České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra matematiky
Obor: Matematické inženýrství
Zaměření: Matematické modelování

Kvantový rozptyl pro časově závislé systémy
Quantum scattering for time-dependent systems

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Vypracoval: Filip Štaffa
Vedoucí práce: Prof. Ing. Pavel Šťovíček DrSc
Rok: 2010

Před svázáním místo téhle stránky $\boxed{\text{vložíte zadání práce}}$ s podpisem děkana (bude to jediný oboustranný list ve Vaší práci) !!!!

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci vypracoval samostatně a použil jsem pouze podklady (literaturu, projekty, SW atd.) uvedené v přiloženém seznamu.

V Praze dne ....

....

Filip Štaffa

Poděkování

Děkuji Prof. Ing. Pavlu Šťovíčkovi DrSc. za vedení mé bakalářské práce a za podnětné návrhy, které ji obohatily.

Filip Štaffa

Název práce:
Kvantový rozptyl pro časově závislé systémy

Autor: Filip Štaffa

Obor: Matematické inženýrství
Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: Prof. Ing. Pavel Šťovíček DrSc
Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze

Abstrakt: Tato práce se zabývá možnostmi řešení rozptylu časově závislého δ potenciálu v dimenzi jedna. Je zde ukázáná teorie rozptylu a v dimenzi jedna i řešení pomocí metody stacionární fáze. Je zde formálně zaveden δ potenciál a uvedena věta umožnující jeho aproximaci pomocí funkcí třídy $L^1(\mathbb{R})$. V poslední části je uvedena věta umožnující aproximovat ve vysokofrekvenční limitě operátor rozptylu pro hladké periodické potenciály pomocí jejich střední hodnoty. Tuto větu sice nelze aplikovat na δ potenciál, ale lze ji aplikovat na jeho aproximace.

Klíčová slova: kvantový rozptyl, časově závislý systém, stacionární teorie rozptylu, bodová interakce

Title:
Quantum scattering for time-dependent systems

Author: Filip Štaffa

Abstract: This thesis shows possibilities of solving time dependent δ potential in one dimension. It presents scattering theory and shows solution using stationary phase method. It formaly introduces δ potential in one dimension and shows theorem allowing approximation of δ potential using functions from $L^1(\mathbb{R})$. In the last part is presented theorem allowing high frequency approximation of scattering operator of diferentiable and periodic potentials using their average. This theorem cannot be applied to δ potential itself, but can be applied to its aproximations.

Key words: quantum scattering, time dependent system, stationary scattering theory, point interaction

Obsah

1 Úvod

Tato práce se zabývá možnostmi řešení rozptylu časově závislého δ potenciálu na prostorech dimenze 1.
δ potenciál je zajímavý proto, že umožňuje vyjádřit bodovou interakci v systému a přitom je analyticky řešitelný. Je proto velmi užitečný nejen z výukových důvodů a le i v reálných výpočtech, například pro atom vodíku. Problematice bodové interakce se věnuje monografie [5].
Časová závislost tento dobře relativně dobře zdokumentovaný případ komplikuje a zatím neexistuje jednoduchý a obecný způsob pro práci s takovýmito systémy. Tato práce vychází z práce [4], která ukazuje možnosti řešení systémů s periodickým vývojem v adiabatické limitě (tzn. pro velmi vysoké nebo malé frekvence).
Cílem této práce je zmapovat možné přístupy k této problematice.
V druhé kapitole jsou zavedeny základní pojmy z teorie samosdružených operátorů a obecně hledáním samosdružených rozšíření symetrických operátorů. Tento proces je ilustrován na příkladu operátoru hybnosti.
Třetí kapitola se věnuje základům funkčního kalkulu pro samosdružené operátory. Je zde uvedena věta o spektrálním rozkladu a Stoneova věta, které umožňují vyjádření časového vývoje kvantového systému.
Čtvrtá kapitola se věnuje teorii rozptylu pro časově nezávislé systémy. Je zde zaveden pojem zobecněných vlastních funkcí a uvedeno několik vět týkajících se jejich existence (zvláště pro lineární diferenciální operátory). Jsou zde zavedeny základní pojmy teorie rozptylu a ukázána metoda stacionární fáze umožňující v dimenzi 1 jednodušší řešení rozptylu. Tato metoda je demonstrována na příkladu potenciálové studny. Je zde také zaveden δ potenciál jakožto samosdružené rozšíření operátoru.
V páté kapitole jsou zavedeny pojmy pro časově závislé systémy. Pro periodické systémy je zde poté uvedena věta umožnující rozptyl v těchto systémech aproximovat ve vysokofrekvenční limitě pomocí časově nezávislého operátoru.

2 Zavedení pojmů

V této práci se budeme pohybovat pouze na komplexních Hilbertových prostorech, které budeme značit $\mathcal{H}$. Na nich definovaný skalární součin budeme značit $(\cdot,\cdot)$. Podle fyzikální konvence budeme předpokládat, že je v první proměnné antilineární a v druhé lineární. Často se nebude jednat o obecný Hilbertův prostor, ale o prostor $L^2(M, d\mu)$ všech komplexních funkcí f definovaných μ s.v. (μ skoro všude) na množině M, pro které $\int_M |f|^2 d\mu < +\infty$. $d\mu$ zde neznačí obecnou míru, ale nezápornou míru na množině M. Prostor $L^2(\mathbb{R}, dx)$ budeme zkráceně označovat jako L^2. Direktní součet Hilbertových prostorů $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ značíme $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 = \{[x,y] | x \in \mathcal{H}_1, y \in \mathcal{H}_2\}$. Opět se jedná o Hilbertův prostor se skalárním součinem definovaným: $h_1, h_2 \in \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2, h_1 = [x_1, y_1], h_2 = [x_2, y_2], x_i \in \mathcal{H}_1, y_i \in \mathcal{H}_2, i \in \{1,2\}$. Nulový vektor budeme značit 0.
Lineární operátor A (obecně neomezený) na $\mathcal{H}$ je strukturou složenou z definičního oboru $\operatorname{Dom} A$ a lineárního zobrazení $\tilde{A} : \operatorname{Dom} A \mapsto \mathcal{H}$. Akce operátoru A na vektor $h \in \operatorname{Dom} A$ je definována jako $Ah := \tilde{A}h$. Množinu všech hustě definovaných operátorů na $\mathcal{H}$, tj. $\overline{\operatorname{Dom} A} = \mathcal{H}$, budeme značit $\mathcal{L}$. Protože v dalším textu budeme pracovat pouze s lineárními operátory, budeme jim pro zjednodušení říkat místo lineární operátor pouze operátor.
Prostory reálných, respektive komplexních čísel označíme $\mathbb{R}$, respektive $\mathbb{C}$.

Definice 1 (Rozšíření operátoru)**.** *Operátor A je rozšíření operátoru B, $A \supset B$, pokud*

1. $\operatorname{Dom} A \supset \operatorname{Dom} B$
2. $Ax = Bx \ \forall x \in \operatorname{Dom} B$.

Definice 2 (Graf operátoru)**.** *Graf operátoru A značíme* $\Gamma A \subset \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}, \Gamma A = \{[x, Ax] | x \in \operatorname{Dom} A\}$

Graf operátoru je zároveň podprostor $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$

Definice 3 (Uzavřený operátor)**.** *Operátor A se nazývá uzavřený, pokud je ΓA uzavřený podprostor.*

Definice 4 (Uzaviratelný operátor)**.** *Operátor A se nazývá uzaviratelný, pokud $\overline{\Gamma A}$ je grafem operátoru.*

Tuto definici lze ekvivalentně přeformulovat pomocí rozšíření operátoru:

Věta 1. *Operátor A je uzaviratelný právě tehdy, pokud má uzavřené rozšíření.*

K lepšímu zjištění uzaviratelnosti daného operátoru poslouží následující věta:

Věta 2. *1. Operátor T lze uzavřít právě tehdy, když pro každou posloupnost $\{x_n\} \in \operatorname{Dom} T$ takovou, že $x_n \to 0$ a $Tx_n \to y$ platí $y = 0$.*

2. *K tomu aby x patřilo do definičního oboru operátoru $\overline{T}$ je nutné a stačí, aby existovala posloupnost $\{x_n\} \subset \operatorname{Dom} T$ taková, že $x_n \to x$ a $\{Tx_n\}$ konverguje. Jsou-li tyto podmínky splněny, platí $Tx_n \to \overline{T}x$*

Snadno z definic plyne, že každý omezený operátor je uzavřený.
Pro hustě definovaný operátor A má smysl definovat sdružený operátor A^*.

Definice 5. *Sdružený operátor k operátoru $A \in \mathcal{L}$ je takový A^* s $\operatorname{Dom} A^*$ obsahující všechny vektory $y \in \mathcal{H}$, pro které platí $(Ax, y) = (x, h) \forall x \in \operatorname{Dom} A$ a jistý vektor $h \in \mathcal{H}$. Potom $A^* y = h$*

Z toho je jasné, že pojem sdruženého operátoru má smysl pouze pro hustě definované operátory. Pro ostatní operátory by existovalo více vektorů h splňujících $(Ax, y) = (x, h)$ obraz vektoru y by nebyl jednoznačně definován.
Některé zajímavé vlastnosti sdružených operátorů:

1. Pro $A, B \in \mathcal{L}, A \supset B$ platí $A^* \subset B^*$.
2. Každý sdružený operátor je uzavřený
3. Jsou lineární
4. Pokud je $A^* \in \mathcal{L}$, potom $A^{**} \supset A$

Definice 6 (Symetrický operátor)**.** *Operátor $A \in \mathcal{L}$ se nazývá symetrický, pokud $A \subset A^*$*

Definice 7 (Samosdružený operátor)**.** *Hustě definovaný operátor $A \in \mathcal{L}$ se nazývá samosdružený, pokud $A = A^*$*

Důležitou vlastností samosdružených operátorů je to, že jsou uzavřené. Toto plyne přímo z definice, protože $A = A^*$ a A^* je uzavřený.
Samosdružené operátory jsou z pohledu kvantové mechaniky mnohem zajímavější než operátory symetrické. Ze Stoneovy věty (věta (7)) plyne, že pomocí samosdružených operátorů je možné vyjádřit časový vývoj systému. Proto je důležitou otázkou, kdy je možné rozšířit symetrický operátor $A \subset A^*$ na operátor $\tilde{A}$ tak, že $A \subset \tilde{A} \subset \tilde{A}^* \subset A^*$.
Je jasné, že operátor A musí být uzaviratelný. Pokud by nebyl, musela by podle věty (2) existovat posloupnost $\{x_n \in \operatorname{Dom} A\}, x_n \to 0$ splňující $Ax_n \to y \neq 0$. Protože $A \subset \tilde{A}$, musela by existovat stejná posloupnost i pro operátor $\tilde{A}$. Proto by ani operátor $\tilde{A}$ nebyl uzaviratelný, a tedy ani uzavřený. $\tilde{A}$ je ale samosdružený a tedy i uzavřený, což je spor.
Důležitým faktem je, že operátor $\tilde{A}$ pokud existuje, tak nemusí být jednoznačně určen. Proto má smysl zavést následující pojem

Definice 8 (V podstatě samosdružený operátor)**.** *Operátor $A \in \mathcal{L}$ nazýváme operátorem v podstatě samosdruženým, pokud operátor $\overline{A}$ je samozdružený.*

Ke zjištění, zda má daný operátor A samosdružené rozšíření slouží pojem index defektu.

Definice 9 (Indexy defektu)**.** *Pro symetrický operátor A nazýváme číslo $n_\pm = \dim \operatorname{Ker}(A^* \pm i)$ kladnýn, respektive záporným indexem defektu.*

Tato definice má smysl díky následující větě:

Věta 3. *Jestliže je G souvislá komponenta oblasti regularity operátoru $A \in \mathcal{L}$, potom je $\dim \operatorname{Ker}(A^* - \lambda)$ konstantní na G.*

kde

Definice 10 (Oblast regularity)**.** *Nechť A je uzavřený operátor na na $\mathcal{H}$. Oblastí regularity nazýváme množinu všech $\lambda \in \mathbb{C}$*

$$||(A - \lambda)x|| > c(\lambda)||x||$$

pro všechna $x \in \operatorname{Dom} A$

Protože pro symetrický operátor jsou množiny $\mathbb{C}^+ = \{\lambda \in \mathbb{C}, Im(\lambda) > 0\}$ a $\mathbb{C}^- = \{\lambda \in \mathbb{C}, Im(\lambda) < 0\}$ souvislými komponentami je funkce $\lambda \mapsto \dim \operatorname{Ker}(A \pm \lambda)$ na $\mathbb{C}^+$ i na $\mathbb{C}^-$ konstantní. Více informací lze nalézt např. v [2].
V závislosti na indexech defektu operátoru A mohou nastat 3 případy:

1. Oba indexy defektu jsou nulové. V tomto případě je operátor A v podstatě samosdružený, pokud je navíc uzavřený je dokonce samosdružený.

2. Indexy defektu jsou různé. V tomto případě existuje a lze nalézt maximální symetrické rozšíření operátoru A, které není samosdružené. Pro takovýto operátor neexistuje samosdružené rozšíření.

3. Oba indexy defektu jsou stejné a nenulové. V tomto případě existuje a je možné nalézt samosdružené rozšíření $\tilde{A}$. Konkrétní postup je v následující větě.

Věta 4 (druhá von Neumannova formule)**.** *Nechť $\tilde{A}$ je symetrickým rozšířením A. Potom ke každému $\tilde{y} \in \operatorname{Dom}_{\tilde{A}}$ existuje právě jedno $y \in \operatorname{Dom} A$ a $x_0 \in S_+$ tak, že*

$$\tilde{y} = y + (I - \tilde{V})x_0 \tag{1}$$
$$\tilde{A}\tilde{y} = Ay + i(I + \tilde{V})x_0 \tag{2}$$

kde $\tilde{A}$ je určen trojicí objektů S_+, S_- a $\tilde{V}$. $\tilde{V}$ je izometrický operátor zobrazující $\mathcal{S}_+$ na $\mathcal{S}_-$ a $\mathcal{S}_\pm$ jsou podprostory $\operatorname{Ker}(A^* \mp i)$

Důkaz a více informací o hledání samosdružených rozšíření lze nalézt v [2].

Příklad 1. *Nechť $J \subset \mathbb{R}$ je otevřený interval. Operátor*

$$P = -i\frac{d}{dx} \tag{3}$$

definovaný na $L^2(J)$ pro funkce ψ, které splňují:

1. $\psi \in L^2(J) \cap AC(J)$

2. $\psi' \in L^2(J)$.

kde $AC(J)$ značí všechny absolutně spojité funkce na intervalu J.
Dále označíme $AC_0 \subset AC$ množinu všech absolutně spojitých funkcí s kompaktním nosičem a $\dot{P} = P \restriction AC_0$, pak-platí $\dot{P}^* = P$ (důkaz viz [2]).
V závislosti na tvaru J mohou nastat následující 3 případy:

$J = \mathbb{R}$ *V tomto případě je operátor P dokonce samosdružený. Platí totiž*

$$(\psi, P\phi) = \int_{-\infty}^{+\infty} -i\psi(x)\phi'(x)dx = [\textit{per partes}] = \tag{4}$$

$$= \underbrace{-i[\psi\phi]_{-\infty}^{\infty}}_{= 0 \ \textit{pro} \ \psi \in L^2(\mathbb{R})} + i\int_{-\infty}^{+\infty} \psi'(x)\phi(x)dx = i(\psi', \phi) = (P\psi, \phi) \tag{5}$$

pro každé $\phi, \psi \in \operatorname{Dom} P$. Protože $\dot{P} \subset P$ platí $P^* \subset \dot{P}^* = P$, takže $P = P^*$.
Ke stejnému výsledku lze dojít i pomocí indexů defektu. Hledejme $\dim \operatorname{Ker}(P \pm i)$, tzn. řešíme

$$P\phi \pm i\phi = 0 \quad \textit{což lze přepsat jako} \tag{6}$$

$$-\phi' \pm \phi = 0 \tag{7}$$

Tato rovnice má řešení $\phi = ce^{\pm x}$ kde $c \in \mathbb{C}$. Protože funkce $e^{\pm x} \notin L^2$, je $\operatorname{Ker}(P \pm i) = 0$ a $\dim \operatorname{Ker}(P \pm i) = 0$. Z tohoto plyne, že operátor $\dot{P}$ je v podstatě samosdružený.

$J = (a, +\infty)$ *V tomto případě je podstatné to, že jeden konec intervalu je singulární ($+\infty$) a druhý regulární. Podobná situace by nastala i pro $J = (-\infty, a)$*
Nyní ale operátor P není samosdružený a ani symetrický. Pokud bychom postupovali podobně jako v minulém případě, vujde nám v(5) $i[\psi\phi]_0^{+\infty}$. Tato závorka pro funkce $\psi \in \operatorname{Dom} P$ není obecně rovna nule, a proto operátor P není symetrický.
Pokud se pokusíme vyšetřit rozšíření operátoru $\dot{P}$ pomocí indexů defektu, vyjdou nám stejná řešení rovnice (7).
Na intervalu $(0, +\infty)$ ale řešení $\phi = ce^{-x}$ patří do $\operatorname{Dom} P$. Indexy defektu jsou proto (0, 1). Proto operátor $\dot{P}$ nemá žádné samosdružené rozšíření.

$J = (a, b)$ *V tomto případě dojdeme stejným postupem jako v minulém případě k závěru, že operátor P není symetrický.*
Při vyšetřování indexů defektu ale dojdeme k závěru, že obě řešení (7) ce^{-x} a ce^{x} patří do $\operatorname{Dom} P$. Indexy defektu jsou proto rovny (1, 1) a operátor $\dot{P}$ má samosdružené rozšíření.
Podle věty (4) lze jeho rozšíření nalézt pomocí izometrického operátoru V zobrazujícího $\operatorname{Ker}(P - i) = \operatorname{span}\{e^{a-x}\}$ na $\operatorname{Ker}(P + i) = \operatorname{span}\{e^{x-b}\}$.
Protože se jedná o prostory dimenze 1, bude operátor V definován jako $Ve^{a-x} =$

μe^{x-b} *kde* $\mu \in \mathbb{C}, |\mu| = 1$ *je parametrem definujícím toto symetrické rozšíření. Operátor* P *lze podle věty (4) rozšířit na operátor* $\tilde{P}(\mu)$, *jehož akci na vektor* $\psi = \phi + \alpha(e^{a-x} - \mu e^{x-b})$, $\phi \in \operatorname{Dom} \dot{P}$ *lze vyjádřit takto:*

$$\tilde{P}(\mu)\psi = \dot{P}\phi + i\alpha(e^{a-x} + \mu e^{x-b}) = -i\phi' + i\alpha\frac{d}{dx}(-e^{a-x} + \mu e^{x-b}) = -i\psi'$$

$\operatorname{Dom} \tilde{P}(\mu)$ *lze popsat i podle okrajových podmínek, tzn.*

$$\begin{aligned} \psi(b) = &\quad \phi(b) + e^{a-b} - \mu e^{b-b} = e^{a-b} - \mu \\ \psi(a) = &\quad \phi(a) + e^{a-a} - \mu e^{a-b} = 1 - \mu e^{a-b} \end{aligned}$$

protože platí $\phi(a) = \phi(b) = 0$.
Okrajové podmínky lze tedy zapsat $\psi(b) = \gamma(\mu)\psi(a)$, *kde* $\gamma(\mu) = \frac{e^{a-b}-\mu}{1-\mu e^{a-b}}$

2.1 Funkční kalkulus

Definice 11 (Projekční míra)**.** *Zobrazení* $E(.) : \mathcal{B}^n \to \mathcal{L}$ *splňující:*

1. *pro* $M \subset \mathbb{R}^n$ *je* $E(M)$ *projektor*
2. $E(\mathbb{R}^d) = I$
3. *pro nejvýše spočetný disjunktní systém množin* $M_n \subset \mathbb{R}^n$ *platí*

$$E(\bigcup_n M_n) = \sum_n E_n$$

a pro nekonečný systém platí rovnost v silné operátorové limitě

kde $\mathcal{B}^n$ *je systém všech borelovských množin na* $\mathbb{R}^n$

Definice 12 (Rozklad jedničky)**.** *Neklesající zobrazení* $E_t : \mathcal{B} \to \mathcal{L}$ *množiny projektorů splňující:*

1. *spojitost zprava*

$$\text{s-lim}_{t \to u} E_t = E_u$$

2.

$$\text{s-lim}_{t \to -\infty} = 0 \text{ a } \text{s-lim}_{t \to +\infty} = I$$

kde s-lim *vyjadřuje silnou limitu v operátorové topologii, se nazývá rozklad jedničky.*

Podobně jako v teorii míry je možné na základě těchto definic zavést pojem integrálu značeného

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t) dE_t$$

kde E_t je rozklad jedničky a $f(t)$ je E^As.v. definovaná funkce.
Samosdružené operátory jsou významné díky tomu, že generují rozklad jedničky a platí pro ně následující věta:

Věta 5 (Spektrální rozklad pro samosdružené operátory)**.** *Ke každému samosdruženému operátoru A na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ existuje právě jedna projektorová míra $E^A(.)$ na $\mathbb{R}$ splňující rovnost*

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} t dE_t^A$$

Na základě této věty má smysl definovat funkci samosdruženého operátoru

$$f(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) dE_t^A \tag{8}$$

Příklad 2. *Často se objevuje exponenciela samosdruženého operátoru*

$$e^A = \exp(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} e(t) dE_t^A$$

Díky větě o spektrálním rozkladu lze definovat spektrum samosdruženého operátoru.

Věta 6. *Nechť A je samosdružený operátor na separabilním Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$. Pak $\mathcal{H}$ lze jednoznačně rozložit do ortogonálního součtu podprostorů*

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ac} + \mathcal{H}_{sc} + \mathcal{H}_p$$

kde $\mathcal{H}_{ac}$, $\mathcal{H}_{sc}$, a $\mathcal{H}_p$ jsou invariantní vůči A a všem funkcím operátoru A. Tyto prostory mají následující vlastnosti:

- *pokud $f \in \mathcal{H}_{ac}$, pak míra $d(E_\lambda f, f)$ na $\mathbb{R}$ je absolutně spojitá na $\mathbb{R}$ vzhledem k Lebesqueově míře*
- *pokud $f \in \mathcal{H}_{sc}$, pak míra $d(E_\lambda f, f)$ na $\mathbb{R}$ je čistě singulární míra vzhledem k Lebesqueově míře*
- *pokud $f \in \mathcal{H}_p$, pak míra $d(E_\lambda f, f)$ na $\mathbb{R}$ je čistě bodová míra*

Definice 13 (Spektrum operátoru)**.** *Spektrum operátoru A na prostoru*

- *$\mathcal{H}_{ac}$ se nazývá absolutně spojité*
- *$\mathcal{H}_{sc}$ se nazývá singulární*
- *$\mathcal{H}_{ac}$ se nazývá bodové*

Přesnější odvození je možné nalézt v [1], [2] nebo [3].

2.2 Stoneova věta

Definice 14 (Spojitá jednoparametrická grupa unitárních operátorů)**.** *Množina* $\{U(s) : s \in \mathbb{R}\}$ *zobrazení na Hilbertově prostoru* $\mathcal{H}a$*, pro kterou funkce* $t \to U(t)$ *je silně spojitá v operátorové topologii a splňuje pro všechna* $s, t \in \mathbb{R}$

$$U(s+t) = U(s)U(t)$$

se nazývá silně spojitou grupou unitárních operátorů.

Mezi důležité vlastnosti této grupy patří

1. U(0) = I
2. grupa je komutativní, tj. $U(s)U(t) = U(t)U(s)$
3. $U(-s) = U(s)^{-1}$

Následující věta dává konkrétní postup pro vytvoření unitární grupy

Věta 7. *Nechť* A *je samosdružený operátor na Hilbertově prostoru* $\mathcal{H}$ *a* $U_t = \exp(itA)$*. Potom* U_t *je silně spojitá unitární grupa operátorů a derivace*

$$\frac{d}{dt}\left(U_t f\right)|_{t=0} = \lim_{t \to 0} \left(\frac{U_t f - f}{t} \right)$$

existuje právě tehdy, když $f \in \operatorname{Dom} A$*. V tom případě se rovná* iAf

Věta 8 (Stoneova věta)**.** *Ke každé silně spojité unitární grupě* $\{U(s) | s \in \mathbb{R}\}$ *existuje právě jeden samosdružený operátor* A *takový, že*

$$U(s) = \exp(isA)$$

pro všechna $S \in \mathbb{R}$

Z tohoto plyne že existuje bijekce mezi samosdruženými operátory silně spojitými unitárními grupami na daném Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$.

3 Rozptyl pro potenciály konstantní v čase

3.1 Zobecněné vlastní funkce

Definice 15 (Zobecněná vlastní funkce)**.** *Funkci* ψ *nazveme vlastní funkcí samosdruženého operátoru* A *příslušející vlastní hodnotě* λ*, pokud pro každou funkci* $\phi \in \operatorname{Dom} A$ *platí* $(\phi, A\psi) = \lambda(\phi, \psi)$

Výhodou této definice je to, že funkce ψ nemusí být v Dom A.

Definice 16 (Hilbert-Schmidtovy operátory). *Omezený lineární operátor K definovaný na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ se nazývá Hilbert-Schmidtův, pokud pro ortonormální bázi $\{e_i\}$ prostoru $\mathcal{H}$ platí, že suma $\sum_{i=1}^{\infty} ||Ke_i|| < \infty$. Pro takovéto operátory definujeme Hilbert-Schmidtovu normu operátoru K jako*

$$||K||_2^2 = \sum_{i=1}^{\infty} ||Ke_i||^2$$

Lze dokázat, že Hilbert-Schmidtova norma nezávisí na volbě báze, a je proto dobře definována.
Následující věta vyjadřuje důležitou vlastnost Hilbert-Schmidtových operátorů.

Věta 9. *Operátor K na prostoru $L^2(M, d\mu)$ je Hilbert-Schmidtův právě tehdy, když existuje funkce $\mathcal{K}(m_2, m_1) \in L^2(M \times M, d\mu \times d\mu)$ taková, že platí*

$$Ka(m_2, m_1) = \int_M \mathcal{K}(m_2, m_1)a(m_1)d\mu$$

kde funkce $\mathcal{K}(m_2, m_1)$ je skoro všude jednoznačně definovaná.

Nechť $\mathcal{H}$ je Hilbertův prostor. Nechť $\mathcal{H}_+$ je Banachův prostor s normou $||.||_+$ a $j : \mathcal{H}_+ \mapsto \mathcal{H}$ je spojité vnoření $\mathcal{H}_+$ do $\mathcal{H}$.
Definujme $\mathcal{H}_-$ jako prostor všech spojitých antilineárních funkcionálů na prostoru $\mathcal{H}_+$.
Hodnotu funkcionálu $h_- \in \mathcal{H}_-$ na vektor $h_+ \in \mathcal{H}_+$ budeme značit (h_+, h_-).
Na prostoru $\mathcal{H}_-$ zavedeme sčítání a násobení jako

$$(h_+, \lambda h'_- + h''_-) = \lambda(h_+, h'_-) + (h_+, h''_-)$$

pro $h'_-, h''_- \in \mathcal{H}_-$ a $h_+ \in \mathcal{H}_+$.
Dále zavedeme lineární zobrazení $j^* : \mathcal{H} \mapsto \mathcal{H}_-$ jako

$$(h_+, j^*h_2) = (jh_+, h) = (h_+, h)$$

pro každé $h_- \in \mathcal{H}_-$ a $h_+ \in \mathcal{H}_+$.
Pokud $\mathcal{H}_+$ je hustý v $\mathcal{H}$, je $\operatorname{Ker} j^* = 0$ a j^* je vnoření. Dále budeme předpokládat, že $\mathcal{H}_+$ je hustý v $\mathcal{H}$. Na $\mathcal{H}_-$ definujeme normu $||.||^-$ jako

$$||h_-||_- = \sup_{||h_+||_+=1} |(h_+, h_-)|$$

V této normě je j^* spojitý lineární operátor.
Tímto způsobem vznikly tři prostory

$$\mathcal{H}_+ \subset \mathcal{H} \subset \mathcal{H}_- \tag{9}$$

kde $\mathcal{H}_+$ je Banachův prostor hustý v $\subset \mathcal{H}$. Pro každý vektor $h_- \in \mathcal{H} \subset \mathcal{H}_-$ vyjádření (h_-, h_+) tedy nevyjadřuje jen hodnotu funcionálu h_- na vektor h_+, ale i skalární součin na prostoru $\mathcal{H}$.

Definice 17 (Gelfandův triplet). *Takto definované trojici prostorů říkáme Gelfandův triplet* $\mathcal{H}$.

Zajímavou vlastností Gelfandova tripletu je, že pokud je na prostoru $\mathcal{H}_+$ definován skalární součin, je možné ho dodefinovat i na $\mathcal{H}_-$
Důležitými typy Gelfandova tripletu jsou ty, vytvořené pomocí spojitého lineárního operátoru K na prostoru $\mathcal{H}$, který je prostý a má hustý obraz v $\mathcal{H}$ (takže platí $\operatorname{Ker} K = \operatorname{Ker} K^* = 0$). Pak definujeme $\mathcal{H}_+ = K\mathcal{H}$ se skalárním součinem $(Kh, Kh)_+ = (h, h)$. Konstrukci prostoru $\mathcal{H}_-$ popisuje následující věta.

Věta 10. *Nechť Gelfandův triplet* (9) *je vytvořen pomocí operátoru* K. *Pak* $\mathcal{H}_-$ *lze vytvořit z* $\mathcal{H}$ *zúplněním vzhledem k normě*

$$(h_1, h_2)_- = (K^* h_1, K^* h_2)$$

kde $h_1, h_2 \in \mathcal{H}$ *a* K^* *je sdružený operátor k* K *v* $\mathcal{H}$.

Definice 18 (Hilbert-Schmidtův Gelfandův triplet[1]). *Gelfandův triplet* (9) *nazýváme Hilbert-Schmidtův Gelfandův triplet, pokud byl vytvořen pomocí Hilbert-Schmidtova operátoru* K *na* $\mathcal{H}$.

Definice 19 (Úplný systém zobecněných vlastních funkcí). *Vektorovou funkci* Φ *nazveme úplným systémem zobecněných vlastních funkcí operátoru* A, *pokud splňuje:*

1. *Pro libovolné* $h_+ \in \mathcal{H}_+$ *funkce* $m \mapsto (h_+, \Phi(m))$ *patří do* $L^2(M, d\mu)$ *pro* $m \in M$
2. *Zobrazení* $h_+ \mapsto (h_+, \Phi(.))$ *lze rozšířit na unitární operátor* $U : \mathcal{H} \mapsto L^2(M, d\mu)$
3. *Existuje měřitelná reálná funkce* $a = a(m)$ *skoro všude konečná na* M *taková, že* $A = U^{-1}\hat{a}U$. $\hat{a}$ *je operátor násobení funkcí* a *na prostoru* $L^2(M, d\mu)$

Postačující podmínky pro existenci systému zobecněných funkcí operátoru A nám poskytnou následující věty:

Věta 11. *Pro daný Hilbert-Schmidtův Gelfandův triplet* (9) *prostoru* $\mathcal{H}$ *a samosdružený operátor* A *na* $\mathcal{H}$ *existuje v* (9) *úplný ortonormální systém zobecněných vlastních funkcí operátoru* A.

Pro lineární diferenciální operátory na otevřeném intervalu $(\alpha, \beta) \subset \mathbb{R}$ s koeficienty třídy C^∞, tzn. ve tvaru

$$Lu(x) = a_0(x)\frac{d^m u}{dx^m} + a_1(x)\frac{d^{m-1}u}{dx^{m-1}} + \cdots + a_m(x)u \tag{10}$$

kde $a_i \in C^\infty((\alpha, \beta))$ a $a_0 \neq 0$ pro $x \in (\alpha, \beta)$ platí následující věta

[1] tento termín pochází z anglického "Hilbert-Schmidt rigging". V české literatuře se termín "rigging" nejčastěji překládá jako "Gelfandův triplet" a proto byl tento překlad použit i v této práci. V konečném důsledku to vede k tomuto nepěknému složenému názvu. Alternativní překlady výrazu "rigging" by mohly být "obložení" nebo "vybavení"

Věta 12. *Nechť samosdružený operátor A na $L^2((\alpha,\beta))$ je rozšířením (z C_0^∞) diferenciálního operátoru L ve tvaru* (10). *Pak existuje Hilbert-Schmidtův Gelfandův triplet prostoru $L^2((\alpha,\beta))$ takový. že:*

1. $C_0^\infty \subset \mathcal{H}^+ \subset L^2((\alpha,\beta)) \subset \mathcal{H}^- \subset \mathcal{D}'$
2. *zobecněné vlastní funkce operátoru A z úplného ortonormálního systému z věty* (11) *lze považovat za funkce z prostoru C_0^∞ a za vlastní funkce L v běžném smyslu.*

C_0^∞ zde značí množinu všech funkcí třídy C^∞ s kompaktním nosičem a množina $\mathcal{D}'$ je prostor distribucí (zobecněných funkcí).
Tato věta tedy tvrdí, že pro operátory tvaru (10) lze nalézt ortonormální systém zobecněných funkcí.
Důkazy těchto vět a další tvrzení o hledání zobecněných funkcí lze nalézt v [1]. O prostoru $\mathcal{D}'$ a práci se zobecněnými funkcemi lze nalézt více v [6].

3.2 Teorie rozptylu

Nyní se budeme pohybovat pouze na prostoru $L^2(\mathbb{R}, dx)$, i když většina definic i vět platí analogicky i na $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Definice 20 (Hamiltonián). *Hamiltoniánem nazveme operátor H na Hilbertově prostoru $L^2(R^n)$ ve tvaru*

$$H = H_0 + V \tag{11}$$

kde

$$H_0 = \frac{d^2}{dx_i} \tag{12}$$

je volný hamiltonián a $V = v(x)$ je operátor násobení reálnou funkcí $v(x)$. Dom A *je C_0^∞*

Tato definice bude využívána v této práci pro zjednodušení. Pojem hamiltonián je ale normálně používán pro mnohem širší třídu operátorů. Více viz například [2].
V tomto případě je Hamiltonián časově nezávislý. Hamiltonián vyjadřuje celkovou energii systému. Volný hamiltonián H_0 odpovídá energii volné částice a operátor V odpovídá potenciálu.

Je velmi užitečné zjistit, za jakých podmínek je operátor H v podstatě samosdružený, tzn. má samosdružené rozšíření. K tomu je užitečná následující věta, dávající postačující podmínku pro podstatnou samosdruženost.

Věta 13 (Searsova). *Nechť funkce v splňuje*

$$v(x) \geq -q(x)$$

pro $\forall x \in \mathbb{R}$*, kde* q *je kladná sudá spojitá funkce na* $\mathbb{R}$ *neklesající pro* $x \geq 0$ *a splňující*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{q(2x)}} = +\infty$$

Potom H *je v podstatě samosdružený.*

Tato podmínka je splňena pro následující třídu operátorů.

Definice 21 (Zdola omezený operátor)**.** *Symetrický operátor* A *na Hilbertově prostoru mathcalH nazveme zdola omezený, pokud*

$$(x, Ax) > c > -\infty$$

pro $\forall x \in \operatorname{Dom} A, ||x|| = 1$*, kde* $c \in \mathbb{R}$

Definice 22 (Propagátor)**.** *Množinu unitárních operátorů* $\{U(t,s) : s,t \in \mathbb{B}\}$ *na Hilbertově prostoru* $\mathcal{H}$ *nazveme propagátorem, pokud splňuje*

1. $U(t,s)U(s,r) = U(t,r)$ *pro všechna* $r,s,t \in \mathbb{R}$
2. *zobrazení* $(s,t) \mapsto U(s,t)$ *je silně spojité*

Propagátor slouží k vyjádření časového vývoje systému. Proto se také často nazývá evoluční operátor. Pokud je systém v čase s ve stavu $\psi(s)$, v čase t bude ve stavu $\psi(t) = U(t,s)\psi(s)$.
Pro konzervativní systémy platí $U(s+\tau, t+\tau) = U(s,t)$ pro $\forall r, s, \tau \in \mathbb{R}$. Má proto smysl definovat $U(t) = U(t+\tau, \tau)$. Toto je jednoparametrická grupa unitárních operátorů a propagátor lze podle Stoneovy věty (věta (7)) vyjádřit jako:

$$U(t) = e^{-iHt}$$

Definice 23 (Vlnové operátory)**.** *Vlnové operátory* $\Omega_\pm(H, H_0)$ *s* $\operatorname{Dom}\Omega_\pm = \psi_\pm \in \mathcal{H}$ *pro které existuje vektor* $\psi \in \mathcal{H}$*splňující*

$$\lim_{t\to\pm\infty} ||U(t)\psi_\pm - U_0(t)\psi|| = 0$$

kde $U_0 = e^{-iH_0t}$ *jsou definovány jako*

$$\Omega_\pm = \text{s-lim}_{t\to\pm\infty} U^*(t)U_0(t) = \text{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t} \tag{13}$$

Říkáme, že vlnové operátory existují pokud $\operatorname{Dom}\Omega_- = \operatorname{Dom}\Omega_+ = \mathcal{H}$. Pokud platí $\operatorname{Ran}\Omega_+ = \operatorname{Ran}\Omega_-$, říkáme že vlnové operátory jsou úplné.
Postačující podmínku pro existenci a úplnost vlnových operátorů dává následující věta:

Věta 14. *Vlnové operátory pro operátory* H_0 *ve tvaru* (12) *a* H *ve tvaru* (11) *a operátor* V *splňuje podmínku*

$$|v(x)| \leq C(1+|x|)^{-1-\varepsilon} \tag{14}$$

kde $C \in (R)$ *a* $\varepsilon > 0$.
Potom vlnové operátory existují a jsou úplné.

Pro práci s vlnovými operátory je užitečné následující tvrzení

Věta 15 (Řetězové pravidlo). *Nechť H, H_0 a H_1 jsou samosdružené operátory a předpokládejme, že existují vlnové operátory $\Omega_\pm(H_1, H_0$ a $\Omega_\pm(H), H_1$. Potom existují i vlnové operátory $\Omega_\pm(H, H_0)$ a platí*

$$\Omega_\pm(H, H_0) = \Omega_\pm(H, H_1)\Omega_\pm(H_1, H_0) \tag{15}$$

Definice 24 (Operátor rozptylu). *Operátor*

$$S = \Omega_+^{-1}\Omega_-$$

s $\operatorname{Dom} S = \{\psi_- \in \operatorname{Dom}\Omega_- | \Omega_-\psi_- \subset \operatorname{Ran}\Omega_+\}$ *nazýváme oprátorem rozptylu.*

Z fyzikálního pohledu funguje vlnový operátor tak, že vezmou stav systému $\psi_- \in \operatorname{Dom}\Omega_-$ v čase t_0, uvažuje ji jako volnou, přesune ji do minilosti do času $t \to -\infty$ (pomocí propagátoru odpovídajícího volnému systému e^{-iH_0t} a přesune ji zpět do času t_0 při interakci s polem (tzn. pomocí propagátoru $(e^{-iHt})*$). Vlnový operátor Ω_+ funguje analogicky, ale přesouvá částici do budoucnosti do času $t \to +\infty$.
Operátor rozptylu S provede obě akce najednou, a tedy srovnává časový vývoj částice v poli s časovým vývojem volné částice.

3.3 Stacionární teorie rozptylu

Z pohledu stacionární teorie rozptylu jde o řešení následující úlohy:

$$Hy = k^2 y \tag{16}$$

kde $k \in \mathbb{R}$. Z fyzikálního pohledu k vyjadřuje energie systému.
Podle následující věty má tato rovnice 2 lineárně nezávislá řešení y_1 a y_2. Obecně neplatí $y_1, y_2 \in L^2$, ale jedná se o zobecněné vlastní funkce.
Pokud má funkce v určující operátor V kompaktní nosič, pak je vidět, že řešení y splňuje $\lim_{x\to\pm\infty} y = ae^{ikx} + be^{-ikx}$, $a, b \in \mathbb{C}$.
Pokud totiž $v(x) = 0$, rovnice (16) se zjednoduší na

$$\frac{d^2}{dx^2} y = k^2 y$$

která má řešení ve výše zmíněném tvaru.
Pro funkce v jdoucí v nekonečnu dostatečně rychle k nule mají řešení v nekonečnu podobný tvar. Platí totiž následující věta

Věta 16. *Pokud funkce $v(x)$ splňuje*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |v(x)| dx < +\infty \tag{17}$$

a $k \neq 0$ je pevné. Potom rovnice (16) *má řešení y_1, y_2 splňující*

$$y_1(x, k) = e^{ikx}\,(1 + g(x, k))$$
$$y_2(x, k) = e^{-ikx}\,(1 + g(x, k))$$

kde $g(x, k)$ splňuje $\lim_{x\to+\infty} g(x, k) = 0$.

Následující věta dává o něco přesnější odhad a dokazuje (při splnění trochu silnějších podmínek) i existenci řešení pro $k = 0$

Věta 17. *Pokud funkce $v(x)$ splňuje (17) a $Imk > 0$ pak pro $k \neq 0$ řešení y_1 z věty (16) rovnice (16) splňuje*

$$y_1(x) = e^{ikx} \left(\frac{g(x,k)}{1+|k|} \right)$$

kde $\lim_{x\to+\infty} g(x,k) = 0$ stejnoměrně vzhledem ke k. Pokud funkce navíc $v(x)$ splňuje

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x|v(x)|dx < +\infty \tag{18}$$

pak pro $k = 0$ existuje na intervalu $(0, +\infty)$ jednoznačné řešení rovnice (16) ve tvaru

$$y_1(x) = e^{ikx} \left(1 + \frac{g(x)}{1+|k|} \right)$$

kde $\lim_{x\to+\infty} g(x,k) = 0$ stejnoměrně vzhledem ke k.

Důkaz těchto vět a bližší informace o řešení rovnice (16) lze nalézt v [1].
Z této věty také plyne, že řešení rovnice (16) pro hamiltonián H se s rostoucí energií k^2 v nekonečnu blíží řešení odpovídajícímu volnému hamiltoniánu H_0.
Analogické tvrzení platí na intervalu i pro y_2. Celkově tedy platí:

$$y_1(x,k) = e^{ikx} \left(1 + \frac{g(x,k)}{1+|k|} \right)$$
$$y_2(x,k) = e^{-ikx} \left(1 + \frac{h(x,k)}{1+|k|} \right)$$

kde $\lim_{x\to+\infty} g(x,k) = 0$ a $\lim_{x\to-\infty} h(x,k) = 0$ stejnoměrně vzhledem ke k.
Pro nenulové $k \in \mathbb{R}$ lze tedy vytvořit dva fundamentální systémy řešení s bázemi

$$\{y_1(x,k), y_1(x,-k)\} \text{ a } \{y_2(x,k), y_2(x,-k)\}$$

Protože oba systémy generují stejnou množinu řešení, musí být možné vyjádřit vektory jednoho z nich jako lineární kombinaci vektorů druhého. Tzn. platí:

$$y_2(y,k) = a(k)y_1(x,-k) + b(k)y_1(x,k) \tag{19}$$

a protože $y_1(x,k) = \overline{y_1(x,-k)}$ a $y_2(x,-k) = \overline{y_2(x,k)}$ platí po komplexním sdružení i

$$y_2(y,-k) = \overline{b(k)}y_1(x,-k) + \overline{a(k)}y_1(x,k) \tag{20}$$

pokud zavedeme matici přechodu

$$C(k) = \begin{pmatrix} a(k) & b(k) \\ \overline{a(k)} & \overline{b(k)} \end{pmatrix} \tag{21}$$

a sloupcové vektory

$$Y_1(x,k) = \begin{pmatrix} y_1(x,k) \\ y_1(x,-k) \end{pmatrix} \text{ a } Y_2(x,k) = \begin{pmatrix} y_2(x,k) \\ y_2(x,-k) \end{pmatrix}$$

lze vyjádřit rovnosti (19) a (20) maticově jako

$$Y_2(x,k) = C(k)Y_1(x,k)$$

Důležitým faktem je, že matice C je unitární a platí

$$det(C) = 1 = |a(k)|^2 - |b(k)|^2$$

Výše zmíněné systému tvoří úplný ortonormální systém zobecnených funkcí operátoru H.
Označme $\{\psi_j(x)\}$ vlastní funkce s normou v prostoru $L^2(\mathbb{R})$ rovnou 1. Jako M_k s mírou $d\sigma$ označíme prostor složený z dvou kopií $\mathbb{R}_k^+ = \{k|k>0\}$, které označíme $'R_k^+$ a $''R_k^+$ a konečnou množinu bodů $\{k_j\}$. Míra $d\sigma(k)$ je rovna Lebesgueově míře dk na každé kopii $\mathbb{R}_k^+$ a δ funkci v bodech k_n.
Toto v zásadě vyjadřuje zobrazení pomocí Fourierovy transformace z prostoru $L^2(\mathbb{R}, dx)$ do prostoru $L^2(\mathbb{R}, d\tilde{\sigma})$. Na tomto prostoru je operátor H reprezentován jako operátor násobení funkcí σ a má dvojité spektrum. Tento prostor je proto rozdělen na dva prostory $'\mathbb{R}_k^+$ a $''\mathbb{R}_k^+$ a na každém z nich má jednoduché spektrum.
Dále definujme pro $k \in M_k$ dva systémy funkcí

$$\Phi^+ \quad = \begin{cases} (\sqrt{2\pi}a(k))^{-1}y_2(x,k), & k \in' \mathbb{R}_k^+ \\ (\sqrt{2\pi}a(k))^{-1}y_1(x,k), & k \in'' \mathbb{R}_k^+ \\ \psi_n(x), & k \in k_n \end{cases}$$

$$\Phi^- \quad = \begin{cases} (\sqrt{2\pi}a(k))^{-1}y_1(x,-k), & k \in' \mathbb{R}_k^+ \\ (\sqrt{2\pi}a(k))^{-1}y_2(x,-k), & k \in'' \mathbb{R}_k^+ \\ \psi_n(x), & k \in k_n \end{cases}$$

Pak platí:

Věta 18. *Systémy funkcí $\Phi^+(x,k)$ a $\Phi^-(x,k)$ jsou ortnonormální systémy zobecněných vlastních funkcí operátoru H. Zobrazení funkce $f(x) \mapsto g^\pm(x)$ definované:*

$$\begin{aligned} f(x) = &\int \Phi^\pm(x,k)g^\pm(k)d\sigma(k) \\ g^\pm(k) = &\quad \int f(x)\overline{\Phi^\pm(x,k)}dx \end{aligned}$$

je unitární isomorfismus prostoru $L^2(\mathbb{R})$ na $L^2(M_k, d\sigma(k))$.

Podobně lze nalézt spektrální reprezentaci operátoru H_0 na prostorech $L^2(\mathbb{R}^+) \bigoplus L^2(\mathbb{R}^+)$ a funkce v tomto prostoru reprezentovat jako dvojici (ϕ_1, ϕ_2)., kde $\phi_j \in L^2(\mathbb{R}^+)$. Odpovídající zobecněné vlastní funkce

$$\begin{aligned} z_1^\pm(x,k) &= e^{-ikx} \\ z_2^\pm(x,k) &= e^{ikx} \end{aligned}$$

pro $k > 0$.
Vztah mezi těmito dvěma systémy ukazuje následující věta:

Věta 19. *Pokud $v(x)$ splňuje podmínku* (18) H_0 *a* H *jsou vlnové operátory* $\Omega_\pm$ *definovány jako*

$$\Omega_\pm z_j^\pm(x,k) = y_j^\pm(x,k)$$

pro $k > 0$, $j = 1, 2$.

Rozptyl lze poté reprezentovat pomocí matice rozptylu

$$S(k) = \begin{pmatrix} s_{11}(k) & s_{12}(k) \\ s_{21}(k) & s_{22}(k) \end{pmatrix}$$

pro $k > 0$.
Pak lze vyjádřit rozptyl jako

$$S(k)\begin{pmatrix} \phi_1(k) \\ \phi_2(k) \end{pmatrix}$$

Z fyzikálního pohledu toto znamená, že z $x \to -\infty$ letí částice e^{ikx}, interaguje s potenciálem a část v podobě Te^{ikx} projde a část se odrazí zpět jako Re^{-ikx}.
T se nazývá keoficient průchodu a R se nazývá koeficient odrazu. Jejich kvadráty $|T|^2$, respektive $|R|^2$ poté odpovídají pravděpodobnostem průchodu, respektive odrazu částice. Platí také že $|R|^2 + |T|^2 = 1$.

Příklad 3. *Uvažujme Hamiltonián* $H = H_0 + \alpha\chi(x)$ *kde* χ *je charakteristická funkce intervalu* $(-1, 1)$. *Řešení rozptylu pak vede na hledání řešení funkce* (16).
Ta má tvar

$$-\frac{d^2}{dx^2}\phi = k^2\phi \textit{ pro } x \in \mathbb{R}\backslash(-1,1) \tag{22}$$

$$-\frac{d^2}{dx^2}\phi = (k^2 - \alpha)\phi \textit{ pro } x \in (-1,1) \tag{23}$$

$$\tag{24}$$

pro $k > 0$.
Pro $\alpha < k^2$ *hledáme řešení rovnice ve tvaru*

$$\begin{aligned} y_1(x,k) &= e^{ikx} + Re^{-ikx} \textit{ pro } x \to -\infty \\ y_2(x,k) &= Te^{ikx} \textit{ pro } x \to -\infty \end{aligned}$$

snadno lze nahlédnout že se jedná o řešení rovnice (23).
rovnice (24) *má řešení ve tvaru*

$$y_3(x,k) = c_1 e^{i\sqrt{k^2-\alpha}x} + c_2 e^{-i\sqrt{k^2-\alpha}x}$$

protože řešení na celém intervalu musí být spojité včetně první derivace, musí jednotlivá řešení splňovat následující hraniční podmínky:

$$\begin{aligned} y_1(-1,k) &= y_3(-1,k) \\ y_1'(-1,k) &= y_3'(-1,k) \\ y_2(1,k) &= y_3(1,k) \\ y_2'(1,k) &= y_3'(1,k) \end{aligned}$$

Z toho získáme soustavu rovnic, ve které označíme $e^{ik} = a$, $e^{i\sqrt{k^2-\alpha}} = b$

$$\begin{aligned} \overline{a} + Ra &= c_1\overline{b} + c_2 b \\ ik\overline{a} - ikRa &= c_1 i\sqrt{k^2-\alpha}\,\overline{b} - c_2 i\sqrt{k^2-\alpha} b \\ Ta &= c_1 b + c_2\overline{b} \\ ikTa &= c_1 i\sqrt{k^2-\alpha} b - c_2 i\sqrt{k^2-\alpha}\,\overline{b} \end{aligned}$$

řešeními rovnice jsou

$$T = \frac{4k\overline{a}\sqrt{k^2-\alpha}}{a(2\overline{b}^2k^2 + 2\overline{b}^2k\sqrt{k^2-\alpha} - \overline{b}^2\alpha - 2k^2b^2 + 2kb^2\sqrt{k^2-\alpha} + n^2\alpha)}$$

$$R = \frac{\overline{a}\alpha(\overline{b}^2 - b^2)}{a(2\overline{b}^2k^2 + 2\overline{b}^2k\sqrt{k^2-\alpha} - \overline{b}^2\alpha - 2k^2b^2 + 2kb^2\sqrt{k^2-\alpha} + n^2\alpha)}$$

Vztah mezi operátorem rozptylu a maticí rozptylu je takový, že operátor rozptylu je možné zapsat jako direktní integrál přez prostory $L^2('\mathbb{R})$ a $L^2(''\mathbb{R})$.
Důkazy vět a další informace o teorii rozptylu lze nalézt v [1] nebo [2].

3.4 Rozptyl pro δ potenciál

δ potenciál je významný, protože umožňuje vyjádřit bodovou interakci v bodě y. Matematicky ho lze zavézt jako samosdružené rozšíření operátoru $\dot{H}$ s $\mathrm{Dom}\,\dot{H} = \{\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}|\psi(y) = 0\}$. Tento prostor je hustý v $L^2(\mathbb{R})$ a proto má smysl hledat sdružený operátor.
Sdružený operátor $\dot{H}^*$ má definiční obor $\mathrm{Dom}\,\dot{H}^* = W^{2,2}(\mathbb{R}\backslash\{0\}) \cap W^{2,1}(\mathbb{R}))$ kde $W^{k,j}(M) = \{\psi| \sum_{i=0}^k ||\psi^{(i)}||_j^j < +\infty\}$ značí Sobolevův prostor. $\psi^{(i)}$ zde značí i-tou derivaci, která je definována skoro všude a $||.||_j$ značí normu na prostoru $L^j(M)$.
Operátor $\dot{H}$ má indexy defektu $(1,1)$. Rovnice

$$\dot{H}^*\phi = \frac{d^2}{dx^2}\psi = \pm i\phi$$

má pro znaménko + řešení $\psi = e^{\pm\sigma_-|x-y|}$, kde $\sigma_\pm = \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) \pm i\sin\left(\frac{\pi}{4}\right)$. Toto řešení nesplňuje rovnici bodově (nemá derivaci v bodě $x = y$). Splňuje ji ale ve smyslu

$$(\dot{H}\phi, \psi) = (\phi, \dot{H}^*\psi)$$

pro všechna $\phi \in \mathrm{Dom}\,\dot{H}$.

Do $\mathrm{Dom}\,\dot{H}^*$ (a do $L^2(\mathbb{R})$ patří pouze řešení $\psi_+ = e^{-\sigma_+|x-y|}$.
Podobně $\psi_- = e^{-\sigma_-|x-y|}$ řeší rovnici pro znaménko $-$.
Podle věty (4) můžeme najít samosdružená rozšíření operátoru $\dot{H}$.
Podobně jako v příkladě (1) definujeme akci operátoru $V_\mu : S_+ \mapsto S_-$ jako $V\psi_+ = \mu\psi_-$, kde μ je komplexní jednotka.

Akce samozsdruženého rozšíření $\tilde{H}(\mu)$ generované tímto operátorem na vektor $\psi = \phi + c(1-\mu)\psi_+$ je

$$\tilde{H}(\mu)\psi = \dot{H}\phi + ic(e^{-\sigma_+|x-y|} + \mu e^{-\sigma_-|x-y|})$$

Definiční obor operátoru $\tilde{H}(\mu)$ můžeme zapsat pomocí okrajových podmínek. Pokud nadefinujeme $\psi(y_\pm) = \lim_{\varepsilon\to 0}\psi(y\pm\varepsilon)$
Pak pro rozdíl derivací v bodě y platí

$$\begin{aligned}
&(\phi + c\psi_+ + c\mu\psi_-)'(y_+) - (\phi + c\psi_+ + c\mu\psi_-)(y_-) = \\
&= \underbrace{c(\phi'(y_+) - \phi'(y_-))}_{=0 \text{ protože } \phi \text{ je spojitá}} + \underbrace{c(-\sigma_+ - \mu\sigma_-) - c(\sigma_+ + \mu\sigma_-)}_{2*\sigma_\pm = 1\pm i} = \\
&= -c(1+\mu+i-i\mu) * \frac{1+\mu}{1+\mu} = -c(1+\mu) * \left(1 + i * \frac{1-\mu}{1+\mu}\frac{1+\overline{\mu}}{1+\overline{\mu}}\right) = \\
&= -c(1+\mu)\left(1 + i * \frac{\overbrace{1-\mu*\overline{\mu}}^{=0} + \overbrace{\mu-\overline{\mu}}^{=2i\Im\mu}}{2+2\Re\mu}\right) = c(1+\mu)\left(-1 + \frac{\Im\mu}{1+\Re\mu}\right) = \\
&= \alpha(\phi(y) + c\psi_+(y) + c\mu\psi_-(y))
\end{aligned}$$

kde $\Im\mu$ značí imaginární část komplexního čísla μ, $\Re\mu$ značí reálnou část komplexního čísla μ a

$$\alpha = -1 + \frac{\Im\mu}{1+\Re\mu}$$

pokud komplexní jednotku μ přepíšeme jako $\mu = e^{i\theta}$ dostaneme

$$\alpha = -1 + \frac{\sin(\theta)}{1+\cos(\theta)}$$

pro $\theta \in (-\pi, \pi)$. Platí

$$\lim_{\theta\to\pm\pi}\alpha = \pm\infty$$

Proto má smysl následující definice:

Definice 25 (δ potenciál)**.**

$$-\Delta_{\alpha,y} = -\frac{d^2}{dx^2} \tag{25}$$

$$\text{Dom} -\Delta_{\alpha,y} = \{\psi \in H^{2,1}(\mathbb{R}) \cap H^{2,2}(\mathbb{R}\backslash y) | g'(y_+) - g'(y_-) = \alpha(y)\}\ \alpha \in \mathbb{R} \tag{26}$$

se nazývá δ potenciál v bodě y a silou α.

I když nemá δ potenciál tvar (11), lze ho v jednorozměrném případě aproximovat potenciály který tento tvar mají

$$H_{\varepsilon,y} = H_0 + \lambda(\varepsilon)\varepsilon^{-2}V\left(\frac{-y}{\varepsilon}\right) \tag{27}$$

kde V je operátor násobení funkcí $v(x)$, $y \in \mathbb{R}$ a $\varepsilon > 0$. Platí totiž následující věta:

Věta 20 (Aproximace δ potenciálu)**.** *Nechť $v(x) \in L^1(\mathbb{R})$ je reálná funkce a $y \in \mathbb{R}$ a k^2 je prvkem rezolventní množiny operátoru $\Delta_{\alpha,y}$. Pak pro $\varepsilon \to 0$ je k^2 prvkem rezolvení množiny operátoru $H_{\varepsilon,y}$ a operátor $H_{\varepsilon,y}$ konverguje k $\Delta_{\varepsilon,y}$ v následujícím smyslu*

$$\text{n-lim}_{\varepsilon\to 0}(H_{\varepsilon,y} - k^2)^{-1} = (-\Delta_{\alpha,y} - k^2)^{-1}$$

kde

$$\alpha = \lambda'(0) \int_{-\infty}^{+\infty} v(x)dx \tag{28}$$

Navíc platí že matice rozptylu operátoru $H_{\varepsilon,y}$ konverguje pro $\varepsilon \to 0$ k matici rozptylu operátoru $-\Delta_{\alpha,y}$.

Důkazy vět a další informace o δ potenciálu lze nalézt v [5].

4 Rozptyl pro časově proměnlivé periodické potenciály

Uvažujme Hamiltonián

$$H(\omega t) = H_0 + V(\omega t) \tag{29}$$

kde operátor $V(\omega t)$ je operátor násobení funkcí $v(x, \omega t)$.
Analogicky jako v minulé kapitole označíme propagátor jako $U_\omega(t, t_0)$ a odpovídající vlnové operátory

$$\Omega_\pm(\omega, t_0) = \text{s-lim}_{t\to\pm\infty} U^*_\omega(t + t_0, t_0)e^{-iH_0 t}$$

a operátor rozptylu

$$S(\omega, t_0) = \Omega^*_+(\omega, t_0)\Omega_-(\omega, t_0)$$

Oproti původní definici je zde důležitá závislost na počátečním okamžiku t_0. Nyní pro jednodušší zápis budeme předpokládat, že $t_0 = 0$ a závislost operátorů na t_0 nebude explicitně vyjádřena. Například $S(\omega, t_0)$ označíme jako $S(\omega)$. Toto zjednodušení si lze dovolit, protože výsledky následující kapitoly nezávisí na počátečním okamžiku. Pro časově závislé systémy je těžší zjistit, kdy vlnové operátory existují a jsou úplné. Pokud se ale omezíme na časově proměnlivé potenciály pro které platí

$$v(x, t + \tau) = v(x, t)$$

pro $\forall x, t \in \mathbb{R}$.
Pro odpovídající propagátor pak platí

$$U_\omega(t + \tau, t_0 + \tau) = U_\omega(t, t_0)$$

a analogicky i pro vlnové operátory a operátor rozptylu.
Pokud navíc platí

$$|v(x, t)| \le b((1 + |x|^2)^{\frac{1}{2}})^{-\nu} \ \nu > 1 \tag{30}$$

platí analogie věty (14) a vlnové operátory existují a jsou úplné.
$b \in \mathbb{R}$ je konstanta nezávislá na čase t.
Časově proměnlivý δ potenciál lze zavézt jako

$$\Delta_{\alpha,y}(t) = \Delta_{\alpha(t),y} \tag{31}$$

Toto znamená že časová závislost je vyjádřena pouze změnou okrajové podmínky.

4.1 Vysokofrekvenční limita

Nyní se podívejme na chování operátoru rozptylu pro $\omega \to +\infty$. V této části budeme pro zjednodušení předpokládat, že operátor $V(t)$ má místo obecné periody τ periodu 2π, tzn. $V(t) = V(t + 2\pi)$.
Jeho Fourierův rozvoj můžeme vyjádřit jako

$$V(t) = \sum_{-\infty}^{+\infty} V_n e^{int} \tag{32}$$

kde operátor V_n je operátor násobení

$$v_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} v(x,t) e^{-int} dt \tag{33}$$

Dále budeme předpokládat, že funkce $v(x,t)$ určující potenciál $V(t)$ splňuje následující podmínky:

1. $v(x,t)$ je dvakrát spojitě diferencovatelná vzhledem k t a časové derivace splňují (30)
2. průměrný potenciál $v_0(x)$ definuje časově nezávislý systém (H, H_0), $H = H_0 + V_0$ s úplnými vlnovými operátory a operátorem rozptylu S s vlastností

$$||\sqrt{(1+x^2)}^{\,\nu} e^{iHt} \Omega_- \psi||_2 \leq c(1+|t|)^{\varepsilon-\nu} \tag{34}$$

   pro $\psi \in \mathcal{D}$, kde $\mathcal{D}$ je hustý podprostor $\mathcal{H}$ funkcí ψ jejichž Fourierova transformace je nekonečněkrát diferencovatelná.
3. $v(x,t)$ je n-krát diferencovatelný vzhledem k x a parciální derivace $\partial_x^m v(x,t)$ a $\partial_t \partial_x^m v(x,t)$ splňují podmínku (30) pro $m \in \{1, 2, \ldots, n\}$, kde $n \geq 1$.

Z podmínky (1) díky per partes plyne, že $|v_n(x)| \leq \frac{c}{n^2}(1 + |x|^2)^{\frac{1}{2}}$ z toho plyne, že (32) konverguje v normě.
Nyní lze zapsat Hamiltoniány systému jako

$$H(\omega t) = H + \tilde{V}(\omega t)$$
$$H = H_0 + V_0$$

kde

$$\tilde{V}(t) = V(t) - V_0 = \sum_{n\neq 0} V_n e^{int}$$

Z podmínky (2) lze odvodit (viz [4]) existenci vlnového operátoru na systému $(H(\omega t), H)$. Proto lze použít řetězová pravidlo na systémy $(H(\omega t), H)$ a (H, H_0) a vyjádřit rozptylový operátor $S(\omega)$ jako

$$S(\omega) = \Omega_+^* \tilde{S}(\omega)\Omega_- \tag{35}$$

$$\tilde{S}(\omega) = \Omega_+^*(\omega)\Omega_-(\omega) \tag{36}$$

kde

$$\Omega_\pm = \lim_{t\to\pm\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t}$$

$$\Omega_\pm(\omega) = \lim_{t\to\pm\infty} U_\omega(t,0)e^{-iH_0t}$$

Věta 21. *Nechť platí podmínky (1) - (3) pro $n \geq 2$. Pak*

$$\text{s-lim}_{\omega\to+\infty} S(\omega) = S \tag{37}$$

kde $S = \Omega_+^*\Omega-$ je operátor rozptylu odpovídající statickému potenciálu V_0.

Důkaz této věty a a větu platnou pro nízkofrekvenční limitu lze nalézt v [4].
Tuto větu bohužel nelze aplikovat na δ potenciál ve tvaru (31), protože nemá požadovaný tvar Hamiltoniánu H. Je ale možné ji použít na jeho aproximace (28).
Otevřenou otázkou ale zůstává, zda je možné tyto aproximace využít v limitě k popsání časově závislého δ potenciálu pomocí "průměrného δ poteciálu", tzn. pomocí okrajových podmínek.

5 Závěr

V této práci jsem se zabýval možností aplikace výsledků práce [4] na δ potenciály.
Tato práce shrnuje pojmy nutné k řešení úlohy rozptylu a jak klasickou metodou, tak metodou stacionární fáze. Zavádí také δ potenciál a ukazuje možnost zacházení s periodickými časově závislými potenciály.
Přímá aproximace vysokofrekvenční limity průměrným potenciálem má ale bohužel předpoklady, které δ potenciál nesplňuje. δ potenciál ale lze aproximovat hladkými funkcemi, které tyto podmínky splňují. Otázkou proto zůstává, zda je možné využít i této aproximace δ potenciálu k alternativnímu důkazu vysokofrekvenční aproximace.
Tímto se pravděpodobně bude zabývat moje další práce.

Reference

[1] M.A. Shubin F.A. Berezin, *The schroedinger equation*, Kluwer Academic Pulishers, 1991.

[2] M. Havlíček J. Blank, P. Exner, *Lineární operátory v kvantové fyzice*, Karolinum, 1993.

[3] J. Lukeš, *Zápisky z funkcionální analýzy*, Karolinum, 2003.

[4] P. A. Martin and M. Sassoli de Bianchi, *On the low- and high-frequency limit of quantum scattering by time-dependent potentials*, Journal of Physics A Mathematical General **28** (1995), 2403–2427.

[5] R. Hoegh-Krohn H. Holden S. Albeverio, F. Gesztesy, *Solvable models in quantum mechanics*, Springer-Verlag, 1988.

[6] P. Šťovíček, *Metody matematické fyziky 1*, České vysoké učení technické, 2006.