MASARYKOVA UNIVERZITA
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
ÚSTAV TEORETICKÉ FYZIKY A ASTROFYZIKY

Bakalářská práce

BRNO 2014 NIKOLA KOUTNÁ

MASARYKOVA UNIVERZITA
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
ÚSTAV TEORETICKÉ FYZIKY A ASTROFYZIKY

Funkcionální analýza a kvantová fyzika

Bakalářská práce

Nikola Koutná

Vedoucí práce: prof. RNDr. Ondřej Došlý, DrSc. **Brno 2014**

Bibliografický záznam

Autor:	Nikola Koutná Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita Ústav teoretické fyziky a astrofyziky
Název práce:	Funkcionální analýza a kvantová fyzika
Studijní program:	Fyzika
Studijní obor:	Fyzika
Vedoucí práce:	prof. RNDr. Ondřej Došlý, DrSc.
Akademický rok:	2013/2014
Počet stran:	ix + 42
Klíčová slova:	Hilbertův prostor; symetrický, samoadjungovaný, kompaktní a unitární operátor; Hamiltonián; perturbační teorie; Schrödingerova, Heisenbergova a interakční reprezentace

Bibliographic Entry

Author:	Nikola Koutná Faculty of Science, Masaryk University Department of Theoretical Physics and Astrophysics
Title of Thesis:	Functional Analysis and Quantum Physics
Degree Programme:	Physics
Field of Study:	Physics
Supervisor:	prof. RNDr. Ondřej Došlý, DrSc.
Academic Year:	2013/2014
Number of Pages:	ix + 42
Keywords:	Hilbert space; symmetric, selfadjoint, unitary and compact operators; Hamiltonian; perturbation theory; Schrödinger, Heisenberg and interaction picture

Abstrakt

Bakalářská práce se zaměřuje na spektrální vlastnosti kompaktních, symetrických a samoadjungovaných operátorů na Hilbertově prostoru vedoucí k základům operátorového počtu, jehož se v kvantové mechanice využívá při studiu Schrödingerovy rovnice. Klíčové výsledky teorie jsou ilustrovány na jedné z přibližných metod řešení Schrödingerovy rovnice, a to perturbační teorii pro časově závislé i nezávislé Hamiltoniány. Pozornost je věnována také kvantově mechanickým reprezentacím, zejména reprezentaci interakční, která se ukazuje jako nejvhodnější rámec výpočtů časově závislé perturbační teorie.

Abstract

The thesis is devoted to spectral properties of compact, symmetric and selfadjoint operators in a Hilbert space. This leads to the fundamentals of operator calculus which is used to study Schrödinger equation in quantum mechanics. Crucial theoretical results are illustrated in perturbation theory for time dependent and time independent Hamiltonians, which is one of approximative methods for solving Schrödinger equation. We also focus on quantum mechanics pictures, particularly the interaction one, because it is apparently the most suitable one for time dependent perturbation theory calculations.

Masarykova univerzita

Přírodovědecká fakulta

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student: **Nikola Koutná**

Studijní program: **Fyzika**
Studijní obor: **Fyzika**

Ředitel Ústavu fyzikální elektroniky PřF MU Vám ve smyslu Studijního a zkušebního řádu MU určuje bakalářskou práci s tématem:

Funkcionální analýza a kvantová fyzika

Functional analysis and quantum physics

Oficiální zadání: Vypracujte text zaměřený na aplikaci vybraných partií teorie symetrických a samoadjungovaných operátorů v Hilbertově prostoru v kvantové fyzice, zejména při studiu jednorozměrné Schrodingerovy rovnice. Základním východiskem budou monografie G. Teschla a A. Pankova, kde se problematika prezentuje z matematického pohledu. Další literaturou bude kniha N. Zettiliho, kde se zaměřte na výsledky uvedené v kapitolách 9 a 10.

Doporučená literatura
PANKOV, Aleksandr Andrejevič. Lecture notes on Schrödinger equations. New York [N.Y.] .: Nova Science, 2007. x, 187 s. ISBN 9781600214479.,
TESCHL, Gerald. Mathematical methods in quantum mechanics :with applications to Schrödinger operators. Providence, R.I.: American Mathematical Society, 2009. xiv, 305 p. ISBN 978-0-8218-4660-5.,
ZETTILI, Nouredine. Quantum mechanics :concepts and applications. Chichester: John Wiley & Sons, 2001. xiv, 649 s. ISBN 0-471-48944-1.:

Jazyk závěrečné práce: český
Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Ondřej Došlý, DrSc.
Podpis vedoucího práce:
Konzultant:
Datum zadání bakalářské práce: listopad 2013

V Brně dne 13. 3. 2014

Prof. RNDr. Mirko Černák, CSc.
ředitel Ústavu fyzikální elektroniky

Zadání bakalářské práce převzal dne: 17.3.2014 Podpis studenta

Poděkování

Na tomto místě bych ráda poděkovala prof. RNDr. Ondřeji Došlému, DrSc. za veškerý čas, který mi věnoval, za cenné rady, připomínky a celkový velmi vstřícný přístup. Dále děkuji svojí rodině za velkou podporu při studiu a přátelům za technickou pomoc.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svoji bakalářskou práci vypracovala samostatně s využitím informačních zdrojů, které jsou v práci citovány.

Brno 23. května 2014 ....

Nikola Koutná

Obsah

Úvod

V předložené bakalářské práci se zaměřuji především na takové vlastnosti kompaktních, symetrických a samoadjungovaných operátorů na Hilbertově prostoru, které hrají důležitou roli v kvantové mechanice, tedy zejména na vlastnosti spektrální. Aplikaci těchto poznatků se snažím ilustrovat na přibližné metodě řešení Schrödingerovy rovnice. Práce je rozdělena na dvě části. V první části je problematika prezentována z matematického pohledu, vychází tedy zejména z [3], [5], [8] a [9], druhá část navazuje perturbační teorií, jakožto přímou fyzikální aplikací, a čerpá z [2], [4] a [10].

V úvodních dvou kapitolách první části, v nichž jsem čerpala převážně z [3], [5] a [9], zavádím pojem abstraktního Hilbertova prostoru, dále popisuji geometrii Hilbertova prostoru a základní vlastnosti operátorů na něm působících. Definuji unitární, symetrické, samoadjungované, normální a kompaktní operátory, zabývám se jejich vzájemnými vztahy a uvádím důležité příklady tříd kompaktních operátorů zmíněné v [5] i [9]. V následující kapitole se věnuji základům spektrální teorie a formuluji její stěžejní výsledky, jimiž jsou Hilbertova-Schmidtova spektrální věta pro kompaktní samoadjungované operátory a její zobecněná verze pro spojité samoadjungované operátory, jejichž spektrum může být obecně mnohem komplikovanější. Zde se pomocí konstrukce souboru ortogonálních projekcí nazývaných obvykle rozkladem identity či spektrální třídou samoadjungovaného operátoru dostávám k závažnému tvrzení operátorového počtu, které lze již přímo využít v kvantové mechanice při řešení Schrödingerovy rovnice. V této, podobně jako i v závěrečné kapitole první části, čerpám zejména z [3] a [8]. Za předpokladu znalosti počátečního stavu kvantově mechnického systému ukazuji, že stav systému v obecném čase t je unitání transformací stavu počátečního, přičemž unitární operátory, jimiž jsou tyto transformace reprezentovány tvoří tzv. silně spojitou jednoparametrickou unitární grupu generovanou Hamiltoniánem. Takto se dostávám ke Schrödingerově rovnici.

Druhá část je zaměřena na jednu z přibližných metod řešení Schrödingerovy rovnice, a to nejdříve na jednodušší časově nezávislou, poté i na časově závislou perturbační teorii. V kapitole, v níž se zabývám časově nezávislou perturbační teorií, řeším jak problém nedegenerovaného, tak také degenerovného spektra neperturbovaného Hamiltoniánu. Na příkladu dvou blízkých hladin ukazuji, že metody časově nezávislé perturbační teorie lze na základě jistého triku použít i v tomto případě. Abych mohla ukázat co nejelegantnější řešení ústředního problému časově závislé perturbační teorie, věnuji se teorii kvantově mechanických reprezentací. Zde vycházím zejména z [4]. Popisuji pohybové rovnice a transformační vztahy stavových vektorů a operátorů ve Schrödingerově, Heisenbergově a interakční reprezentaci. Poslední zmiňovanou reprezentaci poté používám k výpočtu pravděpodobnosti přechodu mezi vlastními stavy kvantově mechanického systému. Na závěr ukazuji konkrétní výpočet pravděpodobnosti přechodu, a to pro konstantní a harmonické perturbace, s nimiž se lze velmi často setkat v praxi.

Přehled použitého značení

Pro snazší orientaci v textu předkládám přehled základního značení, které se v celé práci vyskytuje.

$\mathbb{N}$	množina všech přirozených čísel
$\mathbb{Z}$	množina všech celých čísel
$\mathbb{Q}$	množina všech racionálních čísel
$\mathbb{R}$	množina všech reálných čísel
$\mathbb{C}$	množina všech komplexních čísel
$C([a,b])$	prostor všech spojitých funkcí na intervalu $[a,b]$
$\to$	konverguje
$\Rightarrow$	implikuje
δ_{ij}	Kroneckerovo delta
$\delta(x)$	Diracova delta funkce
$\overline{X}$	uzávěr množiny X
$\mathrm{Lin}\{X\}$	lineání obal množiny X
$X \oplus Y$	direktní součet prostorů X a Y
$X \otimes Y$	tenzorový součin prostorů X a Y
X'	duální prostor k prostoru X
A^*	adjungovaný operátor k operátoru A

Kapitola 1

Spektrální vlastnosti operátorů na Hilbertově prostoru

1.1 Geometrie Hilbertova prostoru

Začněme definicí konfiguračního prostoru v kvantové mechanice, jímž je komplexní *Hilbertův prostor*. Budeme uvažovat lineární prostor $\mathcal{H}$ nad $\mathbb{R}$, resp. $\mathbb{C}$ a pozitivně definitní sesquilineární formu $\langle .,. \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$, která je antilineární v první a lineární ve druhé složce. Tato forma na prostoru $\mathcal{H}$ indukuje normu $\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle}$ a metriku $\rho(\psi, \varphi) = \|\psi - \varphi\| = \sqrt{\langle \psi - \varphi, \psi - \varphi \rangle}$, kde $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$. Je-li prostor $\mathcal{H}$ vzhledem k této normě úplný[1], budeme jej nazývat Hilbertův. Jinými slovy: Hilbertův prostor je takový Banachův[2] prostor, jehož norma je odvozena ze skalárního součinu. Možné stavy ψ kvantově mechanického systému jsou pak reprezentovány přímkami, resp. jednodimenzionálními podprostory Hilbertova prostoru, přičemž je výhodné tyto stavy normovat: $\|\psi\| = 1$.

Nyní uvedeme několik nejjednodušších příkladů Hilbertových prostorů.

Příklad 1.1 (Hilbertovy prostory)**.**

1. Prostor $\mathbb{R}^n$, resp. $\mathbb{C}^n$ s běžným skalárním součinem $\langle \psi, \varphi \rangle = \sum_{i=1}^{n} \overline{\psi_i} \varphi_i$, kde číslo $\overline{\psi_i}$ je komplexně sdružené k číslu ψ_i, je Hilbertův prostor.

2. Lebesgueovy prostory $L^p(M, d\mu)$, kde reálné číslo $1 \leq p \leq \infty$, jsou Banachovy prostory. Připomeňme, že $L^p(M, d\mu)$ je množina funkcí lebesgueovsky integrovatelných v p-té mocnině na (lebesgueovsky) měřitelné množině M a $d\mu$ je Lebesgueova míra. Přesněji řekněme, že $L^p(M, d\mu)$ jsou třídy ekvivalentních funkcí s normou

$$\|\psi\|_p = \left(\int_M |\psi(x)|^p d\mu \right)^{\frac{1}{p}} < \infty,$$

přičemž tato ekvivalence znamená, že funkce se mohou lišit pouze na množině Lebesqueovy míry nula. Speciálně pro $p = 2$ jsou tyto prostory Hilbertovy a norma je indukována skalárním součinem

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \int_M \overline{\psi(x)} \varphi(x) d\mu(x).$$

V kvantové mechanice pracujeme zejména na prostoru $L^2(\mathbb{R}^3)$.

[1] Úplný je takový prostor, v němž má každá cauchyovská posloupnost limitu.

[2] Připomeňme, že Banachovým prostorem rozumíme každý normovaný lineární prostor, který je v příslušné metrice definované normou úplný.

3. Množina $l^p(\mathbb{N})$ posloupností $x = \{x\}_{i=1}^{\infty}$ takových, že

$$\|x\|_p = \sum_{i=1}^{\infty} |x_i|^p < \infty,$$

je Banachův prostor. Prostor $l^p(\mathbb{N})$ lze přirozeně chápat jako speciální případ prostoru $L^p(M, d\mu)$ pro množinu $M = \mathbb{R}$ a μ sumu Diracových měr[3]. Pro $p = 2$ dostaneme prostor $l^2(\mathbb{N})$, což už je Hilbertův prostor, na němž je skalární součin zaveden obdobně jako v $L^2(\mathbb{R}^3)$, rozdíl je pouze v sumě namísto integrálu, tj. $\langle x, y\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \overline{x_i} y_i$.

Poznamenejme, že každý Hilbertův prostor obsahující spočetnou hustou množinu[4], který není konečně dimenzionální, je izomorfní prostoru $l^2(\mathbb{N})$ (důkaz viz např. [6]). Prostor $l^2(\mathbb{N})$ je tedy kanonickým příkladem Hilbertova prostoru.

Lze snadno ukázat, že skalární součin i jím indukovaná norma na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ jsou (dokonce stejnoměrně) spojitá zobrazení. Protože na $\mathcal{H}$ máme skalární součin, lze přirozeně zavést pojmy jako *ortogonalita prvků* či *ortogonální doplněk* $A^\perp$ podmnožiny $A \subseteq \mathcal{H}$. Zřejmě platí, že jediný prvek kolmý na celý prostor $\mathcal{H}$ je nulový, tj. $\mathcal{H}^\perp = \{\mathbf{0}\}$. Ortogonální doplněk $A^\perp$ je jistě lineární podprostor $\mathcal{H}$ a ze spojitosti skalárního součinu (resp. známé Cauchyovy-Schwartzovy nerovnosti, kterou splňují libovlné dva prvky prostoru se skalárním součinem) plyne i jeho uzavřenost. Jestliže totiž $x_n \to x$, kde $x_n, x \in A^\perp$, a $\psi \in \mathcal{H}$, pak z odhadu

$$|\langle x_n, \psi\rangle - \langle x, \psi\rangle| = |\langle x_n - x, \psi\rangle| \leq \|x_n - x\| \|\psi\|$$

plyne $\langle x_n, \psi\rangle \to \langle x, \psi\rangle$, a $A^\perp$ je tedy uzavřený podprostor $\mathcal{H}$.

Nyní uvažujme vektor $\psi \in \mathcal{H}$, jeho projekci do směru jednotkového vektoru φ označme $\psi_\parallel$ a vektor kolmý k této projekci $\psi_\perp$. Jistě platí

$$\psi_\parallel = \langle \varphi, \psi\rangle \varphi, \qquad \psi_\perp = \psi - \psi_\parallel$$

a vektor $\psi_\perp$ je také kolmý k φ, neboť

$$\langle \varphi, \psi_\perp\rangle = \big\langle \varphi, \psi - \langle \varphi, \psi\rangle \varphi \big\rangle = \langle \varphi, \psi\rangle - \langle \varphi, \psi\rangle \langle \varphi, \varphi\rangle = 0.$$

Vezmeme-li nějaký k-násobek vektoru φ a spočítáme-li kvadrát jeho vzdálenosti od vektoru ψ. dostaneme

$$\|\psi - k\varphi\|^2 = \Big\|\psi_\perp + (\psi_\parallel - k\varphi)\Big\|^2 = \|\psi_\perp\|^2 + |\langle \varphi, \psi\rangle - k|^2,$$

z čehož je již vidět, že $\psi_\parallel$ je jednotkový vektor rovnoběžný s φ, který je nejbližší k ψ. Zde jsme využili triviální analogie Pythagorovy věty:

$$\|\xi + \eta\|^2 = \|\xi\|^2 + \|\eta\|^2, \qquad \xi \perp \eta.$$

Předchozí jednoduché výsledky lze zobecnit i na případ, kdy nemáme jen jeden vektor, ale celou ortonormální množinu.

[3] Buď X neprázná množina a $x \in X$ její prvek. Pak na σ-algebře $P(X)$ všech podmožin množiny X zaveďme *Diracovu míru* δ_x tak, že

$$\delta_x(X) = \begin{cases} 0, & x \notin X \\ 1, & x \in X. \end{cases}$$

[4] Takovému Hilbertovu prostoru budeme později říkat separabilní.

Věta 1.1. *Nechť $\{\varphi_i\}_{i=0}^n$ je ortonormální množina na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ (tj. pro libovolné vektory $\varphi_i, \varphi_j \in \mathcal{H}$ platí $\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$). Pak každé $\psi \in \mathcal{H}$ lze psát jako $\psi = \psi_\perp + \psi_\parallel$, kde $\psi_\parallel = \sum_{i=0}^n \langle \varphi_i, \psi \rangle \varphi_i$, přičemž norma $\|\psi\|$ splňuje rovnost*

$$\|\psi\|^2 = \sum_{i=0}^n | \langle \varphi_i, \psi \rangle |^2 + \|\psi_\perp\|^2 .$$

Vektor $\psi_\parallel$ je navíc jednoznačně určen jako vektor v lineárním obalu $\{\varphi_i\}_{i=0}^n$ nejbližší k vektoru ψ a nazývá se projekce prvku *ψ na lineární podprostor generovaný prvky $\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_n$.*

Důkaz. Vektory $\psi_\perp$ a $\psi_\parallel$ jsou ortogonální, pomocí výše uvedené analogie Pythagorovy věty tedy lze ověřit vztah pro kvadrát normy:

$$\|\psi\|^2 = \left\| \sum_{i=0}^n \langle \varphi_i, \psi \rangle \varphi_i + \psi_\perp \right\|^2 = \sum_{i=0}^n | \langle \varphi_i, \psi \rangle |^2 \|\varphi_i\|^2 + \|\psi_\perp\|^2 .$$

Protože φ_i jsou vektory z ortonormální množiny $\{\varphi_i\}_{i=0}^n$ na $\mathcal{H}$, mají jednotkovou normu, a platí tedy $\|\psi\|^2 = \sum_{i=0}^n | \langle \varphi_i, \psi \rangle |^2 + \|\psi_\perp\|^2$, což jsme chtěli ukázat.

Zafixujeme-li nyní vektor $\hat{\psi} = \sum_{i=0}^n c_i \varphi_i$ v lineárním obalu $\{\varphi_i\}_{i=0}^n$ a počítáme kvadrát jeho vzdálenosti od vektoru ψ, dostáváme

$$\left\| \psi - \hat{\psi} \right\|^2 = \left\| \psi_\parallel + \psi_\perp - \hat{\psi} \right\|^2 = \|\psi_\perp\|^2 + \left\| \psi_\parallel - \hat{\psi} \right\|^2 = \|\psi_\perp\|^2 + \sum_{i=0}^n |c_i - \langle \varphi_i, \psi \rangle |^2,$$

z čehož plyne poslední část věty. □

Užitečnou vlastností libovolných prvků ψ, φ Hilbertova prostoru je, že pro ně platí tzv. *rovnoběžníkové pravidlo*:

$$\|\psi + \varphi\|^2 + \|\psi - \varphi\|^2 = 2\|\psi\|^2 + 2\|\varphi\| , \tag{1.1}$$

díky němuž lze jednoduše říci, za jaké podmínky definuje skalární součin normu.

Věta 1.2. *Norma na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ je indukovaná skalárním součinem právě tehdy, platí-li rovnoběžníkové pravidlo. V tom případě lze skalární součin z dané normy získat využitím tzv.* polarizační identity

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \frac{1}{4}(\|\psi + \varphi\|^2 - \|\psi - \varphi\|^2 + i\|\psi - i\varphi\|^2 - i\|\psi + i\varphi\|^2) \quad \forall \psi, \varphi \in \mathcal{H}. \tag{1.2}$$

Důkaz. V prostoru se skalárním součinem je ověření platnosti rovnoběžníkového pravidla i polarizační identity triviální záležitostí. Ukažme tedy opačnou implikaci. Definujme formu

$$s(\psi, \varphi) = \frac{1}{4}(\|\psi + \varphi\|^2 - \|\psi - \varphi\|^2 + i\|\psi - i\varphi\|^2 - i\|\psi + i\varphi\|^2).$$

Jednoduchým dosazením zjistíme, že platí následující vztahy

$$s(\psi, \psi) = \|\psi\|^2 , \qquad s(\psi, \varphi) = \overline{s(\varphi, \psi)}, \qquad s(\psi, \varphi) + s(\psi, \eta) = 2s\left(\psi, \frac{\varphi + \eta}{2}\right).$$

Pro $\eta = 0$ z posledního vztahu dostaneme $s(\psi, \varphi) = 2s(\psi, \frac{\varphi}{2})$, z čehož plyne, že

$$s(\psi, \varphi) + s(\psi, \eta) = s(\psi, \varphi + \eta).$$

Odtud indukcí pro $m, n \in \mathbb{N}$ dostáváme $\frac{m}{2^n} s(\psi, \varphi) = s(\psi, \frac{m}{2^n}\varphi)$, a tedy $k \cdot s(\psi, \varphi) = s(\psi, k\varphi)$ pro libovolné $k \in \mathbb{Q}_+$. Ze spojitosti plyne platnost pro všechna $k > 0$ a $s(\psi, -\varphi) = -s(\psi, \varphi)$, resp. $s(\psi, i\varphi) = is(\psi, \varphi)$, což jsme chtěli ukázat. □

Poznámka 1.1. Často požadujeme, aby byl Hilbertův prostor separabilní, tedy aby obsahoval spočetnou hustou podmnožinu. Výše popsané prostory $L^2(M, d\mu), l^2(\mathbb{N})$ jsou separabilní (důkaz viz např. [3])

Je-li S ortonormální množina na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ a žádná jiná ortonormální množina na $\mathcal{H}$ neobsahuje S jako svou vlastní podmnožinu, nazveme S *ortonormální bazí* nebo *úplným ortonormálním systémem* na $\mathcal{H}$. Lze ukázat (viz např. [6]), že v každém Hilbertově prostoru existuje nějaká ortonormální báze, jejíž spočetnost souvisí se separabilitou Hilbertova prostoru, jak ukazuje následující věta.

Věta 1.3. *Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ je separabilní, právě když má spočetnou ortonormální bázi.*

Důkaz. Existuje-li v $\mathcal{H}$ spočetná ortonormální báze, je $\mathcal{H}$ jistě separabilní, jelikož konečné lineární kombinace prvků této báze s racionálními koeficienty jsou husté v $\mathcal{H}$. Opačnou implikaci ukážeme sporem. Předpokládejme, že $\mathcal{H}$ má nespočetnou ortonormální bázi. Pak pro libovolné její různé prvky e_i, e_j platí $\|e_i - e_j\| = \sqrt{2}$, a $\mathcal{H}$ tedy nemůže být separabilní. □

1.2 Operátory na Hilbertově prostoru

Necht' $A : D(A) \subseteq X \to Y$ je lineární operátor mezi normovanými lineárními prostory X, Y. Podprostoru $D(A)$ prostoru X pak říkáme *definiční obor*, přičemž většinou chceme, aby byl hustý v X. Dále obvyklým způsobem zavedeme *jádro* $\mathrm{Ker}(A)$ a *obor hodnot* $\mathrm{Ran}(A)$ jako

$$\mathrm{Ker}(A) = \{x \in D(A) | Ax = 0\}, \qquad \mathrm{Ran}(A) = \{Ax | x \in D(A)\}.$$

Připomeňme, že posloupnost $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ prvků normovaného lineárního prostoru *konverguje k prvku x* (píšeme $x_n \to x$), jestliže $\|x_n - x\| \to 0$. Pak mluvíme o *silné konvergenci*, resp. o *konvergenci v normě*. Pomocí pojmu silné konvergence lze rozhodnout, kdy je operátor A *spojitý* v nějakém bodě $x \in D(A)$. Je to přirozeně v případě, kdy pro každou posloupnost $\{x_n\}_{n=1}^{\infty} \in D(A)$ platí

$$x_n \to x \qquad \Rightarrow \qquad Ax_n \to Ax.$$

Samozřejmě A je spojitý, je-li spojitý v každém bodě. Platí, že každý lineární operátor mezi Hilbertovými prostory konečné dimenze je spojitý (pro nekonečnou dimenzi to tak už být nemusí, viz např. [3]).

Definice 1.1 (Omezený operátor)**.** Operátor $A : X \to Y$ mezi normovanými lineárními prostory X, Y nazveme *omezený*, jestliže existuje konstanta $c > 0$ taková, že

$$\|Ax\|_Y \leq c\|x\|_X \qquad \forall x \in D(A). \tag{1.3}$$

Infimum všech takových konstant c je norma $\|A\|$ operátoru A a zřejmě $\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|$. Tedy A je omezený, je-li jeho norma

$$\|A\| = \sup_{\|x\|_X = 1} \|Ax\|_Y < \infty.$$

Typickými omezenými operátory jsou operátory integrální, což si ukážeme v následujícím příkladě na tzv. *Fredholmově operátoru*.

Příklad 1.2. Mějme spojitou, obecně komplexní funkci $K : [a,b] \times [a,b] \to \mathbb{C}$, která se nazývá *jádro* operátoru. Fredholmův operátor $\mathcal{F} : C[a,b] \to C[a,b]$, kde $C[a,b]$ je prostor spojitých funkcí na intervalu $[a,b]$, definujeme předpisem

$$\mathcal{F}f(s) := \int_a^b K(s,t)f(t)dt, \qquad f \in C[a,b],\ s,t \in [a,b]. \tag{1.4}$$

Protože integrandem je spojitá funkce, je $\mathcal{F}f$ korektně definováno, a z vlastností integrálů ihned plyne linearita $\mathcal{F}$. Operátor $\mathcal{F}$ je navíc omezený, neboť

$$\|\mathcal{F}\| \le \max\{|K(s,t)| : s,t \in [0,1]\}.$$

Později ukážeme, že $\mathcal{F}$ patří i mezi tzv. kompaktní operátory.

Následující věta vysvětluje, proč lze zaměňovat pojem spojitého a omezeného operátoru.

Věta 1.4. *Operátor A je omezený právě tehdy, když je spojitý.*

Důkaz. Předpokládejme, že A je spojitý, ale není omezený. Pak bude existovat posloupnost jednotkových vektorů e_n takových, že $\|Ae_n\| \ge n$. Tedy $f_n = \frac{1}{n}e_n$ bude konvergovat k nule, ale norma $\|Af_n\| \ge 1$ už k nule konvergovat nebude. Opačná implikace, tedy že z omezenosti plyne spojitost, je okamžitým důsledkem vztahu (1.3). □

Množinu všech *omezených lineárních operátorů mezi Banachovými prostory X a Y* budeme značit $L(X,Y)$. Poznamenejme, že společně s výše zavedenou normou operátoru tvoří $L(X,Y)$ normovaný lineární prostor a platí, že $L(X,Y)$ je Banachův, jestliže je prostor Y Banachův. Pokud $X = Y$, píšeme místo $L(X,X)$ pouze $L(X)$, přičemž tento prostor společně s násobením definovaným pomocí skládání operátorů $AB : x \mapsto A(B(x))$ tvoří algebru, kterou později nazveme Banachovou algebrou. Libovolnému operátoru z $L(X,\mathbb{C})$ budeme říkat *omezený lineární funkcionál* a prostoru $X' = L(X,\mathbb{K})$, kde $\mathbb{K}$ je číselné těleso, *duální prostor k prostoru X*. Mezi omezeností a spojitostí lineárních funkcionálů je ekvivalence, obdobně jako tomu bylo již u lineárních operátorů. Dále platí, že na konečně dimenzionálním Hilbertově prostoru jsou všechny lineární operátory, speciálně tedy i všechny lineární fukcionály, omezené a hustě definované.

Ve funkcionální analýze je důležité umět popsat spojité lineární operátory na Banachových prostorech. My se zaměříme speciálně na prostory Hilbertovy. Známým výsledkem z algebry je, že (algebraickým) duálem k prostoru $\mathbb{R}^n$ je opět $\mathbb{R}^n$. Přesněji: je-li $a \in \mathbb{R}^n$ a zavedeme-li zobrazení $L_a : x \mapsto \langle a, x\rangle$, je L_a spojitá lineární forma na $\mathbb{R}^n$. Naopak platí, že každá spojitá lineární forma L na $\mathbb{R}^n$ je jednoznačně dána skalárním součinem, tj. existuje právě jedno $a \in \mathbb{R}^n$ tak, že $L = L_a$. Zobrazení $\Phi : L \mapsto a$ zachovává algebraické operace a je vlastně izomorfismem mezi R^n a jeho duálem.

Nyní ukážeme, že obdobným způsobem to funguje i v Hilbertových prostorech. Důkaz následující věty lze nalézt např. v [6].

Věta 1.5 (Rieszovo lemma)**.** *Buď $\mathcal{H}$ Hilbertův prostor, $\mathcal{H}'$ jeho duál. Pak pro každé $f \in \mathcal{H}'$ existuje právě jedno $\psi_f \in \mathcal{H}$ takové, že*

$$f(\varphi) = \langle \psi_f, \varphi\rangle \qquad \forall \varphi \in \mathcal{H}.$$

Zobrazení $f \mapsto \psi_f$ je bijektivní, a navíc $\phi(f_1 + f_2) = \phi(f_1) + \phi(f_2)$ a $\phi(kf) = \overline{k}\phi(f)$, kde k je obecně komplexní číslo. Z toho plyne, že $\phi : \mathcal{H}' \to \mathcal{H}$ je antilineární izometrie prostorů $\mathcal{H}'$ a $\mathcal{H}$. Navíc $\|\psi_f\|_{\mathcal{H}} = \|f\|_{\mathcal{H}'}$.

V tomto odstavci zavedeme několik nových pojmů, které budeme v dalším používat. Buď $A : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ lineární operátor mezi Hilbertovými prostory $\mathcal{H}_1$ a $\mathcal{H}_2$. *Grafem $G(A)$ operátoru A* nazveme lineární podprostor $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ sestávající z vektorů tvaru $\{x, Ax\}$, kde $x \in D(A)$. Dále A nazveme *uzavřený*, je-li jeho graf $G(A)$ uzavřený podprostor $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$. Ekvivalentně vyjádřeno, A je uzavřený, pokud $x_n \in D(A)$, $x_n \to x$ v $\mathcal{H}_1$ a $Ax_n \to y$ v $\mathcal{H}_2$ implikuje, že $Ax = y$, kde $x \in D(A)$. Řekneme, že A je *uzavíratelný*, je-li $\overline{G(A)}$ graf nějakého operátoru $\overline{A}$, v takovém případě nazveme $\overline{A}$ *uzávěrem* A. Tedy A je uzavíratelný, jestliže $x_n \in D(A)$, $x_n \to 0$ v $\mathcal{H}_1$ a $Ax_n \to y$ v $\mathcal{H}_2$ implikuje $y = 0$. Z definice plyne, že každý omezený operátor je uzavíratelný.

Definice 1.2 (Unitární operátor)**.** Bijektivní lineární operátor $A \in L(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ mezi dvěma Hilbertovými prostory $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ nazveme *unitární*, jestliže zachovává skalární součin:

$$\langle A\varphi, A\psi\rangle_2 = \langle \varphi, \psi\rangle_1 , \qquad \forall \varphi, \psi \in \mathcal{H}_1,$$

což nastává právě tehdy, když A zachovává normu $\|A\psi\|_2 = \|\psi\|_1$ pro všechna $\psi \in \mathcal{H}_1$.

Unitární operátory na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ tvoří uzavřenou podgrupu $U(\mathcal{H})$ grupy $GL(\mathcal{H})$ všech invertibilních operátorů na $\mathcal{H}$. Jsou-li A_1, resp. A_2 lineární operátory na $\mathcal{H}_1$, resp. $\mathcal{H}_2$, pak řekneme, že A_1 a A_2 jsou *unitárně ekvivalentní*, existuje-li unitární operátor $U : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ takový, že $D(A_2) = UD(A_1)$ a $A_2 = U^{-1}A_1U$.

Definice 1.3 (Symetrický operátor)**.** Hustě definovaný lineární operátor A na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ je *symetrický*, jestliže

$$\langle A\psi, \varphi\rangle = \langle \psi, A\varphi\rangle \qquad \forall \psi, \varphi \in D(A).$$

Definice 1.4 (Adjungovaný operátor)**.** Nechť $A : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ je lineární operátor mezi Hilbertovými prostory $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ a nechť $\psi \in \mathcal{H}_1$. Označme

$$D(A^*) = \{\varphi \in \mathcal{H}_2 | \psi \mapsto \langle \varphi, A\psi\rangle \text{ je spojitý lineární funkcionál}\}.$$

Z Rieszova lemmatu 1.5 víme, že každý spojitý lineární funkcionál na Hilbertově prostoru lze reprezentovat skalárním součinem. Existuje tedy právě jedno $\eta \in \mathcal{H}_2$ takové, že

$$\langle \varphi, A\psi \rangle = \langle \eta, \psi \rangle \qquad \forall \psi \in \mathcal{H}_1, \varphi \in \mathcal{H}_2, \tag{1.5}$$

kde $\eta = A^*\varphi$. Je-li $D(A)$ hustý v $\mathcal{H}_1$, je $D(A^*)$ hustý v $\mathcal{H}_2$ a pomocí vztahu (1.5) definujeme tzv. *adjungované zobrazení* $A^* : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$. Operátor A^* se nazývá *adjungovaný operátor* k operátoru A.

Dále uveďme několik jednoduchých vlastností adjungovaných operátorů, jejichž důkazy lze nalézt např. v [5]).

- Pro každý lineární operátor A, pro něž $\overline{D(A)} = \mathcal{H}_1$, je A^* uzavřený.
- Je-li $A_1 \subset A_2$, kde A_1 a A_2 nemusí být nutně spojité, pak $A_2^* \subset A_1^*$.
- Nechť $A \in L(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ je omezený lineární operátor mezi Hilbertovými prostory $\mathcal{H}_1$ a $\mathcal{H}_2$ a nechť $D(A) = \mathcal{H}_1$. Pak $A^* \in L(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$ a $D(A^*) = \mathcal{H}_2$. Navíc $\|A^*\| = \|A\|$.

Pomocí adjungovaného operátoru A^* lze popsat i symetrický operátor A. Platí totiž, že A je symetrický, právě když je hustě definovaný a $A \subseteq A^*$. Zřejmě každý symetrický operátor je uzavíratelný. Vskutku $G(A) \subset G(A^*)$ a je-li A^* uzavřený, tj. $\overline{G(A^*)} = G(A)$, pak $\overline{G(A)} \subset G(A^*)$, a $\overline{G(A)}$ tedy neobsahuje vektory tvaru $\{0, x\}$, $x \neq 0$. To znamená, že $\overline{G(A)}$ je grafem operátoru A.

Definice 1.5 (Samoadjungovaný a normální operátor)**.** Operátor $A \in L(\mathcal{H})$ nazveme *samoadjungovaný*, resp. *normální*, pokud $D(A) = D(A^*)$ a $A = A^*$, resp. $AA^* = A^*A$.

Zřejmě každý samoadjungovaný operátor je normální, dokonce každý unitární operátor je normální, protože splňuje $AA^* = A^*A = I$, kde I je identický operátor. Každý samoadjungovaný operátor je také uzavřený. Je-li A samoadjungovaný a existje-li jeho inverze A^{-1}, pak je tato inverze rovněž samoadjungovaný operátor. Vskutku $(A^{-1})^* = (A^*)^{-1} = A^{-1}$.

Poznamenejme, že je velmi důležité rozlišovat mezi uzavřenými symetrickými a samoadjungovanými operátory. Zatímco pro uzavřené symetrické operátory je $A = A^{**} \subset A^*$, pro samoadjungované operátory $A = A^* = A^{**}$. Později se budeme zabývat spektrální větou, v níž budeme požadovat samoadjungovanost, a ukážeme také význam samoadjungovaných operátorů v časovém vývoji kvantově mechanických systémů. Vztah mezi uzavřenými symetrickými a samoadjungovanými operátory ukazuje následující věta, jejíž důkaz lze nalézt např. v [8].

Věta 1.6. *Uzavřený symetrický operátor A je samoadjungovaný, právě když je adjungovaný operátor A^* symetrický.*

Definice 1.6 (Banachova algebra)**.** Nechť X je Banachův prostor lineárních operátorů $L(X)$ společně s násobením (skládání operátorů), které splňuje následující vztahy

$$(A+B)C = AC + BC, \qquad A(B+C) = AB + AC,$$

$$(AB)C = A(BC), \qquad \alpha(AB) = A(\alpha B) = (\alpha A)B,$$

kde $A, B, C \in L(X)$, $\alpha, \in \mathbb{C}$. Takový prostor $L(X)$ pak nazveme *Banachovou algebrou* $\mathcal{A}$.

Takto zavedená Banachova algebra $\mathcal{A}$ spolu s tzv. *involucí* $* : \mathcal{A} \to \mathcal{A}$ splňující

$$(a+b)^* = a^* + b^*, \quad (\alpha a)^* = \overline{\alpha} a^*, \quad a^{**} = a, \quad (ab)^* = b^* a^*, \quad \|a\|^2 = \|a^* a\|,$$

se nazývá *C^* algebra*, přičemž číslo $\overline{\alpha}$ je komplexně sdružené k číslu α. Místo $*(a)$ zde píšeme a^*. Prvku a^* říkáme prvek *adjungovaný* k a. O prvku $a \in \mathcal{A}$ řekneme, že je *normální*, pokud $aa^* = a^*a$, *samoadjungovaný*, pokud $a = a^*$, *unitární*, je-li $aa^* = a^*a = I$ a *ortogonální projekce*, jestliže platí $a = a^* = a^2$.

Definice 1.7 (Kompaktní operátory)**.** Lineární operátor A mezi Banachovými prostory X, Y nazveme *kompaktní*, jestliže pro každou omezenou posloupnost x_n v X obsahuje posloupnost Ax_n nějakou podposloupnost, která konverguje v Y.

Kompaktní operátor se někdy nazývá *totálně spojitý*. Ekvivalentně lze kompaktní operátor $A : X \to Y$ definovat také tak, že zobrazuje omezené podmnožiny v X na relativně kompaktní podmnožiny[5] v Y. Množina $S(\mathcal{H})$ kompaktních operátorů na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ tvoří uzávěr množiny všech operátorů z $L(\mathcal{H})$ s konečně dimenzionálním oborem hodnot. Z definice (1.7) ihned plynou základní vlastnosti kompaktních operátorů (důkazy lze nalézt např. v [8]):

- Je-li lineární operátor $A : X \to Y$ mezi Banachovými prostory X, Y kompaktní, pak je také spojitý.

[5] Je-li X je Banachův prostor, pak relativně kompaktní množiny $M \subseteq X$ jsou ty, jejichž uzávěr je kompaktní množina, tj. z každé posloupnosti bodů množiny $\overline{M}$ lze vybrat konvergentní podposloupnost s limitou v $\overline{M}$. Obecně v úplných metrických prostorech platí, že množina je relativně kompaktní, právě když z každé posloupnosti jejích prvků lze vybrat konvergentní podposloupnost.

- Je-li $A : X \to Y$, kde X, Y jsou Banachovy prostory, spojitý lineární operátor a $\mathrm{Ran}(A)$ je konečně dimenzionální v Y, pak je A kompaktní.

Uveďme nyní tři nejvýznamnější třídy kompaktních operátorů.

Příklad 1.3.

1. **Fredholmovy operátory**. Tyto operátory jsme již v příkladu (1.2) zavedli vztahem

$$\mathcal{F}f(s) = \int_0^1 K(s,t)f(t)dt, \qquad f \in C([0,1]),\ s,t \in [0,1].$$

Chceme-li ukázat, že operátor $\mathcal{F}$ je kompaktní, označme si nejprve

$$B := \{f \in C([0,1]) : \|f\| \leq 1\}.$$

Kompaktnost $\mathcal{F}$ pak vyplývá z relativní kompaktnosti množiny $\mathcal{F}(B)$ v $C([0,1])$, která se běžně ukazuje pomocí Arzelàovy-Ascoliho věty[6]. Protože z příkladu (1.2) víme, že $\mathcal{F}$ je omezený, musí být $\mathcal{F}(B)$ omezená množina, a stačí tedy ukázat, že $\mathcal{F}(B)$ je stejně spojitá množina. Připomeňme, že podmnožinu X v $C([a,b])$ nazveme *stejně spojitou*, jestliže ke každému $\varepsilon > 0$ existuje $\delta > 0$ tak, že $|x(t_1) - x(t_2)| < \varepsilon$ pro každé $x \in X$ a libovolné dva body $t_1, t_2 \in [a,b]$, pro něž je $|t_1 - t_2| < \delta$. V našem případě plyne stejná spojitost ze spojitosti funkce $K(s,t)$ na kompaktní množině $[0,1] \times [0,1]$. Pro všechna $\varepsilon > 0$ totiž existuje takové $\delta > 0$, že

$$|k(s_1,t) - k(s_2,t)| < \varepsilon \qquad \forall t \in [0,1],\ |s_1 - s_2| < \delta.$$

Potom

$$|\mathcal{F}f(s_1) - \mathcal{F}f(s_2)| \leq \max_{t\in[0,1]} |k(s_1,t) - k(s_2,t)| \|f\| \leq \varepsilon.$$

Jelikož jsme ukázali, že množina $\mathcal{F}(B)$ je relativně kompaktní v $C([0,1])$, je kompaktní i Fredholmův operátor $\mathcal{F}$.

2. **Nukleární operátory** (v anglicky psané literatuře **trace class operátory**). Operátor $\mathcal{N} \in L(\mathcal{H})$ nazveme *nukleární*, je-li jeho stopa $\mathrm{Tr}|A| < \infty$. Pojem stopa je zde generalizací obyčejné sumy diagonálních prvků matice. Nechť $\mathcal{H}$ je separabilní Hilbertův prostor a $\{\varphi\}_{i=1}^{\infty}$ jeho ortonormální báze. Pro libovolný pozitivní operátor $A \in L(\mathcal{H})$, tj. takový operátor na $L(\mathcal{H})$, že $\langle A\psi, \eta\rangle \geq 0$ pro všechna $\psi, \eta \in \mathcal{H}$, definujme *stopu*

$$\mathrm{Tr}(A) = \sum_{i=1}^{\infty} \langle \varphi_i, A\varphi_i \rangle,$$

přičemž číslo $\mathrm{Tr}(A)$ nezávisí na zvolené ortonormální bázi.

Prostor všech nukleárních operátorů označme J_1. Poznamenejme, že zobrazení Tr takové, že $\mathcal{N} \mapsto \mathrm{Tr}(\mathcal{N})$ je lineární funkcionál na J_1. K důkazu kompaktnosti je vhodnější zavést nukleární operátory jako takové operátory $\mathcal{N} \in L(\mathcal{H})$, pro něž existují posloupnosti $\{x_n\}$, $\{y_n\}$ v $\mathcal{H}$ tak, že

$$\sum_n \|x_n\| \|y_n\| < \infty \qquad \text{a} \qquad \mathcal{N}x = \sum_n \langle x, x_n \rangle y_n$$

[6]Pro připomenutí uveďme Arzelàovu-Ascoliho větu, jak je formulována v [8], kde je také dokázána. Nechť $\{x_n\}$ je omezená posloupnost v $C([a,b])$ a nechť její prvky tvoří stejně spojitou množinu. Pak posloupnost $\{x_n\}$ obsahuje konvergentní podposloupnost (konvergentní v topologii prostoru $C([a,b])$).

pro každé $x \in \mathcal{H}$[7]. Kompaktnost $\mathcal{N}$ je pak ihned vidět z odhadu

$$\left\| \mathcal{N}x - \sum_{j=1}^{n} \langle x, x_j \rangle y_j \right\| \leq \sum_{j=n+1}^{\infty} \|x_j\| \|y_j\| \,,$$

z něhož plyne, že $\mathcal{N}$ je limitou konečně dimenzionálních operátorů v prostoru $L(\mathcal{H})$, a je tedy kompaktní.

3. **Hilbertovy-Schmidtovy operátory**. Hilbertův-Schmidtův integrální operátor $\mathcal{K}$ je pro každé $\psi \in L^2(M, d\mu)$ definován jako

$$\mathcal{K}\psi(x) = \int\limits_M \mathcal{K}(x,y)\psi(y)d\mu(y),$$

kde $\mathcal{K}(x,y) \in L^2(M \times M, d\mu \otimes d\mu)$. Pomocí již zavedené stopy lze Hilbertův-Schmidtův operátor definovat také jako operátor $\mathcal{K} \in L(\mathcal{H})$, pro nějž $\mathrm{Tr}(\mathcal{K}^*\mathcal{K}) < \infty$. Množinu všech Hilbertových-Schmidtových operátorů budeme značit J_2. Platí, že $J_1 \subset J_2$[8].

Omezenost operátoru $\mathcal{K}$ ukážeme snadno, využijeme-li Cauchyovy-Schwartzovy nerovnosti:

$$\begin{aligned}
\int\limits_M |\mathcal{K}\psi(x)|^2 d\mu(x) &= \int\limits_M \left| \int\limits_M |\mathcal{K}(x,y)\psi(y)| d\mu(y) \right|^2 d\mu(x) \leq \\
&\leq \int\limits_M \left(\int\limits_M |\mathcal{K}(x,y)|^2 d\mu(y) \right) \left(\int\limits_M |\psi(y)|^2 d\mu(y) \right) d\mu(x) = \\
&= \left(\int\limits_M \int\limits_M |\mathcal{K}(x,y)|^2 d\mu(y) d\mu(x) \right) \left(\int\limits_M |\psi(y)|^2 d\mu(y) \right).
\end{aligned}$$

K tomu, abychom ověřili, že Hilbertův-Schmidtův operátor je kompaktní, stačí ukázat, že jej lze aproximovat konečně dimenzionálními operátory. Zvolíme-li ortonormální bázi $\varphi_j(x)$ prostoru $L^2(M, d\mu)$, pak báze $L^2(M \times M, d\mu \otimes d\mu)$ bude $\varphi_i(x)\varphi_j(y)$ a $\mathcal{K}(x,y)$ vyjádříme jako

$$\mathcal{K}(x,y) = \sum_{i,j} c_{i,j} \varphi_i(x) \varphi_j(y),$$

kde $c_{i,j} = \langle \varphi_i, \mathcal{K}\overline{\varphi_j} \rangle$, a platí

$$\sum_{i,j} |c_{i,j}|^2 = \int\limits_M \int\limits_M |\mathcal{K}(x,y)|^2 d\mu(y) d\mu(x) < \infty.$$

Zejména $\mathcal{K}\psi(x) = \sum_{i,j} c_{i,j} \langle \overline{\varphi_j}, \psi \rangle \varphi_i(x)$. Operátor $\mathcal{K}$ tedy lze aproximovat konečně dimenzionálními operátory, z čehož plyne, že je kompaktní.

[7]Tato definice je převzata z [3].

[8]Konkrétně platí, že operátor $\mathcal{N}$ je nukleární, právě když existují Hilbertovy-Schmidtovy operátory $\mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2$ tak, že $\mathcal{N} = \mathcal{K}_1 \circ \mathcal{K}_2$. V tom případě $\|\mathcal{N}\|_N \leq \|\mathcal{K}_1\|_{HS} \|\mathcal{K}_2\|_{HS}$. Důkaz tohoto tvrzení společně s podrobnější charakteristikou Hilbertových-Schmidtových a nukleárních operátorů lze nalézt v [9].

Na závěr připomeňme základní vlastnosti projekce na Hilbertově prostoru, které budeme využívat při výkladu spektrální věty. *Projekcí* rozumíme takové lineární zobrazení $P : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, pro něž platí $P^2 = P$. Je-li P projekce na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$, pak zřejmě

$$\mathcal{H} = \mathrm{Ran}(P) \oplus \mathrm{Ker}(P).$$

Vskutku, uvažujme $\psi + \varphi = 0$, kde $\psi \in \mathrm{Ker}(P)$, $\varphi \in \mathrm{Ran}(P)$. Potom $\varphi = -\psi$ a $\varphi = P\eta$ pro nějaké $\eta \in \mathcal{H}$, tedy $P\varphi = P(-\psi) = 0$, z čehož plyne, že $P^2\eta = P\eta = \varphi$. Také tedy $\psi = 0$. Projekci P nazveme *ortogonální*, jsou-li prostory $\mathrm{Ran}(P)$ a $\mathrm{Ker}(P)$ navzájem ortogonální. Lze ukázat (viz např. [8]), že je-li M uzavřený lineární podprostor Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$ a vektor $\psi \in \mathcal{H}$, pak existuje právě jedno $\varphi \in M$ takové, že

$$\|\varphi - \psi\| = \inf_{\hat{\varphi} \in M} \|\hat{\varphi} - \psi\| .$$

Vektor φ se nazývá *ortogonální projekce* ψ na M. Protože vektor $\eta = \psi - \varphi$ je kolmý na vektor φ, lze každé $\psi \in \mathcal{H}$ jednoznačně vyjádřit ve tvaru $\psi = \varphi + \eta$, kde $\varphi \in M$ a $\eta \in M^\perp$. Platí tedy, že $\mathcal{H} = M \oplus M^\perp$.

V dalším budeme potřebovat následující větu.

Věta 1.7. *Projekce P je ortogonální, právě když je symetrická.*

Důkaz. Začněme implikací zleva doprava, tj. předpokládejme nejprve, že P je ortogonální projekce, a ukažme, že P je také nutně symetrický operátor. Je-li $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$, pak

$$\psi = P\psi + \underbrace{(\psi - P\psi)}_{\in \mathrm{Ker}(P)}, \qquad \varphi = P\varphi + \underbrace{(\varphi - P\varphi)}_{\in \mathrm{Ker}(P)}.$$

Dále počítejme

$$\langle P\psi, \varphi \rangle = \langle P\psi, P\varphi \rangle + \langle P\psi, \varphi - P\varphi \rangle, \qquad \langle \psi, P\varphi \rangle = \langle P\psi, P\varphi \rangle + \langle \psi - P\psi, P\varphi \rangle.$$

Jsou-li $\mathrm{Ran}(P)$ a $\mathrm{Ker}(P)$ navzájem ortogonální, pak je operátor P symetrický, neboť $\langle P\psi, \varphi - P\varphi \rangle = 0 = \langle \psi - P\psi, P\varphi \rangle$, tj. $\langle P\psi, \varphi \rangle = \langle P\psi, P\varphi \rangle = \langle \psi, P\varphi \rangle$. Operátor P je tedy symetrický a implikace „$\Rightarrow$" je dokázána.

Obráceně předpokládejme, že operátor P je symetrický a že $\psi \in \mathrm{Ran}(P)$ a $\varphi \in \mathrm{Ker}(P)$. Pak $P\psi = \psi$, $P\varphi = 0$ a $\langle \psi, \varphi \rangle = \langle P\psi, \varphi \rangle = \langle \psi, P\varphi \rangle = \langle \psi, 0 \rangle = 0$, čímž jsme ukázali ortogonalitu $\mathrm{Ran}(P)$ a $\mathrm{Ker}(P)$. □

1.3 Spektrální teorie v Hilbertových prostorech

1.3.1 Spektrální vlastnosti symetrických, samoadjungovaných a kompaktních operátorů

Připomeňme, že číslo $\lambda \in \mathbb{C}$ se nazývá *vlastní hodnotou* operátoru $A \in L(X)$, kde X je Banachův prostor, existuje-li $x \in X$, $x \neq 0$, pro než $Ax = \lambda x$. Vektoru x pak říkáme *vlastní vektor* příslušející vlastní hodnotě λ. Číslo λ je tedy vlastní hodnotou operátoru A, není-li operátor $A - \lambda I$ prostý (zde I značí identický operátor). Existuje-li více lineárně nezávislých vektorů vyhovujících rovnici $Ax = \lambda x$, řekneme, že vlastní hodnota λ je *degenerovaná*, přičemž počet lineárně nezávislých řešení udává *stupeň degenerace*.

Nyní zavedeme několik důležitých pojmů jako je rezolventní množina či spektrum operátoru.

Definice 1.8. Nechť $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ je (ne nutně spojitý) operátor na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$, jehož definiční obor $D(A)$ je hustý v $\mathcal{H}$, a nechť $\rho(A)$ je množina čísel $\lambda \in \mathbb{C}$ s následujícími vlastnostmi:

1. existuje inverzní operátor $R_\lambda = (\lambda I - A)^{-1}$, tedy $(\lambda I - A)x = 0 \;\Rightarrow\; x = 0$,
2. operátor $R_\lambda = (\lambda I - A)^{-1}$ je spojitý, tedy existuje $c > 0$ tak, že
$$\left\|(\lambda I - A)^{-1}x\right\| \leq c\|x\| \qquad \forall x \in D((\lambda I - A)^{-1}),$$
3. obor hodnot operátoru $(A - \lambda I)$ je hustý v $\mathcal{H}$, tedy $\overline{\operatorname{Ran}(A - \lambda I)} = \mathcal{H}$.

Pak množina $\rho(A)$ je *rezolventní množinou operátoru A*, o jejích prvcích hovoříme jako o *regulárních hodnotách* a operátorovou funkci R_λ nazýváme *rezolventou A*. *Spektrum $\sigma(A)$* zavedeme jako $\sigma(A) = \mathbb{C}\backslash\rho(A)$. Spektrum $\sigma(A)$ je sjednocením tří disjunktních množin $\sigma_p(A)$, $\sigma_c(A)$ a $\sigma_r(A)$, jimž říkáme *bodové*, *spojité* a *residuální* spektrum:
$$\sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_c(A) \cup \sigma_r(A).$$
Bodové spektrum je tvořeno všemi vlastními hodnotami operátoru A. Spojité spektrum sestává z takových λ, pro něž je $\operatorname{Ran}(A - \lambda I)$ hustý v $\mathcal{H}$, a do reziduálního spektra patří všechny λ takové, že $\overline{\operatorname{Ran}(A - \lambda I)} \neq \mathcal{H}$.

Je-li operátor A navíc spojitý, pak konečné číslo
$$r(A) := \sup\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(A)\}$$
nazveme *spektrálním poloměrem operátoru A*.

Fyzikální motivace ke studiu spekter, a to zejména samoadjungovaných operátorů, vychází z axiomů kvantové mechaniky. Fyzikální veličiny v kvantové mechanice jsou totiž reprezentovány takovými samoadjungovanými operátory, z jejichž vlastních vektorů lze sestavit bázi. O takových samoadjungovaných operátorech pak hovoříme jako o tzv. *pozorovatelných*. Je-li dimenze Hilbertova prostoru konečná, patří všechny samoadjungované operátory mezi pozorovatelné, což ovšem u nekonečně dimenzionálních Hilbertových prostorů obecně platit nemusí. Při měření fyzikální veličiny a, které přísluší samoadjungovaný operátor $\hat{A}$, naměříme vždy některou z vlastních hodnot $\hat{A}$, přičemž tímto měřením přejde systém z původního stavu do vlastního stavu příslušného naměřené vlastní hodnotě.

V dalším ukážeme několik základních spektrálních vlastností symetrických, samoadjungovaných a kompaktních operátorů na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$.

Věta 1.8. *Nechť $A \in L(\mathcal{H})$ je symetrický operátor na $\mathcal{H}$. Pak $\sigma_p(A) \subseteq \mathbb{R}$, tj. vlastní hodnoty A jsou reálné, a vlastní vektory příslušející různým vlastním číslům jsou navzájem ortogonální. Je-li $\lambda \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$, platí $\left\|(A - \lambda I)\right\| \leq |Im\lambda|^{-1}$, tj. $(A - \lambda I)$ je spojitě invertibilní.*

Důkaz. Mějme $A\psi_1 = \lambda_1\psi_1$, $A\psi_2 = \lambda_2\psi_2$ a ukažme, že prvky ψ_1, ψ_2 jsou ortogonální. Protože
$$\langle A\psi_1, \psi_2\rangle = \langle\lambda_1\psi_1, \psi_2\rangle, \qquad \langle\psi_1, A\psi_2\rangle = \langle\psi_1, \lambda_2\psi_2\rangle,$$
pak ze symetrie operátoru A se oba skalární součiny rovnají, tj. $\langle\psi_1, A\psi_2\rangle = \langle\psi_1, \lambda_2\psi_2\rangle$, tedy $(\lambda_1 - \lambda_2)\langle\psi_1, \psi_2\rangle = 0$, z čehož plyne, že ψ_1, ψ_2 jsou ortogonální. Nyní mějme nějaké λ tvaru $\alpha + i\beta$ a počítejme
$$\begin{aligned}\left\|(\lambda - A)\psi\right\|^2 &= \left\|(\alpha - A)\psi + i\beta\psi\right\|^2 = \left\|(\alpha - A)\psi\right\|^2 + \|\beta\psi\|^2 + \langle(\alpha - A)\psi, i\beta\psi\rangle + \\ &+ \langle i\beta\psi, (\alpha - A)\psi\rangle = \left\|(\alpha - A)x\right\|^2 + \beta\|x\|^2 \geq \beta^2\|\psi\|^2,\end{aligned}$$
z čehož $\left\|(\lambda - A)\psi\right\| \geq |\beta|\|\psi\|$, tedy $\left\|(A - \lambda)^{-1}\psi\right\| \leq \frac{1}{\beta}\|\psi\|$. □

Definice 1.9 (Aproximativní spektrum). *Aproximativní spektrum* $\sigma_{ap}(A)$ lineárního operátoru $A \in L(X)$ tvoří všechna čísla $\lambda \in \mathbb{C}$, pro něž $\inf\{\|Ax - \lambda x\| : \|x\| = 1\} = 0$.

Tedy $\lambda \in \sigma_{ap}(A)$, existuje-li posloupnost $x_n \in X, \|x_n\| = 1$ taková, že $Ax_n - \lambda x_n \to 0$, tj. stačí nám pouze existence přibližných netriviálních řešení rovnice $Ax = \lambda x$.

Věta 1.9 (Weylovo kritérium). *Nechť $A \in L(\mathcal{H})$ je samoadjungovaný operátor na $\mathcal{H}$. Pak $\sigma(A) = \sigma_{ap}(A)$, tedy spektrum operátoru splývá s jeho aproximativním spektrem.*

Důkaz. Z definice plyne, že $\sigma_{ap}(A) \subset \sigma(A)$. Buď nyní $\lambda \in \sigma(A)\backslash\sigma_{ap}(A)$. Využijeme toho, že operátor $A - \lambda I$ je prostý a jeho obor hodnot $\mathrm{Ran}(A - \lambda I)$ tvoří uzavřený podprostor Hilbertova prostoru $\mathcal{H} \neq \mathrm{Ran}(A - \lambda I)$ (důkaz tohoto tvrzení lze nalézt v [3]). Pak nutně existuje $\psi \in (\mathrm{Ran}(A - \lambda I))^\perp$ s jednotkovou normou. Protože pro všechna $\varphi \in \mathcal{H}$ je $A\varphi - \lambda\varphi \in \mathrm{Ran}(A - \lambda I)$ je skalární součin $0 = \langle A\varphi - \lambda\varphi, \psi\rangle = \langle \varphi, A\psi - \overline{\lambda}\psi\rangle$, z čehož plyne, že $A\psi - \overline{\lambda}\psi = 0$, jelikož $\varphi \neq 0$. Tedy $\overline{\lambda}$ je vlastní hodnotou operátoru A a z rovnosti $\overline{\lambda}\langle\psi, \psi\rangle = \langle A\psi, \psi\rangle \in \mathrm{R}$ (pro každý samoadjungovaný operátor je příslušná kvadratická forma reálná), je $\overline{\lambda}$ reálné číslo. Zjistili jsme, že $\lambda = \overline{\lambda}$ je vlastní hodnota operátoru A, což je ovšem spor s předpokladem, že $\sigma_{ap}(A) \subset \sigma(A)$. □

Věta 1.10. *Buď A samoadjungovaný operátor. Pak následující výroky jsou ekvivalentní*

(i) $z \in \rho(A)$,

(ii) existuje konstanta $c > 0$ tak, že $\|(zI - A)\psi\| \geq c\|\psi\|$ pro každé $\psi \in D(A)$,

(iii) $\mathrm{Ran}(zI - A) = \mathcal{H}$.

Důkaz. Nejdřív ukažme implikaci $(i) \Rightarrow (ii)$, tedy předpokládejme, že $z \in \rho(A)$. Pak $zI - A$ bude prosté a $(zI - A)^{-1}$ spojité. Nyní ukážeme implikaci $(ii) \Rightarrow (iii)$. Jestliže je $(zI - A)$ prosté a $(zI - A)^{-1}$ spojité, pak $D((zI - A)^{-1}) = \mathrm{Ran}(zI - A)$ je hustý v $\mathcal{H}$, a protože $\mathrm{Ran}(zI - A)$ je uzavřený, dostáváme, že $\mathrm{Ran}(zI - A) = \mathcal{H}$, čímž je implikace dokázána. Zbývá ukázat poslední implikace $(iii) \Rightarrow (i)$, uvažujme tedy $\mathrm{Ran}(zI - A) = H$ a $z \in \mathbb{R}$. Pak platí $\mathrm{Ker}(zI - A) = \mathrm{Ker}(\overline{z}I - A^*) = (\mathrm{Ran}(zI - A))^\perp = \{0\}$ a $(zI - A)$ je bijekce, tedy $z \in \rho(A)$ a podle Věty (1.8) je $z \in \sigma(A)$, je-li z nereálné. □

Věta 1.11 (O spektru samoadjungovaného operátoru). *Buď $A \in L(\mathcal{H})$ samoadjungovaný operátor a označme*

$$m(A) = \inf\{\langle A\psi, \psi\rangle : \|\psi\| = 1\}, \qquad M(A) = \sup\{\langle A\psi, \psi\rangle : \|\psi\| = 1\}.$$

Pak $\sigma(A) \subset [m(A), M(A)]$, přičemž $m(A), M(A) \in \sigma(A)$.

Důkaz. Viz [3]. □

Věta 1.12. *Buď $A \in L(X)$ kompaktní operátor na Banachově prostoru X. Pak*

(i) bodové spektrum $\sigma_p(A)$ je nejvýše spočetná množina s jediným možným hromadným bodem $\lambda = 0$,

(ii) $\dim \mathrm{Ker}(A - \lambda I) < \infty$ *pro každé* $\lambda \neq 0$.

Důkaz. Důkaz (i) je možné najít v [8], dokažme pouze (ii). Označme $Y = \{x \in X | \|x\| = = 1\} \cap \mathrm{Ker}(A - \lambda I)$ a uvažujme posloupnost $x_n \in Y$, tj. pro každé n platí, že $\|x_n\| = 1$ a $x_n = \lambda^{-1}Ax_n$. Z posloupnosti x_n lze vybrat konvergentní podposloupnost, jelikož $\lambda^{-1}A$ je kompaktní, z čehož plyne i kompaktnost jednotkové sféry v $\mathrm{Ker}(A - \lambda I)$. Proto $\dim \mathrm{Ker}(A - \lambda I) < \infty$, což jsme chtěli ukázat. □

1.3.2 Hilbertova-Schmidtova spektrální věta

Než přistoupíme k formulaci spektrální věty připomeňme nejdřív několik důležitých poznatků z teorie matic. Z Jordanovy věty víme, že libovolná čtvercová matice $\mathbf{A}$ typu $n \times n$ je *podobná* matici tvořené Jordanovými buňkami. Existuje tedy invertibilní matice $\mathbf{X}$ a matice $\mathbf{J}$ tvaru

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} J_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & J_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & J_n \end{pmatrix}, \quad \text{kde} \quad J_k = \begin{pmatrix} \lambda_k & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_k & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & & \lambda_k \end{pmatrix},$$

tak, že $\mathbf{J} = \mathbf{XAX^{-1}}$. Matice J_k tvoří Jordanovy buňky, přičemž čísla λ_k jsou vlastní čísla a množina vlastních vektorů, které jsou řešeními rovnice $\mathbf{A}x = \lambda x$, tvoří $\mathrm{Ker}(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I})$. Je-li n různých vlastních čísel řešením charakteristické rovnice $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0$, má $\mathbf{J}$ dokonce *diagonální tvar*.

Nyní se ptejme, kdy je matice $\mathbf{A}$ typu $n \times n$ *diagonalizovatelná*, tedy podobná nějaké diagonální matici. Je to přirozeně tehdy, má-li n lineárně nezávislých vlastních vektorů, které budou tvořit sloupce matice $\mathbf{X}$. Matici $\mathbf{A}$ nazveme *ortogonálně*, resp. *unitárně*[9] *diagonalizovatelnou*, existuje-li ortogonální, resp. unitární matice $\mathbf{P}$ taková, že matice $\mathbf{P^{-1}AP}$ je diagonální. Zřejmě reálná matice $\mathbf{A}$ je ortogonálně diagonalizovatelná, právě když je symetrická[10] (tj. $\mathbf{A} = \mathbf{A^T}$). Podobně komplexní matice $\mathbf{A}$ je unitárně diagonalizovatelná, právě když je normální (tj. $\mathbf{AA}^* = \mathbf{A}^*\mathbf{A}$). Nyní přejdeme od matic k lineárním operátorům $A \in L(\mathcal{H})$ na komplexním Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ konečné dimenze. Jsou-li matice $\mathbf{B}(A), \mathbf{C}(A)$ maticemi operátoru A ve dvou bazích prostoru $\mathcal{H}$, pak matice $\mathbf{B}(A), \mathbf{C}(A)$ jsou si podobné, tj. matice $\mathbf{B}(A)$ je diagonalizovatelná, právě když je diagonalizovatelná matice $\mathbf{C}(A)$. O lineárním operátoru tedy řekneme, že je diagonalizovatelný, je-li jeho maticové vyjádření v kterékoli bázi diagonalizovatelné.

Uvažujme nyní libovolou lineární kombinaci $u = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i u_i \in \mathbb{R}^n$, vlastních vektorů nějaké symetrické matice $\mathbf{A}$ typu $n \times n$. Koeficienty α_i lze vyjádřit jako $\alpha_i = \langle \sum_n \alpha_j u_j, u_i \rangle = = \langle u, u_i \rangle$, z čehož plyne, že

$$u = \sum_{i=1}^{n} \langle u, u_i \rangle u_i.$$

Působením matice $\mathbf{A}$ na u dostaneme

$$\mathbf{A}u = \sum_{i=1}^{n} \langle u, u_i \rangle A\, u_i = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \langle u, u_i \rangle u_i, \tag{1.6}$$

což lze interpretovat následujícím způsobem. Nejprve označme P_j projekci na lineární podprostor L_j v $\mathbb{R}^n$, který je generovaný vektory $u_1, u_2, \dots, u_j$. Pak $P_j u = \alpha_j u_j = \langle u, u_j \rangle u_j$, a (1.6) lze tedy psát ve tvaru $\mathbf{A}u = \sum_{i=1}^{j} \lambda_i P_i u$. Podobně lineární zobrazení $A : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

[9] Připomemeňme, že reálná, resp. komplexní matice $\mathbf{A}$ je ortogonální, resp. unitární, jestliže $\mathbf{A^{-1}} = \mathbf{A^T}$, resp. $\mathbf{A^{-1}} = \mathbf{A}^*$.

[10] Získat diagonální tvar symetrické matice je snadné. Z lineární algebry víme, že všechna vlastní čísla symetrické matice jsou reálná a vlastní vektory příslušející k různým vlastním číslům ortogonální. Je-li tedy λ k-násobné vlastní číslo nějaké symetrické matice, pak existuje k vlastních vektorů $v_1, v_2, \dots, v_k \in \mathbb{R}^n$ příslušných λ takových, že $\mathbf{A}v_i = \lambda v_i$, kde $i = 1, \dots, n$. Grammovým-Schmidtovým orotogonalizačním procesem pak nalezneme ortonormální bázi vlastního podprostoru příslušejícího λ.

definované maticí **A** lze vyjádřit jako

$$A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i P_i, \tag{1.7}$$

kde P_i jsou ortogonální projekce na podprostory generované vlastními čísly matice **A**. Dále ukážeme (viz Věta 1.17), jak bude vypadat vztah (1.7) pro kompaktní samoadjungované operátory na konečně dimenzionálním Hilbertově prostoru.

Věta 1.13. *Uvažujme operátor $A \in L(\mathcal{H})$ na konečně dimenzionálním Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$, dále čísla $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ a ortogonální projekce $P_1, P_2, \ldots, P_n$ splňující*

(i) $A = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j P_j$,

(ii) $I = \sum_{j=1}^{n} P_j$,

(iii) $P_i P_j = \delta_{ij} P_i$,

kde I je identické zobrazení na $\mathcal{H}$ a $P_i P_j$ značí složené zobrazení. Pak je operátor A unitárně diagonalizovatelný (tj. existuje unitární operátor U tak, že $U^* A U$ je diagonální), a λ_j jsou jeho vlastní čísla.

Platí i obrácené silnější tvrzení.

Věta 1.14. *Operátor $A \in L(\mathcal{H})$ na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ konečné dimenze je diagonalizovatelný, právě když platí podmínky (i), (ii) a (iii) Věty 1.13. Navíc A je normální, právě když jsou všechny projekce P_j ortogonální. V tomto případě je A dokonce unitárně diagonalizovatelný (tj. existuje ortonormální báze $\mathcal{H}$ tvořená vlastními vektory A a podprostory $\mathrm{Ker}(A - \lambda_j I)$ jsou navzájem ortogonální).*

Nyní uvedeme několik verzí Hilbertovy-Schmidtovy spektrální věty pro kompaktní samoadjungované operátory, k čemuž zavedeme následující označení. Necht' $A \in L(\mathcal{H})$ je kompaktní samoadjungovaný operátor a číslo $\lambda \in \sigma_p(A)$ jeho vlastní číslo. Označme

$$N(\lambda) = \{\psi \in \mathcal{H} | A\psi - \lambda\psi = 0\}$$

prostor vlastních vektorů příslušejících vlastnímu číslu λ. Prostor $N(\lambda)$ je zřejmě pro každé $\lambda \neq 0$ uzavřeným podprostorem $\mathcal{H}$ dimenze $n(\lambda) < \infty$ a pro každé $\lambda \in \sigma_p(A), \lambda \neq 0$ existuje jeho ortonormální báze $\{u_1^\lambda, u_2^\lambda, \ldots, u_{n(\lambda)}^\lambda\}$. Dále označme uzavřený lineární obal množiny

$$U := \{u_i^\lambda | \lambda \in \sigma(A) \backslash \{0\}, 1 \leq i \leq n(\lambda)\}$$

symbolem $\mathcal{M}$. Množina U tvoří ortonormální bázi $\mathcal{M}$, nebot' pro každé $u^\lambda \in N(\lambda)$ a pro každé $u^\nu \in N(\nu)$ platí $u_i^\lambda u_j^\nu = \delta_{\lambda\nu}$.

Věta 1.15 (Hilbertova-Schmidtova spektrální věta)**.** *Je-li A kompaktní samoadjungovaný operátor na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$, pak*

$$\mathcal{H} = \mathcal{M} \oplus \mathrm{Ker}(A),$$

kde $\mathcal{M}$ je uzavřený lineární podprostor generovaný všemi vlastními vektory operátoru A, jež přísluší nenulovým vlastním číslům.

Důkaz. Nejdřív ukažme, že $A\mathcal{M} \subset \mathcal{M}$, tj. že $\mathcal{M}$ je tzv. A-invariantní. Uvažujme výše zavedenou množinu U vlastních vektorů, která je nejvýše spočetná, a lze ji tedy uspořádat do posloupnosti $\{u_1, u_2, \dots, \}$, kde každé u_i je vlastním vektorem příslušejícím nějakému nenulovému vlastnímu číslu λ. Posloupnost vlastních čísel označme $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots\}$. Je-li $x \in \mathcal{M}$, lze jej psát ve tvaru $x = \sum_n \gamma_n u_n$. Aplikací operátoru A na x dostaneme

$$Ax = \sum_n \gamma_n \lambda_n u_n \in \mathcal{M}.$$

Dále ukážeme, že $A\mathcal{M}^\perp \subset \mathcal{M}^\perp$, tj. že $\mathcal{M}$ tzv. redukuje A. Je-li $y \in \mathcal{M}^\perp$ a $x \in \mathcal{M}$, dostaneme $\langle Ay, x\rangle = \langle y, Ax\rangle = 0$, neboť $Ax \in \mathcal{M}$. Dále chceme ukázat, že $\mathcal{M}^\perp \subset \mathrm{Ker}(A)$. Využijme faktu, že $\mathcal{M}^\perp$ je uzavřený podprostor H, který je navíc invariantní vzhledem k působení operátoru A. Pak platí, že zúžení operátoru A na ortogonální doplněk $\mathcal{M}$, které si označíme jako $K := A|_{\mathcal{M}^\perp}$ je opět kompaktní samoadjungovaný operátor na $\mathcal{M}^\perp$. Ukážeme, že spektrum operátotu K tvoří pouze nulový prvek. Uvažujeme-li totiž, že $\lambda \neq 0$ je vlastní číslo K, pak musí existovat $y \in \mathcal{M}^\perp$, $y \neq 0$ takové, že $Ky = \lambda y$, z čehož nutně plyne, že λ je i vlastním číslem operátoru A a $y \in \mathcal{M}$. Ovšem v průniku $\mathcal{M} \cap \mathcal{M}^\perp$ leží pouze nulové prvky, tedy spektrální poloměr $r(K) = 0$, tedy i norma operátoru $\|K\| = 0$, tj. K musí být nulový operátor a $A\mathcal{M}^\perp = \{0\}$. To znamená, že $\mathcal{M}^\perp \subset \mathrm{Ker}(A)$.

K dokončení důkazu stačí ukázat, že $\mathcal{H} = \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^\perp$ a $\mathcal{M} \cap \mathrm{Ker}(A) = 0$, což není těžké, protože je-li $z \in \mathcal{M} \cap \mathrm{Ker}(A)$, je zase $z = \sum \beta_n u_n$ a $Az = \sum \beta_n \lambda_n u_n = 0$. Je-li $\{e_\alpha\}_{\alpha \in A}$ ortonormální systém prvků na $\mathcal{H}$, pak pro každé $x \in \mathcal{H}$ platí tzv. Parsevalova rovnost

$$x = \sum_{\alpha \in A} \langle x, e_\alpha\rangle e_\alpha,$$

z níž plyne, že $\beta_n \lambda_n = 0$ pro všechna n. Protože $\lambda_n \neq 0$ pro všechna n, musí nutně být $\beta_n = 0$. □

Z Hilbertovy-Schmidtovy věty plyne, že pro každý kompaktní samoadjungovaný, obecněji dokonce i pro každý normální operátor A na $\mathcal{H}$, existuje ortonormální báze $\mathcal{H}$ tvořená vlastními vektory A. Každý kompaktní samoadjungovaný operátor je diagonalizovatelný - stačí vzít libovolnou ortonormální bázi $\mathrm{Ker}(A)$ společně s vlastními vektory u_n, které tvoří ortonormální bázi $\mathcal{M}$ (viz důkaz Věty 1.15). V dalším se seznámíme s několika důsledky, resp. obvyklejšími verzemi Hilbertovy-Schmidtovy spektrální věty.

Věta 1.16. *Je-li A kompaktní samoadjungovaný operátor na $\mathcal{H}$, pak existuje posloupnost reálných čísel $\{\lambda_n\}$ a ortonormální soustava $\{u_n\}$ taková, že*

$$Ax = \sum_n \lambda_n \langle x, u_n\rangle u_n \qquad \forall x \in \mathcal{H}.$$

Důkaz. Jelikož výše popsaná soustava $\{u_n\}$ tvoří bázi $\mathcal{M}$ a $\mathcal{H} = \mathcal{M} \oplus \mathrm{Ker}(A)$, lze každé $x \in \mathcal{H}$ jednoznačně vyjádřit jako $x = \sum_n \langle x, u_n\rangle u_n + z$, přičemž $Az = 0$. Odtud již plyne věta. □

Věta 1.17. *Nechť $A \in L(\mathcal{H})$ je kompaktní samoadjungovaný operátor, $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots\}$ všechna různá nenulová vlastní čísla A a P_n ortonormální projekce $\mathcal{H}$ na $\mathrm{Ker}(A - \lambda_n I)$. Pak $P_i P_j = \delta_{ij} P_i$ a A lze vyjádřit jako řadu $\sum_j \lambda_j P_j$ konvergentní v normě prostoru $L(\mathcal{H})$.*

Důkaz. Ukážeme, že řada $\sum_j \lambda_j P_j$ je konvergentní v normě prostoru $L(\mathcal{H})$. K tomu použijeme odhad

$$\left\| A - \sum_{j=1}^{n} \lambda_j P_j \right\| = \left\| \sum_{j=n+1} \lambda_j P_j \right\| \leq \max\{|\lambda_j| \ : j \geq n+1\}.$$

Z Věty 1.12 víme, že jediným hromadným bodem posloupnosti $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots\}$ vlastních čísel kompaktního operátoru je nula. Protože norma operátoru A je rovna absolutní hodnotě jeho největšího vlastního čísla, je řada $\sum_j \lambda_j P_j$ konvergentní, což jsme chtěli ukázat. □

Je-li $\{P_n\}$ soubor navzájem ortogonálních projekcí na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$, pak $\sum_n P_n x$ nutně bodově konverguje pro všechna $x \in \mathcal{H}$ k projekci P prostoru $\mathcal{H}$ na uzavřený lineární obal $\overline{\mathrm{Lin}}\{\mathrm{Ran}(P_n)\}$.

Definice 1.10. O množině vzájemně ortogonálních projekcí $\{P_n\}$ řekneme, že je *rozkladem identity*, jestliže je uzavřeným lineárním obalem $\{\mathrm{Ran}(P_n)\}$ celý prostor $\mathcal{H}$, tedy jestliže $x = \sum_n P_n x$ pro každé $x \in \mathcal{H}$.

Označíme-li P_n projekci $\mathcal{H}$ na $\mathrm{Ker}(A - \lambda_n I)$ a P_0 projekci na $\mathrm{Ker}(A)$, lze ukázat, že $A = \sum_{n \geq 0} P_n$, tedy $\{P_n\}$ tvoří rozklad identity a o rovnosti $A = \sum_j \lambda_j P_j$ z Věty 1.17 hovoříme jako o *spektrálním rozkladu operátoru* A.

Jak jsme řekli již dříve, operátor A je diagonalizovatelný, existuje-li ortonormální báze Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$ tvořená vlastními vektory operátoru A. Omezíme-li se pouze na separabilní Hilbertovy prostory, pak je A diagonalizovatelný, právě když existuje ortonormální báze $\{x_n\}$ prostoru $\mathcal{H}$ a posloupnost vlastních čísel $\{\lambda_n\}$ operátoru A taková, že $Ax_n = \lambda_n x_n$.

Z důsledků Hilbertovy-Schmidtovy věty plyne, že pro každý kompaktní samoadjungovaný operátor A platí rovnost $Ax = \sum_k \lambda_k P_k x$, kde P_k je projekce, která x přiřadí $\langle x, x_k \rangle x_k$. Suma je konečná, resp. nekonečná, jestliže existuje, resp. neexistuje nekonečně mnoho různých nenulových vlastních hodnot. Nyní upravme definici projekce tak, že sdružíme projekce příslušející vícenásobným vlastním hodnotám, označme tedy

$$P_k x = \sum_{\lambda_i = \lambda_k} \lambda_i \langle x, x_i \rangle x_i.$$

V tomto případě je již součet konečný, neboť každá vlastní hodnota má konečnou násobnost, a P_k je ortogonální projekce[11] na vlastní podprostor příslušející vlastní hodnotě λ_k.

[11] Že je P_k ortogonální projekce ověříme snadno. Pro $j \neq k$ počítejme

$$\begin{aligned} P_j P_k x = P_j \Big(\sum_{\lambda_i = \lambda_k} \lambda_i \langle x, x_i \rangle x_i \Big) &= \sum_{\lambda_l = \lambda_j} \lambda_j \Big\langle \sum_{\lambda_i = \lambda_k} \langle x, x_i \rangle x_i, x_l \Big\rangle x_k = \\ &= \sum_{\lambda_k = \lambda_j} \lambda_j \sum_{\lambda_i = \lambda_k} \lambda_k \langle x, x_i \rangle \langle x_i, x_k \rangle x_k = 0 \end{aligned}$$

pro každé $x \in \mathcal{H}$. Zřejmě $P_k^2 = P_k$, a protože λ_k je reálné, je projekce P_k symetrická, neboť

$$\begin{aligned} \langle P_k x, y \rangle - \langle x, P_k y \rangle &= \Big\langle \sum_{\lambda_i = \lambda_k} \lambda_i \langle x, x_i \rangle x_i, y \Big\rangle - \Big\langle x, \sum_{\lambda_i = \lambda_k} \lambda_k \langle y, x_i \rangle x_i \Big\rangle = \\ &= \sum_{\lambda_i = \lambda_k} \lambda_k \langle x, x_i \rangle \langle x_i, y \rangle - \sum_{\lambda_i = \lambda_k} \overline{\lambda_k \langle y, x_i \rangle} \langle x, x_i \rangle = 0. \end{aligned}$$

Z Věty 1.7 víme, že projekce je ortogonální právě když je symetrická. Ukázali jsme tedy, že P_k je ortogonální projekce.

V rovnici

$$Ax = \sum_k \lambda_k P_k x \tag{1.8}$$

teď sčítáme přes různé vlastní hodnoty λ_k a toto budeme dodržovat i v dalším.

Podle Hilbertovy-Schmidtovy spektrální Věty 1.15 je $\mathcal{H} = \mathcal{M} \oplus \mathrm{Ker}(A)$, kde $\mathcal{M}$ je generované vlastními vektory $\{x_1, x_2, \dots\}$ příslušejícími nenulovým vlastním číslům. Tedy každé $x \in \mathcal{H}$ lze vyjádřit jako

$$x = u + v, \qquad u \in \mathcal{M},\ v \in \mathrm{Ker}(A).$$

Navíc $u = \sum_k P_k x$, neboť $P_k x = P_k u$. Zavedeme-li operátor P_0 rovností $P_0 x = v$, pak

$$x = \sum_k P_k x + P_0 x$$

a zřejmě $P_j P_0 = P_0 P_j = 0$, $P_0^2 = P_0$. Dále pro $\lambda \in \mathbb{R}$, $x \in \mathcal{H}$ zavedeme jednoparametrický systém lineárních operátorů E_λ předpisem

$$E_\lambda x = \begin{cases} \sum\limits_{\lambda_k \le \lambda} P_k x, & \text{je-li } \lambda < 0 \\ x - \sum\limits_{\lambda_k > \lambda} P_k x, & \text{je-li } \lambda \ge 0. \end{cases}$$

Nesplňuje-li žádné vlastní číslo λ_k sumační podmínku, pak uvažujeme nulový součet. Stručně shrňme vlastnosti operátoru E_λ:

- Pro $\lambda < \mu < 0$, resp. $\lambda < 0 < \mu$, resp. $0 < \lambda \le \mu$ platí

  $$E_\mu E_\lambda x = \sum_{\lambda_k \le \mu} P_k \Big(\sum_{\lambda_j \le \lambda} P_j x \Big) = \sum_{\lambda_k \le \mu} \sum_{\lambda_j \le \lambda} P_k P_j x = \sum_{\lambda_j \le \lambda} P_j x_j = E_\lambda x.$$

  Speciálně pro $\lambda = \mu$ je $E_\lambda^2 = E_\lambda$.

- Operátor E_λ je symetrický, jelikož je definován jako součet symetrických operátorů, což je opět symetrický operátor.

- Operátor E_λ je zprava spojitý, a to v následujícím smyslu: $\lim_{\lambda \to \mu^+} E_\lambda x = E_\mu x$ pro každé $x \in \mathcal{H}$.

- Jelikož podle Věty 1.11 platí, že $\sigma(A) \subset [m(A), M(A)]$, kde $m(A), M(A) \in \sigma(A)$, pak zřejmě $E_\lambda = 0$ pro $\lambda \le m(A)$ a $E_\lambda = I$ pro $\lambda \ge M(A)$.

Limitu $\lim_{\lambda \to \mu^-} E_\lambda x$ označíme $E_{\mu-0} x$[12]. Pro $\delta E_\lambda = E_\lambda - E_{\lambda-0}$ platí

$$\delta E_\lambda = \begin{cases} P_k, & \text{je-li } \lambda = \lambda_k \\ 0, & \text{není-li } \lambda \text{ vlastní hodnotou a } \lambda \ne 0. \end{cases}$$

[12]Poznamenejme, že pomocí operátoru E_λ lze nyní popsat bodové a spojité spektrum, a to následujícím způsobem. Je-li $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ spojitý samoadjungovaný operátor, pak bodové spektrum $\sigma_p(A)$ je tvořeno body $\mu \in [m(A), M(A)]$, v nichž $E_\mu \ne E_{\mu-0}$ (tj. E_μ se v takových bodech chová skokově). Je-li $\mu \in \sigma_p(A)$, příslušný vlastní podprostor je roven $\mathrm{Ran}(E_\mu - E_{\mu-0})$.

Naopak spojité spektrum operátoru A je tvořeno právě těmi μ, pro která $E_\mu = E_{\mu-0}$, ale E_λ není konstantní v žádném okolí bodu μ. Důkaz viz [8].

Speciálně je $E_0 - E_{0-0} = P_0$. Vztah (1.8) lze nyní pomocí operátoru E_λ vyjádřit ve tvaru

$$Ax = \int_a^b \lambda dE_\lambda x, \tag{1.9}$$

kde $[a, b]$ je libovolný uzavřený interval takový, že $a < m(A) = \inf\langle Ax, x\rangle$ a $b \geq M(A) = \sup\langle Ax, x\rangle$. Integrál (1.9) chápeme jako Riemannův-Stieltjesův integrál. Připomeňme, že Riemannův-Stieltjesův integrál pro funkci $f(t)$ je obecně zaveden jako

$$\int_a^b f(t)dg(t) := \lim_{\nu(\mathcal{D}_n)\to 0} \sum_{j=1}^n f(t_j)[g(t_j) - g(t_{j-1})],$$

kde $\nu(\mathcal{D}_n)$ je norma dělení intervalu [a,b], přičemž $a = t_0 < t_1 < \ldots < t_n = b$. Podobně definujeme integrál i pro funkce nabývající hodnot v Hilbertově prostoru. Pro $a < m(A)$, $b \geq M(A)$ uvažujme opět dělení $a = t_0 < t_1 < \ldots < t_n = b$ a součet

$$\sum_{j=1}^n t_j[E_{t_j} - E_{t_{j-1}}]x. \tag{1.10}$$

Zobrazení $g(\lambda)$ přiřazuje vlastnímu číslu $\lambda \in [a, b]$ projekci $E_\lambda x \in \mathcal{H}$. Limitním přechodem pro $\nu(\mathcal{D}_n) \to 0$ v součtu (1.10) dostaneme

$$\lim_{\nu(\mathcal{D}_n)\to 0} \sum_{j=1}^n t_j[E_{t_j}x - E_{t_{j-1}}x] = \int_a^b \lambda dg(\lambda) = \int_a^b \lambda d(E_\lambda x),$$

což je pravá strana vztahu (1.9).

Na závěr zformulujeme spektrální větu pro spojité samoadjungované operátory definované na komplexním Hilbertově prostoru. Důkaz této věty je uveden v [8]. Zdůrazněme, že nyní již nepředpokládáme kompaktnost operátoru A, a spektrum A tedy obecně může být daleko složitější.

Věta 1.18. *Je-li A spojitý samoadjungovaný operátor na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$, pak existuje právě jeden soubor ortogonálních projekcí $\{E_\lambda\}_{\lambda\in\mathbb{R}}$ splňující*

1. $E_\lambda E_\mu = E_\mu E_\lambda$ *pro* $\lambda \leq \mu$,
2. $\lim_{\mu\to\lambda^+} E_\mu x = E_\lambda x$,
3. $E_\lambda = 0$ *pro* $\lambda < m(A)$, $E_\lambda = I$ *pro* $M(A) \leq \lambda$,
4. $E_\lambda A = AE_\lambda$.

Navíc pro každé $x, y \in \mathcal{H}$ má skalární součin $\langle E_\lambda x, y\rangle$ jako funkce proměnné λ konečnou variaci a

$$\langle Ax, y\rangle = \int_a^b \lambda d\langle E_\lambda x, y\rangle,$$

kde integrál je Riemannův-Stieltjesův integrál na intervalu $[a, b]$, přičemž $a < m(A)$, $b \geq M(A)$.

Poznamenejme, že soubor projekcí $\{E_\lambda\}_{\lambda\in\mathbb{R}}$ se nazývá *rozklad identity*, resp. *spektrální třída* příslušející operátoru A. Lze ukázat (viz [7]), že existuje jednoznačná korespondence mezi spojitými lineárními samoadjungovanými operátory a třídami $\{E_\lambda\}_{\lambda\in\mathbb{R}}$ ortogonálních projekcí, které tvoří rozklad identity. Pro fyzikální aplikace je velmi podstatné, že Větu 1.18 lze zobecnit i pro neomezené samoadjungované, dokonce i neomezené normální operátory: pro každý normální operátor A na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ existuje právě jeden rozklad identity takový, že

$$\langle Ax, y\rangle = \int_{\sigma(A)} \lambda d\langle E_\lambda x, y\rangle \qquad \forall x, y \in \mathcal{H}.$$

Toto tvrzení je dokázáno v [7].

Následující věta, jejíž důkaz je uveden v [8], pro nás bude velmi významným výsledkem, protože ji využijeme při řešení Schrödingerovy rovnice v následující kapitole. Jedná se o jednu ze základních vět operátorového počtu.

Věta 1.19. *Pro libovolnou spojitou funkci $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ lze zavést funkci $f : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ spojitého samoadjungovaného operátoru A jako*

$$f(A) = \int_a^b f(\lambda) dE_\lambda. \tag{1.11}$$

Vztah (1.11) lze opět zobecnit pro neomezené samoadjungované, dokonce i pro neomezené normální operátory (podrobněji viz [7]).

1.4 Význam spektrální věty v kvantové dynamice

Jaký je fyzikální význam předchozích úvah? Představme si, že známe počáteční stav $\psi(0)$ kvantově mechanického systému a zajímá nás, v jakém stavu se bude systém nacházet v nějakém čase t. Tento nový stav $\psi(t)$ obecně získáme působením (zatím blíže nespecifikovaného) operátoru $\hat{U}$ na původní stav $\psi(t)$, tedy

$$\psi(t) = \hat{U}(t)\psi(0).$$

Z principu superpozice ihned plyne linearita operátoru $\hat{U}$. Navíc $\psi(t)$ má jednotkovou normu, z čehož dostáváme, že $\hat{U}$ je unitární, neboť

$$\left\|\hat{U}(t)\psi\right\| = \|\psi\|.$$

Dále chceme, aby bylo $\psi(t)$ určeno jednoznačně, což zajistíme podmínkami

$$\hat{U}(0) = I, \qquad \hat{U}(t+s) = \hat{U}(t)\hat{U}(s).$$

Množina operátorů $\hat{U}(t)$ s výše popsanými vlastnostmi tvoří tzv. *silně spojitou jednoparametrickou unitární grupu*, kterou zavedeme v následující definici.

Definice 1.11. Třídu $\{A(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ omezených operátorů na Banachově prostoru X nazveme *jednoparametrickou grupou operátorů*, resp. C_0*-grupou*, jestliže pro každý operátor A platí

1. $A(0) = I$,
2. $A(t)A(s) = A(t+s)$ pro každou dvojici $s, t \in \mathbb{R}$,

3. $\lim_{t\to 0} A(t)x = x$ pro každé $x \in X$,

kde I je identické zobrazení na X a podmínky 1 a 3 vyjadřují *silnou spojitost*.

Z definice ihned plyne, že operátor $A(t)$ má inverzi $(A(t))^{-1}$ pro každé $t \in \mathbb{R}$ a platí $(A(t))^{-1} = A(-t)$. Zabývejme se nyní jednoparametrickými grupami na Hilbertových prostorech, konkrétně uvažujme, že všechny operátory tvořící takovou grupu jsou navíc unitární. Jednoparametrickou grupu operátorů $\{\hat{U}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ nazveme *unitární (silně spojitou) grupou*, je-li $\hat{U}(t)$ unitární operátor na $\mathcal{H}$ pro každé $t \in \mathbb{R}$. Pro každé $\psi \in \mathcal{H}$ má podmínka silné spojitosti tvar

$$\lim_{t\to t_0} \hat{U}(t)\psi = \hat{U}(t_0)\psi.$$

Každá C_0-grupa operátorů $\{A(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ má nějaký infinitezimální generátor, přičemž v případě právě zavedené unitární grupy, je tímto generátorem samoadjungovaný operátor $\hat{H}$, běžně nazývaný Hamiltonián.

Definice 1.12. *Infinitezimálním generátorem* grupy $\{A(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ nazveme lineární operátor T s definičním oborem $D(T) := \{x \in X : \lim_{t\to 0} \frac{1}{t}(A(t)x - x)\text{ existuje}\}$, přičemž pro každé $x \in D(T)$ je operátor T dán předpisem

$$Tx = \lim_{t\to 0} \frac{1}{t}(A(t)x - x)).$$

Zřejmě $D(T)$ je lineární podprostor Banachova prostoru X a T je linerání operátor na X.

Platí, že každá C_0-grupa operátorů jednoznačně určuje infinitezimální generátor. Jestliže tedy mají dvě C_0-grupy týž generátor, pak se rovnají. V případě unitární C_0-grupy je generátorem Hamiltonián $\hat{H}$, neboť

$$\hat{H}\psi = \lim_{t\to 0} \frac{i\hbar}{t}(\hat{U}(t)\psi - \psi)), \qquad D(\hat{H}) = \left\{\psi \in \mathcal{H} : \lim_{t\to 0} \frac{i\hbar}{t}(\hat{U}(t)\psi - \psi))\text{ existuje}\right\},$$

kde $\hbar$ je Planckova konstanta. Víme-li, že generátorem unitární C_0-grupy je Hamiltonián, snadno se dostaneme k rovnici časového vývoje kvantově mechanického systému. Stačí si uvědomit, co znamená hodnota infinitezimálního generátoru Tx pro $x \in D(T)$, což vysvětlíme pomocí následující definice.

Definice 1.13 (Derivace zobrazení). Nechť f je zobrazení do Banachova prostoru definované v pravém okolí bodu $t \in \mathbb{R}$. Symbolem $d^+f(t)$ označíme pravostrannou derivaci f v bodě t (pokud existuje), tedy

$$d^+f(t) := \lim_{h\to 0^+} \frac{f(t+h) - f(t)}{h}.$$

Levostranná derivace $d^-f(t)$ se zavádí analogicky. Jestliže $d^+f(t) = d^-f(t)$, označíme tuto společnou hodnotu $df(t)$.

Hodnota infinitezimálního generátoru Tx pro $x \in D(A)$ tedy není nic jiného než derivace zobrazení $t \mapsto A(t)x$ pro $t = 0$. Situaci pro $t \neq 0$ popisuje následující věta.

Věta 1.20. *Je-li T generátorem C_0-grupy operátorů $\{A(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ na Banachově prostoru X a $x \in D(T)$, pak také $A(t)x \in D(T)$ a platí*

$$dA(t)x = TA(t)x = A(t)Tx,$$

kde d značí derivaci zobrazení.

Důkaz. Volbou $h > 0$ dostaneme

$$\frac{A(t+h)x - A(t)x}{h} = \frac{A(h) - I}{h}(A(t)x) = A(t)\left(\frac{A(h) - I}{h}x\right),$$

tedy $A(t)x \in D(A)$ a limitním přechodem $h \to 0^+$ máme $d^+A(t)x = TA(t)x = A(t)Tx$. Nyní stačí ukázat, že levostranná derivace zobrazení $t \mapsto A(t)x$ v bodě t existuje a platí $d^-A(t)x = A(t)Tx$. Zvolme opět $h > 0$ a odhadujme

$$\left\|\frac{A(t-h)x - A(t)x}{-h} - A(t)Tx\right\| \leq \left\|A(t-h)\left(\frac{A(h)x - x}{h} - Ax\right)\right\| + \\ + \left\|A(t-h)Tx - A(t)Tx\right\|.$$

Obě normy na pravé straně jdou k nule, čímž jsme ukázali rovnost pravostranné a levostranné derivace. □

Důležitou vlastností výše popsaných infinitezimálních generátorů je, že jsou vždy hustě definované a uzavřené (důkaz viz [3]). Generátory C_0-grup na Hilbertově prostoru charakterizuje následující věta, jejíž důkaz je uveden v [3] a [9].

Věta 1.21 (Stone). *Je-li T generátorem C_0-grupy $\{A(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ operátorů na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$, pak grupa $\{A(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ je unitární, právě když je operátor iT samoadjungovaný. Tj. T generuje nějakou unitární grupu, právě když je iT samoadjungovaný.*

Příklad 1.4. Nechť $A : D(A) \subset \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ je (obecně neomezený) samoadjungovaný operátor na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$. Položíme-li $\hat{U}(t) = \mathrm{e}^{itA}$, $t \in \mathbb{R}$, je $\hat{U}(t)$ unitární operátor na $\mathcal{H}$ a $\{\hat{U}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ tvoří unitární grupu.

Nyní již máme vše připravené k tomu, abychom napsali pohybovou rovnici kvantové mechniky. Známe-li stav $\psi(0) \in D(\hat{H})$, pak $\psi(t)$ získáme řešením Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(t) = \hat{H}\psi(t). \tag{1.12}$$

Pro $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ je řešení jednoduché. Schrödingerova rovnice totiž přejde v systém obyčejných diferenciálních rovnic, neboť Hamiltonián je reprezentován nějakou maticí. Hledané $\psi(t)$ bude mít tvar maticové exponenciály

$$\psi(t) = \psi(0)\mathrm{e}^{-i\hat{H}t} = \psi(0)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-it)^n}{n!}\hat{H}^n, \tag{1.13}$$

kde $\mathrm{e}^{-i\hat{H}t}$ jsme vyjádřili jako konvergentní mocninnou řadu.

Pro větší jednoduchost nyní uvažujme $\mathcal{H} = \mathbb{R}^n$, jelikož pojmy samoadjungovaného a symetrického operátoru zde splývají. Pak $\mathrm{e}^{-i\hat{H}t}$ spočteme snadno. Je-li $\hat{\mathbf{H}}$ pozitivně definitní symetrická matice reprezentující operátor $\hat{H}$, pak uvažujme její diagonalizaci

$$\hat{\mathbf{H}} = \mathbf{S}^{\mathbf{T}}\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}\mathbf{S},$$

kde $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ jsou kladná vlastní čísla matice $\hat{\mathbf{H}}$ a sloupce matice $\mathbf{S}$ tvoří ortogonální systém vlastních vektorů matice $\hat{\mathbf{H}}$. Aplikujeme-li na matici $\hat{\mathbf{H}}$ libovolnou spojitou funkci $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, pak je to v podstatě totéž, jako kdyby tato funkce působila na spektrum, platí totiž

$$f(\hat{\mathbf{H}}) = \mathbf{S}^{\mathbf{T}} \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & f(\lambda_2) & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & f(\lambda_n) \end{pmatrix} \mathbf{S},$$

kde jsme výsledek působení funkce f na spektrum matice $\hat{\mathbf{H}}$ zleva a zprava vynásobili diagonalizující maticí $\mathbf{S}$. V našem případě tedy

$$\mathrm{e}^{-i\hat{\mathbf{H}}t} = \mathbf{S}^{\mathbf{T}} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\lambda_1 t} & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-i\lambda_2 t} & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & \mathrm{e}^{-i\lambda_n t} \end{pmatrix} \mathbf{S}.$$

Výpočet řešení $\psi(t)$ rovnice (1.12) závisí na tom, jak „pěkný“ je Hamiltonián $\hat{H}$ a Hilberův prostor $\mathcal{H}$ daného systému. Samozřejmě ne vždy lze použít řady (1.13). Zcela obecně lze ovšem exponenciálu $\mathrm{e}^{-i\hat{H}t}$ spočítat pomocí operátorového počtu jako

$$\mathrm{e}^{-i\hat{H}t} = \int_{\sigma(\hat{H})} \mathrm{e}^{-i\lambda t} dE_\lambda. \tag{1.14}$$

Potom lze řešení $\psi(t)$ rovnice (1.12) psát ve tvaru

$$\psi(t) = \psi(0) \int_{\sigma(\hat{H})} \mathrm{e}^{-i\lambda t} dE_\lambda. \tag{1.15}$$

Kapitola 2

Aplikace: perturbační teorie

Existuje jen velmi málo analytických řešení Schrödingerovy rovnice, v dalším se tedy zaměříme na řešení přibližná a použijeme dosavadních poznatků z teorie symetrických a samoadjungovaných operátorů ke studiu *časově nezávislé* i *závislé perturbační teorie*.

Předpokládejme, že náš kvantově mechanický problém se od problému, jehož analytické řešení známe, liší pouze málo (v jistém slova smyslu). Příspěvek této odchylky pak přidáme jako opravu energie, resp. vlnové funkce k energii, resp. vlnové fuknci přesně řešpráitelného problému. Pro větší přehlednost zápisu se budeme dále držet Diracovy notace, tj. pro stavový vektor $\psi(x,t) \in \mathcal{H}$ budeme používat označení $|\psi(x,t)\rangle$, tzv. *ket-vektor*, a místo $\psi(x,t) \in \mathcal{H}^*$ budeme psát $\langle\psi(x,t)|$, tzv. *bra-vektor*.

2.1 Časově nezávislá perturbační teorie

V celé kapitole uvažujeme pouze takové Hamiltoniány, které nezávisí explicitně na čase. Naším cílem je nalezení přibližných vyjádření vlastních hodnot energie E_n a příslušných vlastních funkcí $|\psi_n\rangle$ Hamiltoniánu $\hat{H}$, pro nějž neexistují přesná řešení stacionární Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle. \tag{2.1}$$

Je-li Hamiltonián $\hat{H}$ velmi blízký Hamiltoniánu $\hat{H}_0$, pro nějž má rovnice (2.1) přesné řešení, lze jej psát jako součet

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p,$$

kde $\hat{H}_0$ přísluší tzv. *neperturbovanému systému* a $\hat{H}_p$ jisté *perturbaci*. Jak jsme řekli již výše, musí být perturbace dostatečně malá, tj. $\hat{H}_0 \gg \hat{H}_p$, kde $\hat{H}_p$ si můžeme představovat třeba jako slabé elektrické či magnetické pole. Obvykle se používá vyjádření $\hat{H}_p = \lambda\hat{W}$, kde $\lambda \ll 1$, rovnice (2.1) má tedy tvar

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{W})|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \tag{2.2}$$

přičemž řešení zřejmě závisí na tom, zda jsou vlastní hodnoty $\hat{H}_0$ degenerované, či nikoli.

2.1.1 Nedegenerovaná perturbační teorie

V nejjednodušším případě známe vlastní hodnoty $E_n^{(0)}$ a příslušné vlastní funkce $|\phi_n\rangle$, které jsou přesným řešením rovnice

$$\hat{H}_0|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}|\phi_n\rangle,$$

přičemž každé energii $E_n^{(0)}$ přísluší pouze jeden stav $|\phi_n\rangle$. Výpočet korekcí prvních několika řádů je pak v podstatě triviální záležitostí, stačí pouze rozvést perturbované vlastní hodnoty a vlastní stavy do mocninné řady s parametrem λ:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots, \qquad |\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \ldots, \tag{2.3}$$

přičemž pro $\lambda = 0$ zřejmě dostáváme neperturbovaná řešení $E_n = E_n^{(0)}$ a $|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle$. Vlastní hodnota $E_n^{(k)}$, resp. příslušná funkce $|\psi_n^{(k)}\rangle$ tedy představuje k-tou korekci vlastní hodnoty energie, resp. vlastního stavu. Je nutno podotknout, že rozvinout E_n a $|\psi_n\rangle$ do řad (2.3) nemusí být ani v případě dostatečně malých perturbací vždy možné, navíc se často stává, že tyto řady nekonvergují. V praxi se proto často omezujeme pouze na několik prvních členů rozvoje, s nimiž lze většinu problémů spolehlivě řešit.

Nyní ukažme výpočet $E_n^{(1)}$, $E_n^{(2)}$ a $|\psi_n^{(1)}\rangle$. Dosazením rozvojů (2.3) do levé strany Schrödingerovy rovnice (2.2) získáme

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{W})(|\phi_n\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \ldots). \tag{2.4}$$

Obdobně dosazením (2.3) do pravé strany (2.2) obdržíme

$$(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots)(|\phi_n\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \ldots). \tag{2.5}$$

Protože $E_n^{(i)}$ a $|\psi_n^{(i)}\rangle$ jsou lineárně nezávislé pro všechna i, stačí porovnávat koeficienty u příslušných mocnin parametru λ:

$$\lambda^0 : \hat{H}_0|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}|\phi_n\rangle, \tag{2.6}$$

$$\lambda^1 : \hat{H}_0|\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{W}|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\phi_n\rangle, \tag{2.7}$$

$$\lambda^2 : \hat{H}_0|\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{W}|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|\phi_n\rangle, \tag{2.8}$$

přičemž předpokládáme, že $\langle\phi_n|\psi_n\rangle \simeq 1$, neboť $|\psi_n\rangle$ je velmi blízké $|\phi_n\rangle$. Po normování $|\psi_n\rangle$ už platí přesně

$$\langle\phi_n|\psi_n\rangle = 1. \tag{2.9}$$

Dosadíme-li do rovnice (2.9) rozvoj $|\psi_n\rangle$ z (2.3), dostaneme

$$\lambda\langle\phi_n|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2\langle\phi_n|\psi_n^{(2)}\rangle + \ldots = 0,$$

a protože $\lambda \neq 0$, musí platit $\langle\phi_n|\psi_n^{(1)}\rangle = \langle\phi_n|\psi_n^{(2)}\rangle = \ldots = 0$.

Korekce $E_n^{(1)}$, resp. $E_n^{(2)}$ získáme vynásobením rovnice (2.7), resp. (2.8) bra-vektorem $\langle\phi_n|$, tedy

$$E_n^{(1)} = \langle\phi_n|\hat{W}|\phi_n\rangle, \qquad \text{resp. } E_n^{(2)} = \langle\phi_n|\hat{W}|\psi_n^{(1)}\rangle, \tag{2.10}$$

kde jsme využili relace ortogonality $\langle\phi_n|\psi_n^{(1)}\rangle = \langle\phi_n|\psi_n^{(2)}\rangle = 0$ a vztahu $\langle\phi_n|\phi_n\rangle = 1$. Výraz pro $E_n^{(1)}$ nyní lze dosadit do rozvoje (2.3), a vyjádřit tak E_n jako

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle\phi_n|\hat{H}_p|\phi_n\rangle.$$

Při odvození korekce $|\psi_n^{(1)}\rangle$ vlastní funkce $|\psi_n\rangle$ budeme vycházet z toho, že množina neperturbovaných stavů $|\psi_n\rangle$ tvoří úplnou ortonormální bázi příslušného Hilbertova prostoru. Vyjádříme-li $|\psi_n^{(1)}\rangle$ v této bázi a využijeme-li ortogonality $\langle\phi_n|$ a $|\psi_n^{(1)}\rangle$ (tedy nulovosti skalárního součinu $\langle\phi_n|\psi_n^{(1)}\rangle$), dostaneme:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \left(\sum_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m|\right)|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n}\langle\phi_m|\psi_n^{(1)}\rangle|\phi_m\rangle = \sum_{m\neq n}\frac{\langle\phi_m|\hat{W}|\phi_n\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}|\phi_m\rangle, \tag{2.11}$$

kde $\langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle$ jsme vyjádřili z rovnice (2.7) vynásobené bra-vektorem $\langle \phi_m |$. Dosazením právě vyjádřené korekce $|\psi_n^{(1)}\rangle$ do rozvoje (2.3) vlastních funkcí $|\psi_n\rangle$ obdržíme

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle. \tag{2.12}$$

Nyní můžeme jednoduše vyjádřit také korekci $E_n^{(2)}$. Z rovnice (2.10) již víme, že $E_n^{(2)} = \langle \phi_n | \hat{W} | \psi_n^{(1)} \rangle$, a výraz pro $|\psi_n^{(1)}\rangle$ jsme právě spočetli, tj.

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

Rozvoj vlastních hodnot energií E_n až do druhého řádu lze tedy psát jako

$$E_n = E_0 + \langle \phi_n | \hat{H}_p | \phi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots . \tag{2.13}$$

Oprava druhého řádu k energii základního stavu (tj. pro $E_n^{(0)} < E_m^{(0)}$) je vždy záporná.

Pokud řady (2.3) konvergují, lze obdobně spočítat korekce libovolného řádu, v praxi ovšem stačí uvažovat vlnové funkce do první aproximace a energie do druhé aproximace. Nutnou podmínkou konvergence E_n a $|\psi_n\rangle$ vyjádřených rovnicemi (2.12) a (2.13) je, aby každá oprava byla *malá* ve srovnání s opravou předešlou, tedy aby pro každé $m \neq n$ platilo

$$\left| \frac{\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \right| \ll 1. \tag{2.14}$$

Podmínka použitelnosti perturbační teorie vede k požadavku, aby nediagonální prvky operátoru $\hat{H}_p$ reprezentujícího perturbaci byly malé oproti absolutní hodnotě rozdílu příslušných hodnot neperturbovaných energií. Důkaz konvergence řad (2.3) je ovšem pro většinu problémů, které mají praktický význam, velmi složitý a v některých případech dostaneme v první aproximaci dobrý výsledek dokonce i tehdy, když tyto řady divergují.

Poznamenejme, že vztahy (2.12) a (2.13) lze použít i v případě, patří-li část stavů m ke spojitému spektru. Potom pouze sumy nahradíme integrály. Základním předpokladem perturbační teorie je, že pro $\lambda \to 0$ přejdou vlastní hodnoty a funkce operátoru $\hat{H}$ spojitě ve vlastní hodnoty a funkce operátoru $\hat{H}_0$. V některých situacích ovšem tato podmínka nemusí být splněna a perturbace může ovlivnit charakter řešení tak, že změní problém s diskrétním spektrem na problém se spektrem spojitým. Uvažujme např. Hamiltonián

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{x}) = \frac{\hat{p}}{2m} + \frac{1}{2}\mu\omega^2\hat{x}^2 + \lambda\hat{x}^3, \tag{2.15}$$

kde μ a ω jsou fyzikální konstanty, $\hat{p}$ je operátor hybnosti a $\hat{W} = \hat{x}^3$ operátor perturbace. Je ihned vidět, že pro $\lambda = 0$ je tento Hamiltonián shodný s Hamiltoniánem lineárního harmonického oscilátoru s diskrétním energiovým spektrem $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Pro malé hodnoty λ platí

$$\lambda |\langle \phi_n | x^3 | \phi_m \rangle| \ll |E_n - E_m| = \hbar\omega |n - m|.$$

Avšak pro všechny hodnoty $\lambda \neq 0$ má Hamiltonián (2.15) spojité vlastní hodnoty energie, jelikož pro velké záporné hodnoty x bude potenciální energie menší než celková energie částice. V takovém případě popisují vlnové funkce a energie získané perturbační teorií nestacionární stavy. Částice může projít potenciálovým valem ve směru záporných x a vzdálit se do nekonečna, nicméně pro malé hodnoty parametru λ je pravděpodobnost takového chování částice zanedbatelná, a proto budou řešení pomocí perturbační teorie prakticky shodná se stacionárními stavy. Stavy tohoto typu nazýváme *kvazistacionární*.

2.1.2 Perturbační teorie pro případ dvou blízkých hladin

Připomeňme vztahy pro opravu prvního řádu vlnové funkce a opravu druhého řádu vlastní energie spočtené v předchozí kapitole

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\langle\phi_m|\hat{W}|\phi_n\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}|\phi_m\rangle, \qquad E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle\phi_m|\hat{W}|\phi_n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

Z těchto vztahů je patrné, že vyskytne-li se mezi vlastními hodnotami neperturbovaného Hamiltoniánu $\hat{H}_0$ jedna či více energií blízkých $E_n^{(0)}$, budou hodntoty čitatelů příliš velké ve srovnání s hodnotami jmenovatelů, získáme tedy příliš velké opravy na to abychom pro $|\psi_n\rangle$, E_n mohli použít rozvoje (2.3). Je-li počet blízkých vlastních hodnot H_0 kolem n-té hladiny malý, lze se přesto velkým opravám vyhnout. Trik spočívá v *pootočení* systému vlastních funkcí tak, aby $|\phi_n\rangle$ a $|\phi_m\rangle$ byly ortogonální, čímž se nám podaří vynulovat členy $|\psi_n\rangle$, E_n. Tento postup ukážeme na příkladu dvou blízkých hladin.

Uvažujme, že operátor $\hat{H}_0$ má dvě blízké vlastní hodnoty $E_1^{(0)}$ a $E_2^{(0)}$, jimž přísluší vlastní funkce $|\varphi_1\rangle$ a $|\varphi_2\rangle$, přičemž všechny ostatní vlastní hodnoty se od $E_1^{(0)}$ a $E_2^{(0)}$ podstatně liší. Nyní hledejme řešení $|\phi\rangle$ stacionární Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle$$

ve tvaru lineární kombinace vlastních funkcí $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$, tj. $|\phi\rangle = a|\varphi_1\rangle + b|\varphi_2\rangle$. Získáme tak soustavu dvou rovnic

$$\begin{aligned} [\langle\varphi_1|\hat{H}|\varphi_1\rangle - E]a + \langle\varphi_1|\hat{H}|\varphi_2\rangle b = 0, \\ \langle\varphi_2|\hat{H}|\varphi_1\rangle a + [\langle\varphi_2|\hat{H}|\varphi_2\rangle - E]b = 0, \end{aligned} \tag{2.16}$$

jejímž řešením jsou vlastní hodnoty

$$E_{1,2} = \frac{1}{2}(\hat{H}_{11} + \hat{H}_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\hat{H}_{11} - \hat{H}_{22})^2 + |\hat{H}_{12}|^2}, \tag{2.17}$$

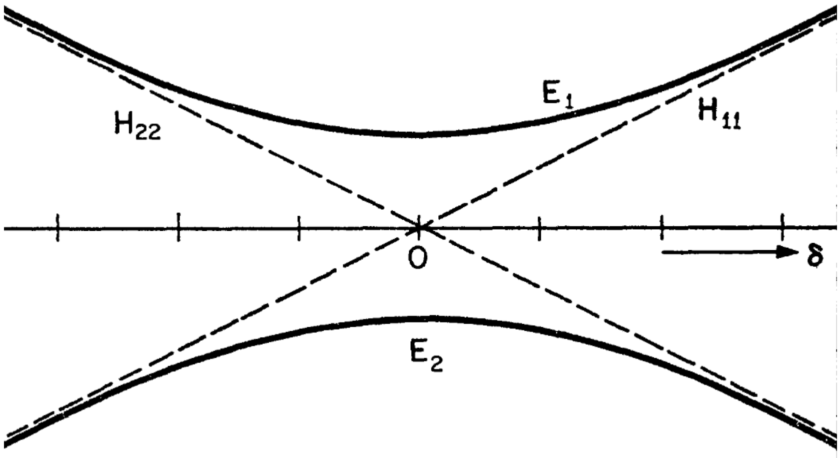
kde znaménko plus, resp minus přísluší energii E_1, resp. E_2 a kde místo $\langle\varphi_m|\hat{H}|\varphi_n\rangle$ píšeme $\hat{H}_{mn}$. Abychom mohli efektivně použít perturbační teorii, musí platit podmínka

$$|\langle\varphi_1|\hat{H}|\varphi_1\rangle - \langle\varphi_2|\hat{H}|\varphi_2\rangle| \gg |\langle\varphi_1|\hat{H}|\varphi_2\rangle|. \tag{2.18}$$

Za této podmínky rozvineme odmocninu ve vztahu (2.17) do Taylorovy řady a po malé úpravě dostaneme

$$E_{1,2} \approx \frac{1}{2}\left(\hat{H}_{11} + \hat{H}_{22} + |\hat{H}_{11} - \hat{H}_{22}| + \frac{2|\hat{H}_{12}|^2}{|\hat{H}_{11} - \hat{H}_{22}|}\right),$$

což je vztah shodný se vztahem pro energii v běžné perturbační teorii.



Obrázek 2.1: Energiové hladiny E_1, E_2 (znázorněny plnou čarou) jako funkce rozdílu energií $\delta := \hat{H}_{11} - \hat{H}_{22}$ neperturbovaného systému pro pevnou hodnotu $\hat{H}_{12}$. Opravy druhého řádu hodnot energie jsou vyznačeny jako rozdíl mezi plnou a přerušovanou čárou. Zdroj [2].

Pokud ovšem v podmínce (2.18) nastane obrácená nerovnost, bude

$$E_{1,2} \approx \frac{1}{2}(\hat{H}_{11} + \hat{H}_{22}) \pm \left[|\hat{H}_{12}| + \frac{(\hat{H}_{11} - \hat{H}_{22})^2}{8|\hat{H}_{12}|} \right].$$

Na obrázku 2.1 si všimněme, že opravy druhého řádu hodnot $\hat{H}_{11}$ a $\hat{H}_{22}$ zvětší vzdálenost mezi hladinami, někdy se proto mluví o *odpuzování hladin*.

Ze soustavy rovnic (2.16) pro poměr koeficientů a a b plyne vztah

$$\frac{a}{b} = \frac{\hat{H}_{12}}{E - \hat{H}_{11}},$$

do něhož za E_1 a E_2 dosadíme z (2.17). Označíme-li $\tan\beta = 2\hat{H}_{12}/(\hat{H}_{11} - \hat{H}_{22})$, pak platí

$$\left(\frac{a}{b}\right)_1 = \cot\frac{\beta}{2}, \qquad \left(\frac{a}{b}\right)_2 = -\tan\frac{\beta}{2}.$$

Na začátku jsme hledali řešení stacionární Schrödingerovy rovnice jako lineární kombinaci $|\phi\rangle = a|\varphi_1\rangle + b|\varphi_2\rangle$. Nyní dostáváme dvě normované vlnové funkce

$$|\phi_1\rangle = |\varphi_1\rangle \cos\frac{\beta}{2} + |\varphi_2\rangle \sin\frac{\beta}{2}, \qquad |\phi_2\rangle = -|\varphi_1\rangle \sin\frac{\beta}{2} + |\varphi_2\rangle \cos\frac{\beta}{2}.$$

Podle toho, zda je, či není splněna podmínka použitelnosti perturbační teorie (2.18), dostaneme:

a) $\beta \approx 0$, tedy $|\phi_1\rangle \approx |\varphi_1\rangle$ a $|\phi_2\rangle \approx |\varphi_2\rangle$, nebo

b) $\beta \approx \pi/2$, tedy $|\phi_1\rangle \approx \sqrt{2}/2(|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle)$ a $|\phi_2\rangle \approx \sqrt{2}/2(-|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle)$.

Takto jsme docílili toho, že se v rozvoji (2.3) vlastních energií E_n a vlastních funkcí $|\psi_n\rangle$ vynulují opravy $E_n^{(2)}$ a $|\phi_n^{(1)}\rangle$, neboť čitatel $\langle\phi_1|\hat{H}|\phi_2\rangle$ je roven nule. Opravy vyšších řádů lze pak počítat pomocí běžné (nedegenerované) perturbační teorie.

2.1.3 Degenerovaná perturbační teorie

Hledejme opět řešení problému vlastních hodnot

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{H}_p)|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle,$$

nyní ovšem předpokládejme, že neperturbovaný Hamiltonián $\hat{H}_0$ je degenerovaný. Bez újmy na obecnosti uvažujme, že $\hat{H}_0$ má k-násobně degenerovanou vlastní hodnotu $E_n^{(0)}$. Existuje tedy množina k vlastních funkcí $|\phi_{n_\alpha}\rangle$, kde $\alpha = 1, 2, \ldots, k$, jež všechny přísluší stejné energii $E_n^{(0)}$, tj. jsou řešením rovnice

$$\hat{H}_0|\phi_{n_\alpha}\rangle = E_n^{(0)}|\phi_{n_\alpha}\rangle.$$

Číslo α může příslušet jednomu i více kvantovým číslům, důležité ale je, že $E_n^{(0)}$ na α nezávisí. Předpokládejme navíc, že stavy $|\phi_{n_\alpha}\rangle$ tvoří ortonormální systém a $|\psi_n\rangle$ mají jednotkovou normu. Napíšeme-li vlastní funkci $|\psi_n\rangle$ v nultém řádu aproximace jako lineární kombinaci

$$|\psi_n\rangle = \sum_{\alpha=1}^{k} a_\alpha|\phi_{n_\alpha}\rangle, \tag{2.19}$$

má normovací podmínka $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1$ tvar

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \sum_{\alpha,\beta} \overline{a}_\alpha a_\beta \delta_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha=1}^{k} |a_\alpha|^2 = 1.$$

Nyní ukážeme, jak vypočítat koeficienty a_α. Dosazením $|\psi_n\rangle = \sum_{\alpha=1}^{k} a_\alpha|\phi_{n_\alpha}\rangle$ do Schrödingerovy rovnice (2.2) dostáváme

$$\sum_\alpha \left[E_n^{(0)}|\phi_{n_\alpha}\rangle + \hat{H}_p|\phi_{n_\alpha}\rangle\right] a_\alpha = E_n \sum_\alpha a_\alpha|\phi_{n_\alpha}\rangle.$$

Tuto rovnici vynásobíme bra-vektorem $\langle\phi_{n_\beta}|$ a využijeme ortogonality systému $|\phi_{n_\alpha}\rangle$.

$$\sum_\alpha a_\alpha \left[E_n^{(0)}\delta_{\alpha,\beta} + \langle\phi_{n_\beta}|\hat{H}_p|\phi_{n_\alpha}\rangle\right] = E_n \sum_\alpha a_\alpha \delta_{\alpha\beta},$$

$$a_\beta E_n^{(0)} + \sum_{\alpha=1}^{k} a_\alpha \langle\phi_{n_\beta}|\hat{H}_p|\phi_{n_\alpha}\rangle = a_\beta E_n. \tag{2.20}$$

Označíme-li podobně jako v předchozí kapitole $\hat{H}_{p_{\beta\alpha}} = \langle\phi_{n_\beta}|\hat{H}_p|\phi_{n_\alpha}\rangle$ a $E_n^{(1)} = E_n - E_n^{(0)}$, lze (2.20) zjednodušit na systém k homogenních lineárních rovnic pro koeficienty a_α

$$\sum_{\alpha=1}^{k} \left(\hat{H}_{p_{\beta\alpha}} - E_n^{(1)}\delta_{\alpha\beta}\right) a_\alpha = 0, \tag{2.21}$$

kde $\beta = 1, 2, \ldots, k$. Systém (2.21) má netriviální řešení, právě když je jeho determinant $\det(\hat{H}_{p_{\beta\alpha}} - E_n^{(1)}\delta_{\alpha\beta})$ roven nule, tedy

$$\det \begin{pmatrix} \hat{H}_{p_{11}} - E_n^{(1)} & \hat{H}_{p_{12}} & \hat{H}_{p_{13}} & \ldots & \hat{H}_{p_{1k}} \\ \hat{H}_{p_{21}} & \hat{H}_{p_{22}} - E_n^{(1)} & \hat{H}_{p_{23}} & \ldots & \hat{H}_{p_{2k}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ \hat{H}_{p?k1} & \hat{H}_{p_{k2}} & \hat{H}_{p_{k3}} & \ldots & \hat{H}_{p_{kk}} - E_n^{(1)} \end{pmatrix} = 0.$$

Řešením rovnice k-tého stupně v proměnné $E_n^{(1)}$ je obecně k různých reálných kořenů $E_{n_\alpha}^{(1)}$ představujících korekce prvního řádu vlastních hodnot E_{n_α} Hamiltoniánu $\hat{H}$.

Koeficienty a_α získáme dosazením kořenů $E_{n_\alpha}^{(1)}$ do rovnice (2.21). Takto spočtené a_α pak dosadíme do lineární kombinace (2.19), čímž jsme vyjádřili hledanou vlastní funkci $|\psi_n\rangle$. Platí, že podle toho, kolik kořenů $E_{n_\alpha}^{(1)}$ je navzájem různých, snižuje se úplně či částečně stupeň degenerace. V případě, kdy je všech k kořenů navzájem různých, jsou vlastní hodnoty $\hat{H}$ nedegenerované, jelikož neperturbovaný problém se rozdělí na k různých hladin

$$E_{n_\alpha} = E_n^{(0)} + E_{n_\alpha}^{(1)}, \qquad \text{pro } \alpha = 1, 2, \ldots, k.$$

Perturbace tedy v tomto případě úplně odstranila degeneraci. Chceme-li pro k-násobně degenerovanou hladinu získat rozvoj vlastních hodnot do prvního řádu včetně, vyjádříme si pro každou tuto hladinu perturbační matici $\hat{H}_p$ typu $k \times k$:

$$\hat{H}_p = \begin{pmatrix} \hat{H}_{p_{11}} & \hat{H}_{p_{12}} & \ldots & \hat{H}_{p_{1k}} \\ \hat{H}_{p_{21}} & \hat{H}_{p_{22}} & \ldots & \hat{H}_{p_{2k}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{H}_{p_{k1}} & \hat{H}_{p_{k2}} & \ldots & \hat{H}_{p_{kk}} \end{pmatrix}.$$

Diagonalizací matice $\hat{H}_p$ najdeme k vlastních hodnot $E_{n_\alpha}^{(1)}$ a jim příslušných vlastních vektorů $a_\alpha = (a_{\alpha_1}, a_{\alpha_2}, \ldots, a_{\alpha_k})^T$, kde $\alpha = 1, 2, \ldots, k$. Rozvoj vlastních hodnot energie do prvního řádu a příslušných vlastních funkcí do nultého řádu je pak dán jako

$$E_{n_\alpha} = E_n^{(0)} + E_{n_\alpha}^{(1)}, \qquad |\psi_{n_\alpha}\rangle = \sum_{\beta=1}^{k} a_{\alpha\beta} |\phi_{n\beta}\rangle,$$

přičemž opět $\alpha = 1, 2, \ldots, k$.

2.2 Časově závislá perturbační teorie

V kvantové mechanice má zvláštní význam třída transformací reprezentovaných unitárními operátory, neboť pomocí nich přecházíme od jedněch proměnných k jiným. Protože se nyní budeme zabývat časově závislými Hamiltoniány, zaměříme se na unitární transformace tvaru $\mathrm{e}^{i\hat{U}}$, kde $\hat{U}$ je nějaký samoadjungovaný operátor. Působením takové unitární transformace sice změníme tvar vlnových fukncí $|\psi\rangle$, nikoli však jejich nezávisle proměnné. Takové transformace se nazývají *fázové*.

Víme již, že každé veličině lze přiřadit nějaký samoadjungovaný operátor. Nicméně toto přiřazení není jednoznačné a ve skutečnosti lze libovolné fyzikální veličině přiřadit celou třídu samoadjungovaných operátorů $\hat{O}$ lišících se pouze unitárními transformacemi $\hat{S}^*\hat{O}\hat{S}$, kde $\hat{S}\hat{S}^* = \hat{I}$ ($\hat{I}$ značí identický operátor) a $\hat{S} = \mathrm{e}^{i\hat{U}}$. Samozřejmě nechceme, aby vlastnosti fyzikálních veličin závisely na této volbě, musí tedy nějak souviset s invarianty samoadjungovaných operátorů, tj. s takovými jejich vlastnostmi, které se nemění při unitárních transformacích. Invarianty samoadjungovaných operátorů shrňme v následující větě.

Věta 2.1. *Nechť $\hat{K}$, $\hat{L}$ jsou samoadjungované operátory na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$. Dále nechť $|\psi\rangle$, $|\psi_m\rangle, |\psi_n\rangle \in \mathcal{H}$, kde $|\psi\rangle$ je vlastní vektor příslušející vlastnímu číslu λ operátoru $\hat{K}$. Pak invarianty operátorů $\hat{K}$, $\hat{L}$ vzhledem k unitární transformaci $\hat{S} = \mathrm{e}^{i\hat{U}}$, kde operátor $\hat{U}$ je samoadjungovaný, jsou následující* *(i)* *samoadjungovanost,*

(ii) *algebraické vztahy mezi operátory,*

(iii) *komutační relace mezi operátory*[1]*,*

(iv) *spektrum vlastních hodnot a*

(v) *maticové prvky operátorů*[2].

Důkaz. Platnost (i) a (ii) je zřejmá. Ověřme vlastnost (iii). Buď $i\hat{M}$ komutátor operátorů $\hat{K}$, $\hat{L}$, tedy

$$[\hat{K}, \hat{L}] = i\hat{M}.$$

Počítejme

$$\hat{S}^*\hat{K}\hat{S}\hat{S}^*\hat{L}\hat{S} - \hat{S}^*\hat{L}\hat{S}\hat{S}^*\hat{K}\hat{S} = i\hat{S}^*\hat{M}\hat{S},$$

$$\hat{K}'\hat{F}' - \hat{F}'\hat{K}' = i\hat{M}',$$

kde čárkované operátory se od nečárkovaných liší unitární transformací $\mathrm{e}^{i\hat{U}}$. Tím jsme ukázali (iii). Nyní ověříme vlastnost (iv). Označíme-li opět transformovaný operátor, resp. vlastní vektor čárkovaně, pak působením unitární transformace $\hat{S}$ na

$$\hat{K}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

dostáváme

$$\hat{S}^*\hat{K}\hat{S}\hat{S}|\psi\rangle = \lambda\hat{S}|\psi\rangle,$$

$$\hat{K}'|\psi'\rangle = \lambda|\psi'\rangle,$$

čímž je platnost (iv) dokázána. Invariance maticových prvků, tj. vlastnost (v), plyne z rovnice

$$\langle\psi_m|\hat{K}|\psi_n\rangle = \int \psi_m^*\hat{K}\psi_n d\zeta = \int \psi_m^*\hat{S}^*\hat{S}^*\hat{K}\hat{S}\hat{S}\psi_n d\zeta = \int (\psi_m^*)'\hat{K}'\psi_n' d\zeta = \langle\psi_m'|\hat{K}'|\psi_n'\rangle.$$

□

Nyní se budeme zabývat unitárními transformacemi parametrizovanými spojitým parametrem $t \in \mathbb{R}$. Ukážeme, že pomocí těchto transformací lze vyjádřit časová změna stavu, a to několika způsoby, které budeme nazývat *reprezentacemi*, resp. *obrazy* změny stavu. Uvedeme tři nejdůležitější reprezentace kvantové mechaniky, a to *Schrödingerovu*, *Heisenbergovu* a *interakční reprezentaci*, lišící se tím, zda uvažujeme časově závislé stavové vektory, operátory, nebo vektory i operátory. V interakční reprezentaci pak ukážeme řešení ústředního problému časově závislé perturbační teorie.

[1]Připomeňme, že *komutátor* $[\hat{A}, \hat{B}]$ operátorů $\hat{A}$ a $\hat{B}$ je definován jako $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Jestliže je $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, řekneme, že $\hat{A}$ a $\hat{B}$ komutují. Důležité je, že pro komutující operátory existuje společný systém vlastních vektorů.

[2]Maticovým prvkem operátoru $\hat{A}$ mezi vektory $|\varphi\rangle$ a $|\psi\rangle$ rozumíme výraz $\langle\varphi|(\hat{A}|\psi\rangle) = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$.

2.2.1 Kvantově mechanické reprezentace

Schrödingerova reprezentace

Nemění-li se spektrum operátorů s časem, nezávisí na čase ani operátory samotné a časovou změnu stavu určuje změna stavového vektoru $|\psi(t)\rangle$ realizovaná nějakou unitární transformací. Tuto transformaci reprezentujeme unitárním operátorem $\hat{U}(t)$ a, jak jsme již dříve ukázali, tvoří unitární operátory jednoparametrickou unitární C_0-grupu generovanou Hamiltoniánem.

Nyní napíšeme Schrödingerovu rovnici pro stav systému $|\psi(t)\rangle_S$ ve Schrödingerově reprezentaci

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_S = \hat{H}|\psi(t)\rangle_S \tag{2.22}$$

a vyjádříme stav $|\psi(t)\rangle_S$ pomocí unitárního tzv. *evolučního operátoru* $\hat{U}(t,t_0) = \mathrm{e}^{i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}$ jako

$$|\psi(t)\rangle_S = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle_S.$$

Schrödingerovu rovnici (2.22) lze pak psát v ekvivaletním tvaru

$$\left[i\hbar\frac{d}{dt} - \hat{H}\right]\hat{U}(t,t_0) = 0. \tag{2.23}$$

Heisenbergova reprezentace

Nyní uvažujme stavové vektory $|\psi\rangle$ pevné v Hilbertově prostoru, a časově nezávislé operátory $\hat{O}_S$ ve Schrödingerově reprezentacei nahraďme časově závislými operátory $\hat{O}(t)_H$. Vztah mezi $\hat{O}_S$ a $\hat{O}(t)_H$ je určen unitární transformací $\hat{U}(t)$:

$$\hat{O}(t)_H = \hat{U}^*\hat{O}_S\hat{U} = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}_S\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}.$$

Stavový vektor $|\psi\rangle_H$ souvisí se stavovým vektorem $|\psi(t)\rangle_S$ vztahem

$$|\psi\rangle_H = |\psi(0)\rangle_S.$$

Abychom získali pohybovou rovnici pro operátor $\hat{O}_H(t)$ v Heisenbergově reprezentaci, musíme spočítat jeho časovou derivaci

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\hat{U}^*\hat{O}_S\hat{U} - \frac{i}{\hbar}\hat{U}^*\hat{O}_S\hat{U} = \frac{i}{\hbar}\hat{U}^*\hat{H}\hat{O}_S\hat{U} - \frac{i}{\hbar}\hat{U}^*\hat{O}\hat{H}\hat{U} = \\ &= \frac{i}{\hbar}\hat{U}^*\hat{H}\hat{U}^*\hat{U}\hat{O}\hat{U} - \frac{i}{\hbar}\hat{U}^*\hat{O}\hat{U}^*\hat{U}\hat{H}\hat{U} = \frac{i}{\hbar}[\hat{O}_H(t),\hat{H}],\end{aligned}$$

kde výraz $[\hat{O}_H(t),\hat{H}]$ je komutátor operátorů $\hat{O}_H(t)$ a $\hat{H}$. Dostáváme tedy

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) = [\hat{O}_H(t),\hat{H}]. \tag{2.24}$$

Zřejmě střední hodnota libovolného operátoru $\hat{O}$ nezávisí na volbě reprezentace:

$${}_H\langle\psi|\hat{O}_H(t)|\psi\rangle_H = {}_S\langle\psi(0)|\hat{U}^*\hat{O}_S\hat{U}|\psi(0)\rangle_S = {}_S\langle\psi(t)|\hat{A}_S|\psi(t)\rangle_S.$$

Interakční (Diracova) reprezentace

V této reprezentaci uvažujeme časově závislé stavové vektory i operátory. Jak vypadají jejich pohybové rovnice? Stavové vektory $|\psi(t)\rangle_I$ v interakční reprezentaci zavedeme jako unitární transformaci $\hat{U}(t)$ vektorů $|\psi(t)\rangle_S$:

$$\psi(t)\rangle_I = \hat{U}(t)|\psi(t)\rangle_S = \mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi(t)\rangle_S, \tag{2.25}$$

přičemž pro $t = 0$ jsou vyjádření v obou reprezentacích shodná.

Časový vývoj $|\psi(t)\rangle_I$ lze získat prostým dosazením do Schrödingerovy rovnice (2.22):

$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle_I}{dt} = \mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\left(i\hbar\frac{d|\psi_S(t)\rangle}{dt} - \hat{H}_0|\psi(t)\rangle_S\right) = \mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle_S - \hat{H}_0|\psi(t)\rangle_I, \tag{2.26}$$

kde vyjádření

$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle_S}{dt} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle_S$$

plyne z rovnice (2.22) a $\mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi(t)\rangle_S = \psi(t)\rangle_I$ dostaneme z definičního vztahu (2.25). Využijeme-li toho, že platí

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

$$\mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{V} = \left(\mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{V}\mathrm{e}^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}\right)\mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar} = \hat{V}_I\mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar},$$

lze rovnici (2.26) převést do tvaru

$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{H}_0\mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi(t)\rangle - \hat{H}_0|\psi(t)\rangle_I + \hat{V}_I\mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi(t)\rangle.$$

Úpravou pravé strany dostaneme hledanou rovnici časového vývoje $|\psi(t)\rangle_I$:

$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{V}_I(t)|\psi(t)\rangle_I, \tag{2.27}$$

Obdobně derivací $d\hat{O}_I(t)/dt$ získáme rovnici časového vývoje operátoru $\hat{O}_I(t)$:

$$\frac{d\hat{O}_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{O}_I(t), \hat{H}_0]. \tag{2.28}$$

2.2.2 Zobecněné transformace mezi kvantově mechanickými reprezentacemi

Nyní místo Schrödingerovy, Diracovy nebo interakční reprezentace uvažujme zcela obecné reprezentace, nazvěme je například A a B, a ptejme se, jak bude vypadat stavový vektor $|\psi(t)\rangle_A$, přejdeme-li od reprezentace A k reprezentaci B. Nový stavový vektor $|\psi(t)\rangle_B$ bude tvaru

$$|\psi(t)\rangle_B = \hat{U}_{BA}(t)|\psi(t)\rangle_A. \tag{2.29}$$

Operátor $\hat{U}_{BA}(t)$ je unitární operátor tvaru

$$\hat{U}_{BA}(t) = \mathrm{e}^{i\hat{G}t/\hbar}, \tag{2.30}$$

kde $\hat{G}$ je samoadjungovaný (a časově nezávislý), přičemž pro inverzní transformaci $\hat{U}_{AB}(t)$ platí: $\hat{U}_{AB}(t) = \hat{U}^*_{BA}(t) = \mathrm{e}^{-i\hat{G}t/\hbar}$. Podobně se ptejme, jak bude vypadat transformace $\hat{O}_A(t) \to \hat{O}_B(t)$ operátoru $\hat{O}_A$ v reprezentaci A do reprezentace B. Platí

$$\hat{O}_B(t) = \hat{U}_{BA}(t)\hat{O}_A(t)\hat{U}_{AB}(t). \tag{2.31}$$

Z definice unitárního operátoru $\hat{U}_{AB}(t)$ plyne, že $\hat{U}_{AB}(t)\hat{U}_{BA}(t) = \hat{I}$ (zde $\hat{I}$ je identický operátor), což zaručuje invarianci střední hodnoty operátoru $\hat{O}$ na volbě reprezentace:

$$\langle \hat{O} \rangle_B = {}_B\langle \psi | \hat{O}_B | \psi \rangle_B = {}_A\langle \psi | \hat{U}_{AB}\hat{U}_{BA}\hat{O}_A\hat{U}_{AB}\hat{U}_{BA}|\psi\rangle_A = {}_A\langle \psi | \hat{O}_A | \psi \rangle_A = \langle \hat{O} \rangle_A.$$

Obě reprezentace tedy dávají shodné fyzikální předpovědi.

Nyní budeme předpokládat, že pohybové rovnice pro stavové vektory a operátory v reprezentaci A jsou tvaru

$$\frac{d}{dt}|\psi\rangle_A = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\psi,A}|\psi\rangle_A, \qquad \frac{d}{dt}\hat{O}_A = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_{\hat{O},A}, \hat{O}_A], \tag{2.32}$$

taktéž v reprezentaci B

$$\frac{d}{dt}|\psi\rangle_B = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\psi,B}|\psi\rangle_B, \qquad \frac{d}{dt}\hat{O}_B = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_{\hat{O},B}, \hat{O}_B], \tag{2.33}$$

kde $\hat{H}_\psi$, resp. $\hat{H}_{\hat{O}}$ jsou Hamiltoniány pro stavové vektory, resp. pro operátory v dané reprezentaci. Transformační vztahy pro $\hat{H}_\psi$ a $\hat{H}_{\hat{O}}$ odvodíme opět snadno derivováním

$$\frac{d}{dt}|\psi\rangle_B = \frac{d}{dt}\left(\hat{U}_{BA}|\psi\rangle_A\right) = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{U}_{BA}\hat{H}_{\psi,A}\hat{U}_{AB} - \hat{G}\right)\hat{U}_{BA}|\psi\rangle_A,$$

a

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_B = \frac{d}{dt}\left(\hat{U}_{BA}\hat{O}_A\hat{U}_{AB}\right) = \frac{i}{\hbar}[\hat{U}_{BA}\hat{H}_{\hat{O},A}\hat{U}_{AB} + \hat{G}, \hat{O}_B],$$

z čehož plynou hledaná vyjádření

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\psi,B} &= \hat{U}_{BA}\hat{H}_{\psi,A}\hat{U}_{AB} - \hat{G}, \\ \hat{H}_{\hat{O},B} &= \hat{U}_{BA}\hat{H}_{\hat{O},A}\hat{U}_{AB} + \hat{G}. \end{aligned} \tag{2.34}$$

Poznamenejme, že součet Hamiltoniánů $\hat{H} = \hat{H}_\psi + \hat{H}_{\hat{O}}$ lze považovat za invariant, neboť

$$\hat{H}_{\psi,B} + \hat{H}_{\hat{O},B} = \hat{H}_{\psi,A} + \hat{H}_{\hat{O},A}.$$

Rozdíly mezi různými reprezentacemi (např. Schrödingerovou, Hesenbergovou, interakční) tedy zřejmě souvisí s tím, jakým způsobem rozdělíme Hamiltonián $\hat{H}$ na část připadající stavům $\hat{H}_\psi$ a na část připadající operátorům $\hat{H}_{\hat{O}}$.

Ukažme nyní, jak se transformují tzv. evoluční operátory. *Evolučním operátorem* v reprezentaci A, resp. B rozumíme operátor $\hat{U}(t)$ takový, že

$$|\psi(t)\rangle_A = \hat{U}_A(t)|\psi(0)\rangle_A, \qquad |\psi(t)\rangle_B = \hat{U}_B|\psi(0)\rangle_B. \tag{2.35}$$

Transformační vztah mezi dvěma evolučními operátory odvodíme pomocí předchozích definic, z nichž vyplývá, že

$$|\psi(t)\rangle_B = \hat{U}_{BA}(t)|\psi(t)\rangle_A = \hat{U}_{BA}\hat{U}_A(t)|\psi(0)\rangle_A.$$

Protože $\hat{U}_{BA}(0) = \hat{U}_{AB}(0) = \hat{I}$, jsou v čase $t = 0$ stavy i operátory v obou reprezentacích stejné, tedy $\hat{U}_B(t)|\psi(0)\rangle_B = \hat{U}_{BA}(t)\hat{U}_A(t)|\psi(0)\rangle_B$. Z toho dostáváme hledaný transformační vztah

$$U_B(t) = \hat{U}_{BA}(t)\hat{U}_A(t). \tag{2.36}$$

Ukázali jsme tak velmi důležitý fakt, totiž že Hamiltoniány $H_\psi(t)$, $\hat{H}_{\hat{O}}(t)$ a evoluční operátor $\hat{U}(t)$ se transformují podle vztahů (2.34) a (2.36), tedy jinak než „běžné operátory", pro jejichž transformace platí rovnice (2.31). Důvod tkví v tom, že uvažované transformace jsou časově závislé a operátory $H_\psi(t)$, $\hat{H}_{\hat{O}}(t)$ a $\hat{U}(t)$ jsme definovali pouze v rámci daných reprezentací.

Jak ve světle právě popsaných zobecněných transformací vypadají Schrödingerova, Heisenbergova a interakční reprezentace? Navrhli jsme, že rozdíly mezi reprezentacemi by mohly souviset s tím, jak rozdělíme Hamiltonián na část připadající stavům a na část připadající operátorům. Ve Schrödingerově reprezentaci jsou časově závislé pouze stavy, nikoli však operátory, tedy

$$\hat{H}_{\psi,S} = \hat{H}, \qquad \hat{H}_{\hat{O},S} = 0. \tag{2.37}$$

V Heisenbergově reprezentaci je to přesně naopak

$$\hat{H}_{\psi,H} = 0, \qquad \hat{H}_{\hat{H},H} = \hat{H}. \tag{2.38}$$

Transformace $S \to H$ mezi Schrödingerovou a Heisenbergovou reprezentací je generována samoadjungovaným operátorem $\hat{G} = \hat{H}$, inverzní transformaci $H \to S$ generuje operátor $\hat{G} = -\hat{H}$.

Výpočty časově závislé perturbační teorie je nejvýhodnější počítat v interakční reprezentaci I, protože souvisí s rozdělením Hamiltoniánu $\hat{H}_S$ na neperturbovanou $\hat{H}_0$ a perturbovanou část $\hat{V}$. Transformace $S \to I$ mezi Schrödingerovou a interakční reprezentací je generována právě neperturbovaným Hamiltoniánem $\hat{G} = \hat{H}_0$. Spočítejme, čemu jsou rovny $\hat{H}_{\psi,I}$ a $\hat{H}_{\hat{O},I}$:

$$\hat{H}_{\psi,I} = \hat{U}_{IS}\hat{H}_{\psi,S}\hat{U}_{SI} - \hat{G} = \hat{U}_{IS}\hat{H}_0\hat{U}_{SI} + \hat{U}_{IS}\hat{V}\hat{U}_{SI} - \hat{H}_0 = \hat{U}_{IS}V\hat{U}_{SI} = \hat{V}_I,$$

$$\hat{H}_{\hat{O},I} = \hat{U}_{IS}\hat{H}_{\hat{O},S}\hat{U}_{SI} + \hat{H}_0 = \hat{H}_0.$$

Pohybové rovnice pro stavové vektory a operátory lze tedy psát ve tvaru

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_I = -\frac{i}{\hbar}V_I(t)|\psi(t)\rangle_I, \qquad \frac{d}{dt}\hat{O}_I(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{O}_I(t)]. \tag{2.39}$$

Dále je užitečné znát transformační vztah pro operátory v interakční reprezentaci:

$$\hat{O}_I(t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{O}_S\mathrm{e}^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \tag{2.40}$$

Evoluční operátor $\hat{U}_S(t)$ Schrödingerovy reprezentace souvisí s evolučním operátorem $\hat{U}_I(t)$ interakční reprezentace vztahem

$$\hat{U}_S(t) = \mathrm{e}^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{U}_I(t), \tag{2.41}$$

čehož využijeme v následující kapitole. Výhodou počítání s operátorem $\hat{U}_I$ je, že z pohybové rovnice zmizí $\hat{H}_0$ a namísto

$$\frac{d}{dt}\hat{U}_S(t) = (\hat{H}_0 + \hat{V})\hat{U}_S(t)$$

nám pak zůstane pouze

$$\frac{d}{dt}\hat{U}_I(t) = \hat{V}_I(t)\hat{U}_I(t).$$

Na konci výpočtu se pak pomocí vztahu (2.41) snadno vrátíme ke Schrödingerově reprezentaci.

2.2.3 Integrální rovnice a pravděpodobnost přechodu

Nastiňme nejprve nejzákladnější otázku, na niž odpovídá časově závislá perturbační teorie. Budeme se zabývat takovými systémy, jejichž Hamiltonián $\hat{H}(t)$ lze rozdělit na časově nezávislou část $\hat{H}_0$ popisující neperturbovaný systém a časově závislou část $\hat{V}(t)$, pro niž platí $\hat{V}(t) \ll \hat{H}_0$. Opět také předpokládejme, že známe vlastní hodnoty E_n a jim příslušné vlastní stavy $|\psi_n\rangle$ Hamiltoniánu $\hat{H}_0$. Stavové vektory $|\Psi_n(t)\rangle$ Hamiltoniánu $\hat{H}(t)$ jsou pak obecně určeny stacionárními stavy $|\psi_n\rangle$, a to následujícím způsobem

$$|\Psi_n(t)\rangle = \mathrm{e}^{-it\hat{H}_0/\hbar}|\psi_n\rangle = \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}|\psi_n\rangle.$$

V čase $t \in [0, \tau]$ vystavíme systém působení vnější časově závislé perturbace $\hat{v}(t)$:

$$\hat{v}(t) = \begin{cases} \hat{V}(t), & t \in [0, \tau] \\ 0, & \text{jinak.} \end{cases}$$

Pro $t \in [0, \tau]$ tedy platí Schrödingerova rovnice

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t))|\Psi(t)\rangle, \tag{2.42}$$

kde $\hat{V}(t)$ charakterizuje interakci systému s vnějším zdrojem perturbace, v jejímž důsledku systém emituje, nebo absorbuje energii, a přejde tak z neperturbovaného vlastního stavu $|\psi_i\rangle$ do neperturbovaného vlastního stavu $|\psi_f\rangle$. Pravděpodobnost, s jakou k tomuto přechodu dojde, je právě onou klíčovou otázkou časově závislé perturbační teorie.

Abychom tuto otázku zodpověděli, podívejme se nejdřív na řešení Schrödingerovy rovnice (2.42), které lze psát ve tvaru

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\mathrm{e}^{-iE_nt}|\psi_n\rangle. \tag{2.43}$$

Výhodnější než počítat koeficienty $c_n(t)$ dosazením $|\Psi(t)\rangle$ zpět do rovnice (2.42) je přejít k její interakční reprezentaci:

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{V}_I(t)|\Psi(t)\rangle_I, \tag{2.44}$$

kde $|\Psi(t)\rangle_I = \mathrm{e}^{i\hat{H}_0t/\hbar}|\Psi(t)\rangle$ a $\hat{V}_I(t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}_0t/\hbar}\hat{V}(t)\mathrm{e}^{-i\hat{H}_0t/\hbar}$. Víme, že stavový vektor $|\Psi(t)\rangle_I$ lze pomocí evolučního operátoru vyjádřit jako $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_i)|\Psi(t_i)\rangle$, a toto vyjádření můžeme dosadit do vztahu pro $|\Psi(t)\rangle_I$:

$$|\Psi(t)\rangle_I = \mathrm{e}^{i\hat{H}_0t/\hbar}|\Psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{i\hat{H}_0t/\hbar}\hat{U}(t, t_i)|\Psi(t_i)\rangle = \mathrm{e}^{i\hat{H}_0t/\hbar}\hat{U}(t, t_i)\mathrm{e}^{-i\hat{H}_0t/\hbar}|\Psi(t_i)\rangle_I, \tag{2.45}$$

kde výraz $\mathrm{e}^{i\hat{H}_0t/\hbar}\hat{U}(t, t_i)\mathrm{e}^{-i\hat{H}_0t/\hbar}$ představuje evoluční operátor $\hat{U}_I(t, t_i)$ v interakční reprezentaci, platí tedy

$$|\Psi(t)\rangle_I = \hat{U}_I(t, t_i)|\Psi(t_i)\rangle_I. \tag{2.46}$$

Dosadíme-li $|\Psi(t)\rangle_I$ do rovnice (2.44), dostaneme rovnici

$$i\hbar \frac{d\hat{U}_I(t, t_i)}{dt} = \hat{V}_I(t)\hat{U}_I(t, t_i), \tag{2.47}$$

jejíž řešení za počáteční podmínky $\hat{U}_I(t_i, t_i) = \hat{I}$ (zde $\hat{I}$ je identický operátor) jsou dána integrální rovnicí

$$\hat{U}_I(t, t_i) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t} \hat{V}_I(t')\hat{U}_I(t', t_i)dt'. \tag{2.48}$$

Pozornému čtenáři zajisté neunikne, že původně jsme chtěli spočítat stav $|\Psi(t)\rangle_I$, místo toho jsme ale nyní spočítali evoluční operátor $\hat{U}_I(t, t_i)$. Tento postup je poněkud obecnější: známe-li totiž operátor $\hat{U}_I(t, t_i)$, lze stav $|\Psi(t)\rangle_I$ jednoduše získat pro *libovolný* počáteční stav $|\Psi(t_i)\rangle_I$ jako $|\Psi(t)\rangle_I = \hat{U}_I(t, t_i)|\Psi(t_i)\rangle_I$, tj. podle rovnice (2.46). Podívejme se znovu na právě získanou rovnici (2.48). Tuto rovnici lze aproximativně řešit za předpokladu, že $\hat{V}_I(t)$ je dostatečně malé, rozvineme-li $\hat{U}_I(t, t_i)$ do řady

$$\hat{U}_I(t, t_i) = \hat{U}_I^{(0)}(t, t_i) + \lambda\hat{U}_I^{(1)}(t, t_i) + \lambda^2\hat{U}_I^{(2)}(t, t_i) + \ldots$$

Zde ukážeme výpočet prvního a druhého řádu aproximace, které se v praxi používá nejčastěji. Dosadíme-li do rovnice (2.48) $\hat{U}_I(t', t_i) = 1$, dostaneme první aproximaci

$$\hat{U}_I^{(1)}(t, t_i) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t} \hat{V}_I(t')dt'.$$

Dále postupujeme iterativně a takto získanou první aproximaci opět dosadíme do rovnice (2.48), nyní tedy $\hat{U}_I(t', t_i) = \hat{U}_I^{(1)}(t, t_i)$, čímž dostaneme druhou aproximaci

$$\hat{U}_I^{(2)}(t, t_i) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t} \hat{V}_I(t')dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_i}^{t} \hat{V}_I(t_1)dt_1 \int_{t_i}^{t_1} \hat{V}_I(t_2)dt_2.$$

Opětovným dosazením $\hat{U}_I(t', t_i) = \hat{U}_I^{(2)}(t, t_i)$ do (2.48) získáme aproximaci třetího řádu atd. Tímto způsobem se lze dostat až k tzv. *Dysonově řadě*

$$\begin{aligned}\hat{U}_I(t, t_i) = 1 &- \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t} \hat{V}_I(t')dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_i}^{t} \hat{V}_I(t_1)dt_1 \int_{t_i}^{t_1} \hat{V}_I(t_2)dt_2 + \ldots \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_i}^{t} \hat{V}_I(t_1)dt_1 \int_{t_i}^{t_1} \hat{V}_I(t_2)dt_2 \int_{t_i}^{t_2} \hat{V}_I(t_3)dt_3 \cdots \int_{t_i}^{t_{n-1}} \hat{V}_I(t_n)dt_n + \ldots\end{aligned} \tag{2.49}$$

Nyní můžeme přejít zpět ke Schrödingerově reprezentaci pomocí transformačního vztahu, který jsme ukázali v předchozí kapitole:

$$\hat{U}_S(t) = \hat{U}_{SI}(t)\hat{U}_I(t) = \mathrm{e}^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{U}_I(t).$$

Připomeňme, že $\hat{V}_I(t) = \hat{U}_0^*(t)\hat{V}(t)\hat{U}(t)$ a $\hat{U}_0(t)\hat{U}_0^*(t_i) = \hat{U}_0(t-t_i)$, tedy

$$\begin{aligned}\hat{U}_S(t) = 1 &- \frac{i}{\hbar}\lambda \int_{t_i}^{t} dt_1 \hat{U}_0(t-t_1)\hat{V}(t_1)\hat{U}_0(t_1) + \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \lambda^2 \int_{t_i}^{t} dt_2 \int_{t_i}^{t_2} dt_1 \hat{U}_0(t-t_2)\hat{V}(t_2)\hat{U}_0(t_2-t_1)\hat{V}(t_1)\hat{U}_0(t_1) + \dots \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \lambda^n \int_{t_i}^{t} dt_n \int_{t_i}^{t_n} dt_{n-1} \cdots \int_{t_i}^{t_2} dt_1 \hat{U}_0(t-t_n)\hat{V}(t_n)\cdots\hat{V}(t_1)\hat{U}_0(t_1).\end{aligned} \tag{2.50}$$

Tento evoluční operátor lze přirozeně interpretovat pomocí kvantových přechodů. První člen popisuje volné šíření počátečního stavu řízené Hamiltoniánem $\hat{H}_0$. Druhý člen popisuje volné šíření v čase t_1, kdy nastává (okamžitý) přechod ze stavu $|\psi(t_1)\rangle$ do stavu $|\psi'\rangle = \hat{V}(t_1)|\psi(t_1)\rangle$. Po tomto přechodu se nový stav $|\psi'\rangle$ opět volně šíří od času t_1 až do t. Integrací podle t_1 se tento člen stane součtem všech možných scénářů vývoje obsahujících právě jeden přechod mezi stavy. Podobně třetí člen je součet všech možných vývojů se dvěma kvantovými přechody, a celý evoluční operátor je tedy sumou všech možných posloupností kvantových přechodů.

Nyní pomocí Dysonovy řady spočítáme pravděpodobnost $P_{if}(t)$ přechodu mezi neperturbovanými vlastními stavy $|\psi_i\rangle$ a $|\psi_f\rangle$ definovanou jako kvadrát absolutní hodnoty maticového elementu $\langle\psi_f|\hat{U}_I(t,t_i)|\psi_i\rangle$. K tomu si přechodovou frekvenci mezi počáteční i a konečnou hladinou f označme jako

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar} = \frac{1}{\hbar}\Big(\langle\psi_f|\hat{H}_0|\psi_f\rangle - \langle\psi_i|\hat{H}_0|\psi_i\rangle\Big).$$

Potom dostaneme pravděpodobnost přechodu

$$\begin{aligned}P_{if}(t) = \Big|\langle\psi_f|\hat{U}_I(t,t_i)|\psi_i\rangle\Big|^2 = \Big|&\langle\psi_f|\psi_i\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{e}^{i\omega_{fi}t'}\langle\psi_f|\hat{V}(t')|\psi_i\rangle dt' + \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_n \int_0^t \mathrm{e}^{i\omega_{fn}t_1}\langle\psi_f|\hat{V}(t_1)|\psi_n\rangle dt_1 \int_0^{t_1} \mathrm{e}^{i\omega_{ni}t_2}\langle\psi_n|\hat{V}(t_2)|\psi_i\rangle dt_2 + \dots\Big|^2,\end{aligned} \tag{2.51}$$

kde jsme použili vztah

$$\langle\psi_f|\hat{V}_I(t')|\psi_i\rangle = \langle\psi_f|\mathrm{e}^{i\hat{H}_0 t'/\hbar}\hat{V}(t')\mathrm{e}^{-i\hat{H}_0 t'/\hbar}|\psi_i\rangle = \langle\psi_f|\hat{V}(t')|\psi_i\rangle \mathrm{e}^{i\omega_{fi}t'}.$$

Pravděpodobnost přechodu mezi stavy $|\psi_i\rangle$ a $|\psi_f\rangle$ danou rovnicí (2.51) lze psát pomocí koeficientů $c_n(t)$ zavedených vztahem (2.43) jako

$$P_{if}(t) = |c_f^{(0)} + c_f^{(1)}(t) + c_f^{(2)}(t) + \dots|^2, \tag{2.52}$$

kde

$$c_f^{(0)} = \langle\psi_f|\psi_i\rangle = \delta_{fi}, \qquad c_f^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t \langle\psi_f|\hat{V}(t')|\psi_i\rangle \mathrm{e}^{i\omega_{fi}t'} dt', \dots$$

Pro přechod ze stavu $|\psi_i\rangle$ do stavu $|\psi_f\rangle$, kde $i \neq f$ (tedy $\langle\psi_f|\psi_i\rangle = 0$), je pravděpodobnost v prvním řádu aproximace

$$P_{if}(t) = \left| -\frac{i}{\hbar}\int_0^t \langle\psi_f|\hat{V}(t')|\psi_i\rangle \mathrm{e}^{i\omega_{fi}t'}dt'\right|^2, \tag{2.53}$$

což pro praktické výpočty většinou dobře postačuje.

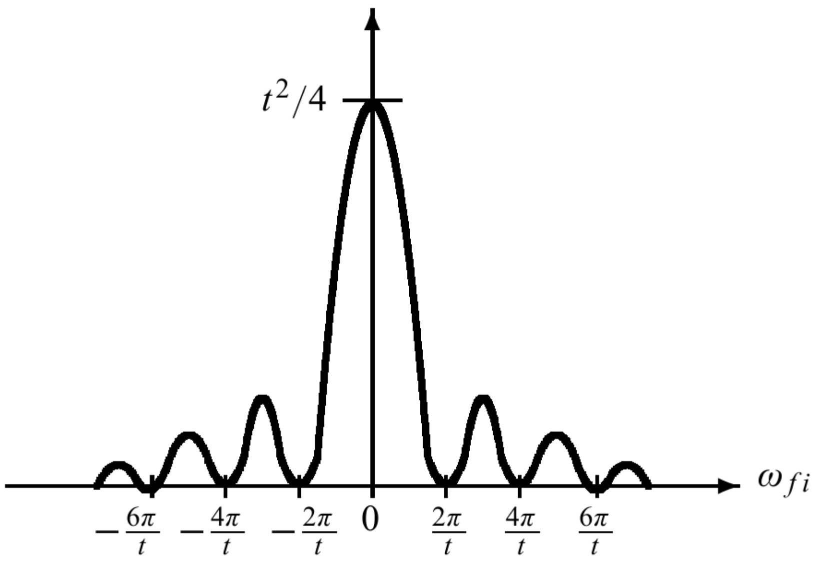
Na závěr se zaměříme na výpočet pravděpodobnosti přechodu ve dvou nejjednodušších, zato však velmi častých situacích, a to v případě konstantní a harmonické perturbace. Právě s těmito typy perturbací se totiž setkáváme, řešíme-li problém interakce atomu se zářením (podrobněji viz [10]).

Pravděpodobnost přechodu pro konstantní perturbace

Předpokládáme-li, že perturbace $\hat{V}$ nezávisí na čase (může jít například o nějaký po částech konstantní potenciál), přejde výše odvozený vztah (2.53) pro pravděpodobnost přechodu mezi stavy $|\psi_i\rangle$ a $|\psi_f\rangle$ do tvaru

$$\begin{aligned} P_{if}(t) &= \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle\int_0^t \mathrm{e}^{i\omega_{fi}t}\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle|^2\left|\frac{\mathrm{e}^{i\omega_{fi}t'}-1}{\omega_{fi}}\right|^2 = \\ &= \frac{4|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle|^2}{\hbar^2\omega_{fi}^2}\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}t}{2}\right), \end{aligned} \tag{2.54}$$

kde jsme využili rovnosti $|\mathrm{e}^{i\theta}-1|^2 = 4\sin^2(\theta/2)$.



Obrázek 2.2: Graf funkce $(\sin^2\frac{\omega_{fi}t}{2})/\omega_{fi}^2$ v závislosti na ω_{fi}, kde $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/2$, pro fixní hodnotu t. Předpokládáme tedy, že ω_{fi} je spojitá proměnná, jinými slovy, že lze přecházet do nekonečně mnoha koncových stavů. Zdroj [10].

Z obrázku 2.2 je patrné, že $P_{if}(t)$ je oscilující funkce, která rychle klesá k nule pro $\omega_{fi} \to \infty$, resp. $\omega_{fi} \to -\infty$. To znamená, že pravděpodobnost nalezení systému ve stavu

$|\psi_f\rangle$ a s energií E_f je největší pro $E_i \simeq E_f$, resp. pro $\omega_{fi} \simeq 0$. Výška centrálního peaku funkce P_{if} se středem v bodě $\omega_{fi} = 0$ je úměrná t^2, jeho šířka je úměrná $1/t$, což znamená, že plocha pod touto křivkou na intervalu $[-2\pi/t, 2\pi/t]$ je úměrná t. Protože je ovšem většina plochy pod křivkou P_{if} právě pod jejím centrálním peakem, je i celková pravděpodobnost přechodu úměrná t. Na obrázku 2.2 uvažujeme hodnotu t pevnou. Pro větší t by funkce P_{if} klesala rychleji a centrální peak by byl vyšší a užší. Představíme-li si větší a větší t, bude tento trend zřejmě pokračovat. Lze tedy usoudit, že pro $t \to \infty$ se funkce P_{if} chová podobně jako Diracova δ-funkce[3]. Diracova δ-funkce sice není funkce v pravém slova smyslu (je to distribuce), lze ale několika způsoby vyjádřit jako limita analytických funkcí (viz např. [10], v příloze). V našem případě je nejvhodnější zvolit vyjádření

$$\delta(y) = \lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(yt)}{\pi y^2 t}.$$

Za předpokladu, že $t \to \infty$ pak lze psát

$$\frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right)}{\pi(\frac{\omega_{fi}}{2})^2 t} = 2\hbar \cdot \delta(\hbar\omega_{fi}) = 2\hbar \cdot \delta(E_f - E_i),$$

kde jsme využili rovnosti $\delta(\omega_{fi}/2) = 2\hbar\delta(\hbar\omega_{fi})$ a $\delta(\hbar\omega_{fi}) = \delta(E_f - E_i)$. Z předchozího plyne, že pravděpodobnost přechodu P_{if} daná rovnicí (2.54) bude mít pro $t \to \infty$ tvar

$$P_{if} = \frac{2\pi t}{\hbar}\left|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle\right|^2 \delta(E_f - E_i). \tag{2.55}$$

Definujme nyní tzv. *přechodový poměr* Γ_{if} jako pravděpodobnost přechodu za jednotku času:

$$\Gamma_{if} = \frac{P_{if}}{t} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle\right|^2 \delta(E_f - E_i). \tag{2.56}$$

Zdůrazněme, že díky delta funkci v rovnici pro Γ_{if} se zachovává energie uvažovaného systému, neboť pro $t \to \infty$ je $\Gamma_{if} \neq 0$ pouze mezi stavy se stejnou energií. Z toho vyplývá velmi důležitý fakt: při konstantních perturbacích dochází výhradně k takovým přechodům, během nichž se energie zachovává.

V praxi se většinou nabízí ne jeden, ale velmi mnoho možných koncových stavů s energiemi blízkými energii počátečního stavu. Je tedy výhodné zavést pojem hustoty koncových stavů $\rho(E_f)$, tj. počet stavů na jednotkový energiový interval. Potom je počet koncových stavů uvnitř energiového intervalu $[E_f, E_f + dE_f]$ roven $\rho(E_f)dE_f$. Ukážeme, jak lze v tomto případě modifikovat výše uvedený vztah (2.56) pro přechodový poměr. Označíme-li nyní přechodový poměr symbolem W_{if}, pak platí

$$W_{if} = \int \frac{P_{if}(t)}{t}\rho(E_f)dE_f = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle|^2 \int \rho(E_f)\delta(E_f - E_i)dE_f =$$
$$= 2\pi/\hbar|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle|^2\rho(E_i). \tag{2.57}$$

Rovnice (2.57) se nazývá *Fermiho zlaté pravidlo* a v kvantové mechanice hraje poměrně důležitou roli (více k odvození a aplikacím lze najít např. v [1] nebo v [4]).

[3]Diracovu δ-funkci lze neformálně popsat jako funkci, která má v nule hodnotu nekonečno a všude jinde nulovou, přičemž její integrál přes celý prostor je roven jedné. Rigorózně se δ-funkce zavádí jako distribuce nebo jako míra. Diracova δ-funkce je taková míra, jejímž argumentem je libovolná podmnožina A reálné osy, a platí, že $\delta(A) = 1$, jestliže $0 \in A$ a $\delta(A) = 0$ jinak. Zavedeme-li ovšem δ-funkci jako míru, nelze už pak zavést její derivaci. Ta se přirozeně definuje až v teorii distribucí, proto je nejvýhodnější chápat δ-funkci jako distribuci.

Pravděpodobnost přechodu pro harmonické perturbace

Nyní vystavíme systém působení perturbace $\hat{V}(t)$ závisející harmonicky na čase:

$$\hat{V}(t) = \hat{v}\mathrm{e}^{i\omega t} + \hat{v}^*\mathrm{e}^{-i\omega t}, \tag{2.58}$$

kde operátor $\hat{v}$ nezávisí na čase. Může tedy jít např. o situaci, kdy nabité částice interagují s elektromagnetickým polem a v důsledku této interakce dochází k přechodům mezi stacionárními stavy.

Vyjdeme-li z obecné rovnice (2.53) pro pravděpodobnost přechodu mezi stavy $|\psi_i\rangle$ a $|\psi_f\rangle$, dostaneme pro harmonické perturbace vztah

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\psi_f|\hat{v}|\psi_i\rangle \int_0^t \mathrm{e}^{i(\omega_{fi}+\omega)t'}dt' + \langle\psi_f|\hat{v}^*|\psi_i\rangle \int_0^t \mathrm{e}^{i(\omega_{fi}-\omega)t'}dt'\right|^2. \tag{2.59}$$

Po umocnění (2.59) lze smíšené členy zanedbat, neboť jsou malé ve srovnání se zbývajícími dvěma a nezpůsobují trvalé přechody. Po tomto zanedbání nám zůstává

$$P_{if}(t) \approx \frac{1}{\hbar^2}|\langle\psi_f|\hat{v}|\psi_i\rangle|^2\left|\frac{\mathrm{e}^{i(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{\omega_{fi}+\omega}\right|^2 + \frac{1}{\hbar^2}|\langle\psi_f|\hat{v}^*|\psi_i\rangle|^2\left|\frac{\mathrm{e}^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\omega_{fi}-\omega}\right|^2, \tag{2.60}$$

což lze pomocí rovnosti $|\mathrm{e}^{i\theta}-1|^2 = 4\sin^2(\theta/2)$ (které jsme obdobně využili již při výpočtu pro konstantní perturbace) dále zjednodušit na

$$P_{if}(t) \approx \frac{4}{\hbar^2}\left(|\langle\psi_f|\hat{v}|\psi_i\rangle|^2\frac{\sin^2[(\omega_{fi}+\omega)t/2]}{(\omega_{fi}+\omega)^2} + |\langle\psi_f|\hat{v}^*|\psi_i\rangle|^2\frac{\sin^2[(\omega_{fi}-\omega)t/2]}{(\omega_{fi}-\omega)^2}\right). \tag{2.61}$$

Maxima funkce P_{if} nastávají v bodě $\omega_{fi} = -\omega$, resp. $\omega_{fi} = \omega$, v nichž nabývá pravděpodobnost hodnoty $P_{if}(t) = (t^2/4\hbar^2)|\langle\psi_f|\hat{v}|\psi_i\rangle|^2$, resp. $P_{if}(t) = (t^2/4\hbar^2)|\langle\psi_f|\hat{v}^*|\psi_i\rangle|^2$. Lze tedy zformulovat podmínku pro nejpravděpodobnější přechod: pravděpodobnost přechodu je maximální, je-li frekvnce pole (zdroje perturbace) blízká $\pm\omega_{fi}$. Pro jiná ω pravděpodobnost velmi rychle klesá k nule. Obdobně jako pro konstantní perturbace, lze i zde pro $t \to \infty$ vyjádřit přechodový poměr Γ_{if} jako

$$\Gamma_{if} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle\psi_f|\hat{v}|\psi_i\rangle|^2\delta(E_f - E_i + \hbar\omega) + \frac{2\pi}{\hbar}|\langle\psi_f|\hat{v}^*|\psi_i\rangle|^2\delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \tag{2.62}$$

Platí-li jedna z podmínek

$$E_f = E_i - \hbar\omega, \qquad E_f = E_i + \hbar\omega,$$

je přechodový poměr $\Gamma_{ij} \neq 0$. Podmínka $E_f = E_i - \hbar\omega$ nám říká, že systém se původně nacházel v excitovaném stavu, neboť jeho konečná energie je menší než počáteční. Při deexcitaci emitoval systém foton s energií $\hbar\omega$ (který přijal potenciál $\hat{V}(t)$). O takovém procesu se mluví jako o *stimulované emisi*. Naopak z podmínky $E_f = E_i + \hbar\omega$ plyne, že konečná energie systému je větší než energie počáteční, což je způsobeno tím, že systém absorboval foton o energii $\hbar\omega$ (pocházející od potenciálu $\hat{V}$), čímž se dostal do vyššího excitovaného stavu. V úvodu této kapitoly jsme operátor perturbace $\hat{V}(t)$ vyjádřili ve tvaru $\hat{V}(t) = \hat{v}\mathrm{e}^{i\omega t} + \hat{v}^*\mathrm{e}^{-i\omega t}$. Nyní vidíme, že člen $\mathrm{e}^{i\omega t}$, resp. $\mathrm{e}^{-i\omega t}$ odpovídá emisi, resp. absorpci fotonu o energii $\hbar\omega$. Na rozdíl od konstantní perturbace se tedy energie systému nezachovává, ale předává se, či odebírá $\hat{V}(t)$.

Závěr

Cílem mé bakalářské práce bylo nastínit fyzikálně nejvýznamnější aspekty problematiky kompaktních, symetrických a samoadjungovaných operátorů působících na Hilbertově prostoru. Zaměřila jsem se zejména na nejpodstatnější výsledky spektrální teorie, a to na Hilbertovu-Schmidtovu spektrální větu pro kompaktní samoadjungované operátory, resp. její zobecnění v případě spojitých samoadjungovaných operátorů. Uvedla jsem základní větu operátorového počtu a ukázala její přímou aplikaci při řešení Schrödingerovy rovnice.

V druhé části práce jsem se věnovala aplikacím nejdůležitějších výsledků teorie při aproximativním řešení Schrödingerovy rovnice metodou časově závislé a nezávislé perturbační teorie. Vzhledem k omezenému rozsahu práce jsem ovšem vybudovala pouze základy perturbační teorie a čtenáře, který by se této problematice chtěl hlouběji věnovat, lze odkázat např. na [10].

Seznam použité literatury

[1] *Scattering and Decays from Fermi's Golden Rule including all the h's and c's* [online]. University of Texas. [cit. 11.5.2014]. Dostupné z: http://www.uam.es/personal_pdi/ciencias/jortega/FES/FermiGoldenRule.pdf.

[2] DAVYDOV, A. S. *Kvantová mechanika*. 1. vyd. Praha: Státní pedagogické nakladatelství, 1978. ISBN 80-7235-960-6.

[3] LUKEŠ, J. *Zápisky z funkcionální analýzy*. 1. vyd. Praha: Karolinum, 2005. ISBN 80-246-0969-X.

[4] MOORE, M.G. *Time-Independent Perturbation Theory* [online]. Michigan State University. [cit. 11.5.2014]. Dostupné z: http://www.pa.msu.edu/~mmoore/TIPT.pdf.

[5] PANKOV, A. A. *Lecture Notes on Schrödinger equations*. 1. vyd. New York [N.Y.]: Nova Science, 2007.

[6] REED, SIMON. *Methods of modern mathematical physics I:Functional Analysis*. San Diego, California: Academic press, inc., 1980. ISBN 0125850506.

[7] RUDIN, W. *Functional Analysis*. New York: McGraw-Hill, Inc., 1991. ISBN 0-07-100944-2.

[8] TAYLOR, A. E. *Úvod do funkcionální analýzy*. 1. vyd. Praha: Academia, nakladatelství Československé akademie věd, 1973.

[9] TESCHL, G. *Mathematical methods in quantum mechanics: with applications to Schrödinger operators*. 1. vyd. Providence: R.I.: American Mathematical Society, 2009. ISBN 978-0-8218-4660-5.

[10] ZETTILI, N. *Quantum mechanics: concepts and applications*. 1. vyd. Chichester: John Wiley&Sons, 2001. ISBN 0-471-48944-1.