každou hodnotu N zvlášť, potřebujeme operátory, které působí napříč různými počty částic. Hlavní motivací je interakce mezi různými druhy částic, při které může docházet k jevům jako k pohlcení částice, vyzáření či její přeměně na částici jiného druhu. Popis takových přechodů je obvykle založen na kreačních a anihilačních operátorech.

V následujícím textu budeme vždy předpokládat, že jednočásticový stavový prostor $\mathcal{H}_1$ je separabilní prostor dimenze $d \leq \aleph_0$, $d \neq 0$. V tomto prostoru provedeme pevnou volbu ortonormální báze $(\varphi_j)_{j < d}$.

Obsazovací čísla

Kreační a anihilační operátory budou působit na symetrickém nebo antisymetrickém Fockově prostoru. Bude se nám hodit si sestavit nějakou bázi, ve které bude praktické pracovat. Z minulé hodiny máme bázi celého $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)$ tvaru všech tenzorových součinů všech možných kombinací N -tic bazových vektorů φ_j pro všechna $N \in \mathbb{N}_0$ (za prázdný tenzorový součin v případě $N = 0$ dosadíme vakuum Ω_0). Prvky této báze bychom mohli zobrazit odpovídajícími projektory S_N nebo A_N a získat tak nějakou totální množinu v odpovídajícím $\mathcal{F}_p(\mathcal{H}_1)$, ale ne ortonormální bázi: projektory skalární součin nezachovávají.

Připomeňme si definice:

$$S_N = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} U_\sigma, \quad A_N = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn } \sigma U_\sigma, \quad (1)$$

$$U_\sigma(\psi_1 \otimes \cdots \otimes \psi_N) = \psi_{\sigma(1)} \otimes \cdots \otimes \psi_{\sigma(N)}.$$

Jestliže toto pravidlo aplikujeme na bazové vektory tenzorového součinu $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$, dostaneme

$$U_\sigma(\varphi_{j_1} \otimes \varphi_{j_2} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_N}) = \varphi_{j_{\sigma(1)}} \otimes \varphi_{j_{\sigma(2)}} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_{\sigma(N)}}. \quad (2)$$

Vzhledem k tomu, že součet v definici S_N nebo A_N navštíví postupně všechny permutace indexů j_n , výsledek se nezmění (případně u A_N změní nejvýše znaménko), provedeme-li v N -tici $(j_1, \dots, j_N)$ jakoukoli permutaci. Je tedy výhodné všechny tyto permutace reprezentovat jediným prvkem, abychom zbytečně nedostávali lineárně závislé výsledky. Za tento reprezentativní prvek vezmeme uspořádanou N -tici

$$\hat{j} = (\hat{j}_1, \dots, \hat{j}_N), \quad \hat{j}_1 \leq \hat{j}_2 \leq \dots \leq \hat{j}_N \quad (3)$$

a její odpovídající tenzorový součin v bázi $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)$. Připomeňme, že čísla j_i (a potažmo $\hat{j}_i$) indexují prvky báze $\mathcal{H}_1$ a jsou tedy z množiny $\{j < d\}$.

Symetrizace

Uvažujme akci symetrizujícího projektoru S_N na vektor $\varphi_{j_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_N}$:

$$S_N(\varphi_{j_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_N}) = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \varphi_{j_{\sigma(1)}} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_{\sigma(N)}}. \quad (4)$$

V sumě na pravé straně stojí pouze tolik různých vektorů, kolik je různých přeuspořádání $\hat{j}$. Každý z těchto vektorů se obecně objeví opakovaně.

Z grupy $\mathcal{S}_N$ vezmeme podgrupu $H_{\hat{j}}$, která stabilizuje posloupnost $\hat{j}$ (tj. prohazuje pouze prvky, které měly stejnou hodnotu). Velikost této podgrupy je

$$\prod_{j < d} n_j!. \quad (5)$$

Podle H_j můžeme grupu $\mathcal{S}_N$ rozdělit na levé kosety tvaru xH_j . Protože každý z nich má velikost H_j , počet různých kosetů je

$$c = \frac{N!}{\prod_{j < d} n_j!}. \quad (6)$$

Toto číslo c představuje počet lineárně nezávislých prvků vystupujících na pravé straně (4). Každý z nich je přitom zastoupen v počtu (5) vyděleném podle předpisu (4) číslem $N!$, což dává hodnotu $1/c$. Podle Pythagorovy věty je tedy evidentní, že normalizaci můžeme provést faktorem $\sqrt{c}$. Označme

$$\varphi_N^{(S)}(\hat{j}) := \sqrt{c} S_N(\varphi_{\hat{j}_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_N}) = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{j < d} n_j!}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \varphi_{\hat{j}_{\sigma(1)}} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_{\sigma(N)}} \quad (7)$$

Vektory tvaru $\varphi_N^{(S)}(\hat{j})$ jsou **jednotkové**, pro různé neklesající posloupnosti $\hat{j}$ **ortogonální** a do jejich tvaru spadá aplikace S_N na libovolný z uvažovaných bázeových vektorů prostoru $\mathcal{H}_N$. Získáváme tak univerzální předpis konstrukce **ortonormální báze** prostoru $S_N \mathcal{H}_N$.

Již výše jsme použili, že neklesající posloupnosti $(\hat{j}_k)_{k=1}^N$ indexů $\hat{j}_k < d$ přísluší počet opakování n_j prvků $j < d$. Tato korespondence je oboustranná: k posloupnosti $\{n_j \mid j < d\}$, splňující

$$\forall j < d : n_j \in \mathbb{N}_0, \quad \sum_{j < d} n_j = N, \quad (8)$$

lze jednoznačně sestavit taková neklesající N -tice $\hat{j}$, kde postupně zařadíme n_j kopií každého čísla j . Můžeme tedy prvky $\varphi_N^{(S)}(\hat{j})$ ekvivalentně přeznačit pomocí takových posloupností *obsazovacích čísel*. Budeme používat značení se složenými závorkami

$$\varphi_N^{(S)}(\hat{j}) =: \Phi_S\{n_0, n_1, \dots\} \quad (9)$$

kde na pravé straně index N není potřeba, protože jeho hodnota je určena (8).

Antisymetrizace

Zopakujme nyní stejné kroky pro projektor A_N ,

$$A_N(\varphi_{\hat{j}_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_N}) = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn } \sigma \varphi_{\hat{j}_{\sigma(1)}} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_{\sigma(N)}}. \quad (10)$$

Hlavním rozdílem oproti S_N je, že opakuje-li se v posloupnosti $\hat{j}$ nějaká hodnota j více než jednou, dostaneme stejný vektor na pravé straně s koeficientem 0, protože podgrupa H_j má stejný počet prvků s kladným a se záporným znaménkem.

Do sumy proto stále přispívá stejný počet (6) ortogonálních vektorů, ale jejich celkové koeficienty jsou nulové, má-li $\hat{j}$ jakékoli opakování. Pokud nemá, zjednodušuje se c na $N!$, každý prvek sumy bude ortogonální na ostatní a objeví se se znaménkem $+1$ nebo -1 . Pravá strana má tak normu

$$\|A_N(\varphi_{\hat{j}_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_N})\| = \begin{cases} 1/\sqrt{N!} & \text{pokud } \hat{j} \text{ je ostře rostoucí,} \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases} \quad (11)$$

Ortonormální bázi prostoru $A_N \mathcal{H}_N$ tedy budeme konstruovat z vektorů

$$\varphi_N^{(A)} := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn } \sigma \varphi_{\hat{j}_{\sigma(1)}} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\hat{j}_{\sigma(N)}} \quad (12)$$

pro *ostře rostoucí* posloupnosti $\hat{j}$. (Pokud taková N -prvková posloupnost nelze sestavit, protože $N > \dim \mathcal{H}_1$, pak je také prostor $A_N \mathcal{H}_N$ prázdný.) Stejně jako u S_N můžeme zavést obsazovací čísla, která budou bez opakování členů vymezena na nulu a jedničku:

$$\varphi_N^{(A)}(\hat{j}) \leftrightarrow \Phi_A\{n_0, n_1, \dots\} : \quad (n_j) \in \{0, 1\}^d, \quad \sum_{j < d} n_j = N. \quad (13)$$

V obou případech jsme tedy získali ortonormální báze prostorů $S_N \mathcal{H}_N$, $A_N \mathcal{H}_N$ pro libovolné $N \in \mathbb{N}$. Víme, že každá dvojice těchto prostorů je v rámci $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)$ vzájemně ortogonální a také jsou všechny ortogonální na $\mathcal{H}_0 = S_0 \mathcal{H}_0 = A_0 \mathcal{H}_0$. Bázi Fockova prostoru tedy získáme jejich sjednocením a přidáním vakua, které popíšeme obsazovacími čísly $n_j = 0 \forall j < d$. Platí tedy

$$\left\{ \Phi_S \{n_0, n_1, \dots\} \mid n_j \in \mathbb{N}_0 \forall j < d, \sum_{j < d} n_j < \infty \right\} \text{ je ON báze } \mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1), \quad (14)$$

$$\left\{ \Phi_A \{n_0, n_1, \dots\} \mid n_j \in \{0, 1\} \forall j < d, \sum_{j < d} n_j < \infty \right\} \text{ je ON báze } \mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1). \quad (15)$$

Kreační a anihilační operátory – bazové vektory

Symetrický i antisymetrický Fockův prostor je tvořen direktním součtem prostorů tvaru $S_N \mathcal{H}_N$, resp. $A_N \mathcal{H}_N$, které jsou do něj vnořeny jako uzavřené vzájemně ortogonální podprostory. Můžeme tedy uvažovat zobrazení mezi nimi.

Pro naši zvolenou bázi φ_j kreační a anihilační operátory $\hat{a}^\dagger(\varphi_j)$, resp. $\hat{a}(\varphi_j)$ zavedeme **provizorně** jako zobrazení předepsaná právě takovými vztahy známými z každého kurzu kvantové mechaniky

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(\varphi_j) \Phi_S \{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \sqrt{n_j + 1} \Phi_S \{n_0, n_1, \dots, n_j + 1, \dots\}, \\ \hat{a}(\varphi_j) \Phi_S \{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \begin{cases} \sqrt{n_j} \Phi_S \{n_0, n_1, \dots, n_j - 1, \dots\}, & n_j \geq 1, \\ 0, & n_j = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (16)$$

pro symetrický případ a

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(\varphi_j) \Phi_A \{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \begin{cases} (-1)^{\sum_{i < j} n_i} \Phi_A \{n_0, n_1, \dots, n_j + 1, \dots\}, & n_j = 0, \\ 0, & n_j = 1, \end{cases} \\ \hat{a}(\varphi_j) \Phi_A \{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \begin{cases} (-1)^{\sum_{i < j} n_i} \Phi_A \{n_0, n_1, \dots, n_j - 1, \dots\}, & n_j = 1, \\ 0, & n_j = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (17)$$

pro antisymetrický, rozšířenými na *lineární obal* celé báze (14), resp. (15) (aby se jednalo o lineární zobrazení). Operátory $\hat{a}(\varphi_j)$, $\hat{a}^\dagger(\varphi_j)$ by také korektně měly mít označení S nebo A , ale jedná se bez indexu o tolik ustálené značení, že jej také nebudeme používat.

Tímto předpisem je pro každé φ_j , $j < d$ zadán operátor $\hat{a}^\dagger(\varphi_j)$, který pro každé $N \in \mathbb{N}_0$ zobrazuje hustou podmnožinu $\mathcal{H}_N$ do $\mathcal{H}_{N+1}$, a operátor $\hat{a}(\varphi_j)$, který působí v opačném směru. Nejedná se ještě o finální zápis – budeme se potřebovat oprostít od závislosti na pevné volbě báze $(\varphi_j)_{j < d}$. To si však ponecháme na příští hodinu a zakončíme doplněním některých vlastností konstrukce Fockova stavu a těchto provizorních operátorů.

Případ konečněrozměrného $\mathcal{H}_1$

Uvažujme jednočásticový stavový prostor $\mathcal{H}_1$ konečné dimenze, tedy $d < \omega$. Podmínka konečného součtu v (14) je pak automaticky splněna a bázi *symetrizovaného* Fockova prostoru lze psát v mnohem jednodušším tvaru, kde se pro lepší přehlednost vrátíme k indexaci od 1:

$$\{\Phi_S \{n_1, n_2, \dots, n_d\} \mid n_1, \dots, n_d \in \mathbb{N}_0\}. \quad (18)$$

Uvažujme nyní nějaký jiný, *nekonečněrozměrný* separabilní Hilbertův prostor $\mathcal{G}$, například $\mathcal{G} = L^2(\mathbb{R})$, s ortonormální bází $(e_0, e_1, e_2, \dots)$. Jeho d -násobný tenzorový součin sám se sebou $\mathcal{G}^{\otimes d}$ má bázi tvořenou všemi tenzorovými součiny d členů tvaru e_n , $n \in \mathbb{N}_0$. Zobrazení

$$\Phi_S \{n_1, \dots, n_d\} \mapsto e_{n_1} \otimes e_{n_2} \otimes \dots \otimes e_{n_d} \quad (19)$$

je evidentně izomorfizmem mezi $\mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1)$ a $\mathcal{G}^{\otimes d}$.

Tento postup dává možnost, jak si představit strukturu Fockova prostoru $\mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1)$. Obzvláště zajímavé je za $(e_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ vzít bázi vlastních stavů jednorozměrného lineárního harmonického oscilátoru. Potom totiž nejen prvky $\mathcal{G}^{\otimes d}$ lze brát velmi názorně jako funkce $L^2(\mathbb{R}^d)$, ale ještě akce kreačního či anihilačního operátoru (16) v tomto izomorfismu přesně odpovídá akci operátoru známého jako kreační či anihilační operátor harmonického oscilátoru. Fockův prostor nad d -rozměrným prostorem $\mathcal{H}_1$ a operace nad ním lze tedy velmi přirozeně popisovat jako složený systém d (rozlišitelných) harmonických oscilátorů.

Co se týká *antisymetrického* případu, situace je mnohem jednodušší. Tím, že obsazovací čísla jsou vymezena na nulu a jedničku, dokážeme všechny kombinace vyčerpat, například v posloupnosti binárních zápisů čísel:

$$(\Phi_A\{0, \dots, 0, 0\}, \Phi_A\{0, \dots, 0, 1\}, \Phi_A\{0, \dots, 1, 0\}, \Phi_A\{0, \dots, 1, 1\}, \dots, \Phi_A\{1, \dots, 1, 1\}) \quad (20)$$

Prostor $\mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1)$ je tedy konečněrozměrným prostorem dimenze 2^d , na který můžeme pohlížet jako na prostor d qubitů.

Nekonečněrozměrný $\mathcal{H}_1$

Pokud dimenze $\mathcal{H}_1$ je nekonečná (uvažujeme dle úvodu jen spočetně nekonečnou), předchozí analogie již *nelze použít*. V symetrickém případě by nás vedla na prostor funkcí nad $\mathbb{R}^{\mathbb{N}_0}$, který je neseparabilní a navíc nemá smysl v něm mluvit o L^2 normě, protože nemá Lebesgueovu míru (viz přednáška o Feynmanově integrálu). Nelze tedy již říci, že systém bosonů s nekonečně dimenzionálním jednočásticovým prostorem byl ekvivalentní soustavě harmonických oscilátorů.

Prostor nekonečně mnoha harmonických oscilátorů lze zavést metodami tenzorového součinu nekonečně mnoha prostorů (které jsme neprobírali) – předchozí odstavec ale říká, že mu již nelze rozumět jako prostoru funkcí. Dostaneme tak prostor nespočetné dimenze, tedy neseparabilní. Kde se obě konstrukce rozcházejí, je právě dodatečná podmínka na konečný celkový počet částic v (14). Pokud bychom ji nezařadili, kardinalita báze konstruované nad posloupnostmi $\{n_j\}_{j < d}$ by vskutku byla $\mathbb{N}_0^{\mathbb{N}_0}$, což je kontinuum. Stejně dopadne v tomto případě i antisymetrizovaný Fockův prostor – z konečné dimenze pro $d < \omega$ přeskóčí rovnou do nespočetné, pokud $d = \omega$. Dodatečná podmínka ale posloupnosti obsazovacích čísel vymezuje na spočetně mnoho možností, takže Fockův prostor zůstává separabilní.

Přímé zobecnění metod z předchozí sekce (uvažování soustavy harmonických oscilátorů, resp. dvouhladinových systémů) je tedy chybou v tom smyslu, že by dalo jiný stavový prostor než $\mathcal{F}_S(\mathcal{H}_1)$, resp. $\mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1)$. Není však takovou chybou, která by zneplatnila veškeré výsledky. Fockův prostor v tomto větším prostoru tvoří uzavřený podprostor, který žádné operace získané z jednočásticových pozorovatelných nebo interakcí konečného počtu částic nemohou opustit. Je tedy možné v této analogii pracovat, držíme-li na paměti, že fyzikální budou jen takové stavy, ke kterým lze dospět čistě z těch bázeových vektorů, v nichž celkový počet excitací harmonických oscilátorů, resp. počet excitovaných stavů dvouhladinových systémů, je konečné číslo.

Kreační a anihilační operátory – obecný případ a komutační relace

Na minulé hodině jsme předběžně zavedli kreační a anihilační operátory pro báze stavy nějaké pevně zvolené báze $(\varphi_j)_{j < d}$ prostoru $\mathcal{H}_1$, pro symetrizovaný i antisymetrizovaný Fockův prostor, jako lineární rozšíření vztahů

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(\varphi_j) \Phi_S\{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \sqrt{n_j + 1} \Phi_S\{n_0, n_1, \dots, n_j + 1, \dots\}, \\ \hat{a}(\varphi_j) \Phi_S\{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \begin{cases} \sqrt{n_j} \Phi_S\{n_0, n_1, \dots, n_j - 1, \dots\}, & n_j \geq 1, \\ 0, & n_j = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (1)$$

pro symetrický případ a

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(\varphi_j) \Phi_A\{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \begin{cases} (-1)^{\sum_{i < j} n_i} \Phi_A\{n_0, n_1, \dots, n_j + 1, \dots\}, & n_j = 0, \\ 0, & n_j = 1, \end{cases} \\ \hat{a}(\varphi_j) \Phi_A\{n_0, n_1, \dots, n_j, \dots\} &= \begin{cases} (-1)^{\sum_{i < j} n_i} \Phi_A\{n_0, n_1, \dots, n_j - 1, \dots\}, & n_j = 1, \\ 0, & n_j = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

pro antisymetrický.

Protože definiční obor získaný pouhým lineárním rozšířením vztahů výše dává zbytečně omezený prostor a protože vzorce (1), (2) jsou příliš silně spjaty s konkrétní volbou báze na $\mathcal{H}_1$, podíváme se, zda by nemělo smysl dodefinovat na některé další prvky hodnotu limitou. Za tímto účelem se rozepíšeme jiným způsobem

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(\varphi_j) S_N(\varphi_{j_1} \otimes \dots \otimes \varphi_{j_N}) &= \hat{a}^\dagger(\varphi_j) \sqrt{\frac{\Pi_{k < d} n_k!}{N!}} \Phi_S\{n_1, n_2, \dots\} = \sqrt{\frac{(n_j + 1) \Pi_{k < d} n_k!}{N!}} \Phi_S\{n_1, n_2, \dots, n_j + 1, \dots\} \\ &= \sqrt{\frac{\Pi_{k < d} \tilde{n}_k!}{(N + 1)!}} \sqrt{N + 1} \Phi_S\{n_1, n_2, \dots, n_j + 1, \dots\} = \sqrt{N + 1} S_{N+1}(\underbrace{(\varphi_j \otimes \dots \otimes \varphi_{j_1})}_{\tilde{\varphi}_j} \otimes \dots \otimes \varphi_{j_N}), \end{aligned} \quad (3)$$

kde $\tilde{n}_k$ značí posloupnost n_k s j -tým členem zvýšeným o 1 (jejímž součtem je $N + 1$). Tato rovnice nabízí potenciál pro zobecnění, kdy by členy tenzorového součinu ani argument v $\hat{a}^\dagger(\varphi)$ nebyly vymezeny na báze stavy. Skutečně, to je rovnost, se kterou se setkáváme jako s definicí (19.2.6a) a na základě linearit tenzorového součinu a projektorů S_N, S_{N+1} se snadno přesvědčíme, že je korektní.

Pro symetrizovaný Fockův prostor je irelevantní, zda člen φ_j přidáme v (3) na začátek nebo na konec tenzorového součinu, ale v případě $\mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1)$ je s volbou znamének v (2) (danou zvoleným pořadím vektorů v bázi) konzistentní jen přidání na začátek, protože A_N mění znaménko při prohození prvků tenzorového součinu. Výpočet se tím poněkud zkomplikuje, podívejme se na něj za předpokladu $n_j = 0$:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(\varphi_j) A_N(\varphi_{j_1} \otimes \dots \otimes \varphi_{j_N}) &= \text{sgn}(j_1, j_2, \dots, j_N) \hat{a}^\dagger(\varphi_j) A_N(\varphi_{\hat{j}_1} \otimes \dots \otimes \varphi_{\hat{j}_N}) \\ &= \text{sgn}(j_1, j_2, \dots, j_N) \hat{a}^\dagger(\varphi_j) \frac{1}{\sqrt{N!}} \Phi_A\{n_1, n_2, \dots\} = \text{sgn}(j_1, j_2, \dots, j_N) \frac{(-1)^{\sum_{i < j} n_i}}{\sqrt{N!}} \Phi_A\{n_1, n_2, \dots, n_j + 1, \dots\} \\ &= \text{sgn}(j_1, j_2, \dots, j_N) \frac{(-1)^{\sum_{i < j} n_i}}{\sqrt{N!}} \sqrt{(N + 1)!} A_{N+1}(\underbrace{(\varphi_{\hat{j}_1} \otimes \dots \otimes \varphi_{\hat{j}_j} \otimes \dots \otimes \varphi_{\hat{j}_N})}_{\substack{\sum_{i < j} n_i \text{ členů} - \text{každý přeskočíme za } -1}}) \\ &= \text{sgn}(j_1, j_2, \dots, j_N) \sqrt{N + 1} A_{N+1}(\underbrace{(\varphi_j \otimes \dots \otimes \varphi_{j_1})}_{\tilde{\varphi}_j} \otimes \dots \otimes \varphi_{j_N}) \\ &= \sqrt{N + 1} A_{N+1}(\underbrace{(\varphi_j \otimes \dots \otimes \varphi_{j_1})}_{\tilde{\varphi}_j} \otimes \dots \otimes \varphi_{j_N}), \end{aligned} \quad (4)$$

kde znaménko částečné permutace $(j_1, \dots, j_N)$ se objevilo za přerovnání (j_i) na $(\hat{j}_i)$ a zmizelo při provedení stejné záměny nazpět v posledním kroku. Poslední získaný tvar je použitelný i v případě $n_j = 1$, protože potom na pravé straně vznikne tenzorový součin obsahující φ_j dvakrát a operátor A_{N+1} jej zobrazí na nulu, což je konzistentní s (2). Opět tak získáváme vzorec, který je možné okamžitě zobecnit i mimo báze vektory φ_j .

Co se týká zobecnění anihilačního operátoru z formy (1), (2) na formu podobnou (3), (4), předvedeme si možnou

jeho logiku na symetrizovaném případě. Začneme tedy stejně, pro $N \geq 1$

$$\begin{aligned}
\dot{a}(\varphi_j) S_N(\varphi_{j_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_N}) &= \dot{a}(\varphi_j) \sqrt{\frac{\Pi_{k < d} n_k!}{N!}} \Phi_S\{n_1, n_2, \dots\} = \sqrt{\frac{\Pi_{k < d} n_k!}{N!}} \sqrt{n_j} \Phi_S\{n_1, n_2, \dots, n_j - 1, \dots\} \\
&= \sqrt{\frac{\Pi_{k < d} n_k!}{N!}} \sqrt{n_j} \sqrt{\frac{(N-1)!}{\Pi_{k < d} \tilde{n}_k}} S_{N-1}(\varphi_{j_1} \otimes \varphi_{j_2} \otimes \cdots \otimes \cancel{\varphi_j} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_N}) \quad (\tilde{n}_k = n_k - \delta_{kj}) \\
&= \frac{n_j}{\sqrt{N}} S_{N-1}(\varphi_{j_1} \otimes \varphi_{j_2} \otimes \cdots \otimes \cancel{\varphi_j} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_N})
\end{aligned} \tag{5}$$

Poslední řádka má pro odpoutání se od báзовých stavů problém, že odkazuje na hodnotu n_j , která je vlastností konkrétního vstupního stavu na levé straně, a že obsahuje operaci „škrtnout ten správný člen“. Nicméně n_j je zrovna počet opakování hodnoty j v posloupnosti $j_1, j_2, \dots, j_N$. Obou problémů se tedy elegantně zbavíme tak, že budeme počítat přes všechny členy tenzorového součinu a započítáme jen ty, kde se j_k s j shoduje:

$$\cdots = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N \delta_{j,j_k} S_{N-1}(\varphi_{j_1} \otimes \varphi_{j_2} \otimes \cdots \otimes \cancel{\varphi_{j_k}} \otimes \cdots \otimes \varphi_{j_N}) \tag{6}$$

Posledním krokem je nahrazení δ_{j,j_k} skalárním součinem $(\varphi_j, \varphi_{j_k})$, který má stejnou hodnotu, ale již dává správný zobecnitelný předpis, tedy lineární v proměnných φ_{j_1} až φ_{j_N} a antilineární v proměnné φ (protože φ vystupuje na levé straně skalárního součinu). Dostáváme tak předpis (19.2.6b) s $P = S$.

Antisymetrický případ je potom kombinací tohoto postupu s myšlenkami použitými v odvození (4). Pro $N = 0$ stačí v obou situacích zobecnit $a(\varphi)\Omega_0 = 0$ na libovolné φ .

Definiční obor takto zobecněných operátorů $a(\varphi)$, $a^\dagger(\varphi)$ pak lze psát jako

$$\mathcal{D}_P = \{P_N(\psi_1 \otimes \cdots \otimes \psi_N) \mid \psi_1, \dots, \psi_N \in \mathcal{H}_1, N \in \mathbb{N}_0\}_{\text{lin}} = \sum_{N=0}^{\infty} P_N \mathcal{H}_1^{\otimes N}. \tag{7}$$

Navíc platí, jakožto zobrazení z $\mathcal{H}_1$ do $\mathcal{L}(\mathcal{F}(\mathcal{H}_1))$,

- $a^\dagger(\psi)$ je lineární v proměnné ψ ,
- $a(\psi)$ je ve stejné proměnné antilineární.

Platí tedy rozklad (19.2.10a,b) do „bázových“ kreačních a anihilačních operátorů

$$a^\dagger(\psi) \Phi = \sum_{k < d} (\varphi_k, \psi) a^\dagger(\varphi_k) \Phi, \quad a(\psi) \Phi = \sum_{k < d} (\psi, \varphi_k) a(\varphi_k) \Phi, \tag{8}$$

pro všechny stavy $\Phi \in \mathcal{D}_P$, kde $a^\dagger(\varphi_k)$ a $a(\varphi_k)$ jsou lineární rozšíření (1), (2) na obor $\mathcal{D}_P$. Řady konvergují v normě Fockova prostoru.

Operátory $a^\dagger(\psi)$ a $a(\psi)$ potom nazýváme kreační a anihilační operátory obecného stavu $\psi \in \mathcal{H}_1$.

Poznámka: Záměrně používám symbol $\dagger$, aby nedošlo k představě, že se jedná o dva vzájemně sdružené operátory. **Není tomu tak**, ani kreační ani anihilační operátor nejsou uzavřené a tedy nemohou být sdružením jeden druhého. Je však možno říci, že jsou zúženými nějakých větších sdružených operátorů na $\mathcal{D}_P$. Pro antisymetrický případ jsou ale $a, a^\dagger$ omezené operátory a mají tedy spojitá rozšíření na celé $\mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1)$, tato vzájemně sdruženými operátory jsou.

Komutační relace

Díky tomu, že na základě definic (19.2.6a,b,c) zobrazují kreační a anihilační operátory libovolného stavu obor $\mathcal{D}_P$ sám do sebe, má smysl na těchto vektorech je zcela libovolně skládat. Především je důležitý vztah (19.2.7)

$$P_N(\psi_1 \otimes \psi_2 \otimes \cdots \otimes \psi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} a^\dagger(\psi_1) a^\dagger(\psi_2) \cdots a^\dagger(\psi_N) \Omega_0, \tag{9}$$

který umožňuje nagenarovat zcela libovolný vektor $\Phi \in \mathcal{D}_P$ konečnou lineární kombinací vektorů získaných působením kreačních operátorů na vakuum.

Nejméně stejnou důležitost potom mají komutační relace (19.2.11a,b)

$$\begin{aligned} [a(\psi), a(\varphi)]_P \Psi &= 0, \\ [a^\dagger(\psi), a^\dagger(\varphi)]_P \Psi &= 0, \\ [a(\psi), a^\dagger(\varphi)]_P \Psi &= (\psi, \varphi) \Psi \end{aligned} \quad (10)$$

pro každou dvojici $\psi, \varphi \in \mathcal{H}_1$ a každé $\Psi \in \mathcal{D}_P$, kde hranatá závorka značí *komutátor* či *antikomutátor*

$$[X, Y]_S \stackrel{\text{ozn.}}{=} [X, Y] = XY - YX, \quad [X, Y]_A \stackrel{\text{ozn.}}{=} \{X, Y\} \stackrel{\text{ozn.}}{=} [X, Y]_+ = XY + YX, \quad (11)$$

jehož smysluplnost je *při aplikaci na* Ψ opět zaručena citovanou invariancí množiny $\mathcal{D}_P$.

Operátorový zápis komutačních relací, se kterým se běžně setkáváme ve fyzikální literatuře (tedy bez vektoru Ψ), je oprávněný v případě $P = A$, kdy kreační i anihilační operátory jsou omezené a platnost rovnic (10) tak můžeme spojitě rozšířit z hustého podprostoru $\mathcal{D}_A$ na celé $\mathcal{F}_A(\mathcal{H}_1)$.

V případě $P = S$ tomu ovšem brání stejné argumenty jako v případě operátorů polohy a hybnosti a tudíž je takový krok neoprávněný. Lze ovšem použít stejný trik jako tamtéž: najít nějaké funkce těchto operátorů, které budou omezené a budeme tedy moci operovat na celém Fockově prostoru. Poslední část této přednášky tedy budeme věnovat již pouze symetrickému případu.

Segalův polní operátor a Fockova reprezentace

Za zmíněným účelem se zavádí pro libovolné $\psi \in \mathcal{H}_1$ *Segalův polní operátor*

$$\Phi_S(\psi) := \frac{1}{\sqrt{2}}(a(\psi) + a^\dagger(\psi)), \quad (12)$$

který je v podstatě samosdružený (19.3.1) a definuje tedy nějakou pozorovatelnou na Fockově prostoru. Je důležité vědět, že kvůli rozdílným chováním $a(\psi)$ a $a^\dagger(\psi)$ vzhledem k násobení argumentu skalárem není $\Phi_S(\psi)$ ve svém argumentu ani lineární, ani antilineární. Rovnice

$$\Phi_S(\mu\psi) = \mu\Phi_S(\psi), \quad (13)$$

platí pouze pokud $\mu \in \mathbb{R}$: operátory $\Phi_S(\psi)$ a $\Phi_S(i\psi)$ jsou na sobě nezávislé. Konkrétně platí:

$$\Phi_S(i\psi) = \frac{-i}{\sqrt{2}}(a(\psi) - a^\dagger(\psi)). \quad (14)$$

Rovnice (10) implikují podobnou relaci pro tyto operátory (19.3.1):

$$[\Phi_S(\varphi), \Phi_S(\psi)]\Psi = i \operatorname{Im}(\varphi, \psi) \Psi, \quad \forall \varphi, \psi \in \mathcal{H}_1, \forall \Psi \in \mathcal{D}_S. \quad (15)$$

Zejména při volbě φ jednotkového vektoru a $\psi = i\varphi$ dostáváme

$$[\Phi_S(\varphi), \Phi_S(i\varphi)]\Psi = i\Psi, \quad \forall \varphi \in \mathcal{H}_1, \forall \Psi \in \mathcal{D}_S, \quad (16)$$

což nápadně připomíná kanonické komutační relace polohy a hybnosti. Je tedy zcela oprávněné se ptát, jestli se *pozorovatelné* $\Phi_S(\psi)$ a $\Phi_S(i\psi)$ nedají takto v nějakém smyslu interpretovat.

Přesně k takové otázce máme připraven Stone–von Neumannův teorém. Zkusme tedy, jak se chovají unitární grupy generované touto dvojicí pozorovatelných pro různá ψ , to znamená například v naší referenční bázi $\mathcal{H}_1$

$$U_j(t) := \exp(it\overline{\Phi_S(\varphi_j)}), \quad V_j(t) := \exp(it\overline{\Phi_S(i\varphi_j)}), \quad j < d. \quad (17)$$

Jestliže budeme citovat už jen nejdůležitější výsledky, věta 19.3.3 ukazuje, že tyto operátory pro každé $j, k < d$ a každé $t, s \in \mathbb{R}$ splňují (19.3.10)

$$\begin{aligned} U_j(t)U_k(s) &= U_k(s)U_j(t), \\ V_j(t)V_k(s) &= V_k(s)V_j(t), \\ U_j(t)V_k(s) &= e^{-i\delta_{jk}ts}V_k(s)U_j(t), \end{aligned} \tag{18}$$

a 19.3.2, že tvoří ireducibilní množinu.

V případě konečné dimenze $\mathcal{H}_1$ a indexace od jedničky z komutujících operátorů $\{U_j(t) \mid 1 \leq j \leq d\}$ můžeme sestavit součin

$$U(\mathbf{t}) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)) : \mathbf{t} \mapsto U_1(t_1)U_2(t_2)\cdots U_d(t_d) \tag{19}$$

a analogicky $V(\mathbf{t})$, poslední z rovnic (18) potom přechází do tvaru, který známe jako Weylovu relaci. Stone–von Neumannův teorém potom říká, že existuje unitární ekvivalence mezi $U_j(t)$, $V_k(s)$ a exponenciálami operátorů složek polohy a hybnosti na $L^2(\mathbb{R}^d)$.

Z minulé hodiny víme, že pro d -rozměrný prostor $\mathcal{H}_1$ právě takovýto stavový prostor $L^2(\mathbb{R}^d)$ je s $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1)$ svázán jednoduchou bijekcí báзовých vektorů: přesně toto unitární zobrazení je takové, jakého existenci Stone–von Neumannova věta předpovídá. Pod stejným zobrazením jsou unitárně ekvivalentní také grupové generátory na obou prostorech, takže uzavřené Segalovy operátory $\Phi_S(\psi_j)$ a $\overline{\Phi_S(i\psi_j)}$ v konečněrozměrném případě skutečně odpovídají přesně pozorovatelným složek polohy a hybnosti soustavy harmonických oscilátorů, kterou jsme minule získali.

Pro $\mathcal{H}_1$ nekonečné dimenze předpoklady Stone–von Neumannovy věty splněné nejsou. V takové situaci mohou vznikat – a vznikají – ireducibilní reprezentace zobecněných Weylových relací (18), které nejsou unitárně ekvivalentní ani mezi sebou vzájemně, natož pak polohám a hybnostem nějakého systému. Reprezentace Weylových relací pomocí exponenciál (17), která v důsledku toho má obecnější vlastnosti než Schrödingerova reprezentace, se nazývá jejich *Fockovou reprezentací*.