ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
Katedra matematiky

Dvourozměrné kvantové modely zahrnující magnetické pole a bodovou interakci

Diplomová práce

Jméno: Petr Vytřas
Školitel: prof. Ing. Pavel Šťovíček, DrSc.
Konzultant: doc. RNDr. Pavel Exner, DrSc.
Ak. rok: 2001-2002

Obsah

Seznam použitých symbolů

$\mathbb{C}$	množina komplexních čísel
$C_0^\infty(X)$	prostor funkcí hladkých na množině X a s kompaktním nosičem
$\mathrm{D}(A)$	definiční obor operátoru A
$\det M$	determinant matice M
$\mathrm{diag}(a_1, \ldots, a_n)$	diagonální matice s prvky $a_1, \ldots, a_n$
H^2_{loc}, $\mathrm{H}^{2,1}$, $\mathrm{H}^{2,2}$	Sobolevovy prostory
$\mathrm{Im}\ z$	imaginární část čísla z
$\imath$	imaginární jednotka
$\mathrm{Ker}\ A$	jádro zobrazení A
$\mathrm{L}^2(X, d\mu)$	prostor funkcí kvadraticky integrovatelných na množině X s mírou $d\mu$
$\mathbb{N}$	množina přirozených čísel
$\mathbb{R}$	množina reálných čísel
$\mathrm{Ran}\ A$	obor hodnot zobrazení A
$\mathrm{Rank}(A)$	hodnost matice A
$X^{m,n}$	matice řádu m, n s prvky z množiny X
$\mathbb{Z}$	množina celých čísel
$\mathbb{Z}_+$	$\mathbb{Z}_+ = \mathbb{N} \cup \{0\}$
$(.,.)$	skalární součin
$\otimes$	tenzorový součin
$\oplus$	ortogonální součet

1 Úvod

Vznik kvantové mechaniky, datující se do dvacátých let minulého století, můžeme směle a bez nadsázky nazvat jedním z nejvýraznějších zlomů lidského myšlení v celé jeho historii. Nabízí nám pohled na svět diametrálně odlišný od všech do té doby existujících, odporující naší každodenní smyslové zkušenosti, neustále provokující „zdravý lidský rozum“. Více než jiné oblasti fyziky je kvantová mechanika úzce, bytostně spjata s matematickou teorií, která za ní stojí a bez které by nebyla ničím. Její důsledky a možná ještě více postuláty, na nichž je postavena, mají hluboký, zásadní filozofický přesah, vynucují si změny samých základů našeho uvažování a chápání světa a spojují v sobě aspekty matematiky, fyziky a filozofie. Tato teorie je brilantní ukázkou abstraktního myšlení a pomníkem všech, kdož se podíleli na jejím zrození – Heidelberg, Bohr, Schrödinger, Born a mnozí další.

V téměř stejné době, ve které byly položeny základní kameny kvantové teorie, vzniká i její matematický protějšek. Zásadní zásluhu na tom měl bezpochyby von Neumann a jeho práce na konci dvacátých let a na začátku let třicátých minulého století. V nich shrnul matematické základy kvantového formalismu, na něž později navazovali jeho pokračovatelé. V současné době se matematické teorie, stojící za kvantovou fyzikou, řadí do oblasti takzvané matematické fyziky.

Autor je šťasten, že i díky této práci mohl alespoň částečně proniknout do tajů této vědní disciplíny a úžasnout nad jejími myšlenkovými kreacemi. Opusťme tedy nyní barvitý sloh a květnatou mluvu epických úvodů a ponořme se do fascinujícího světa precizního matematického jazyka.

1.1 Cíle a struktura práce

Cíl této práce tkví ve studiu některých kvantových systémů. Zabýváme se jimi zde z pohledu ryze matematického. To znamená, že studujeme operátory, které tyto systémy popisují a zkoumáme jejich vlastnosti; konkrétně se jedná o takzvané bezčasové Schrödingerovy operátory.

Budeme zde rozebírat dva systémy, které mají společné určité rysy. Jedná se zejména o to, že v obou se vyskytuje homogenní magnetické pole a také bodová interakce (její vysvětlení je podáno v kapitole 2.3).

První model, který vyšetřujeme, se zabývá kvantovou částicí v působení zmiňovaného magnetického pole a bodové interakce v kombinaci s vlivem třetím, jímž je takzvaný Aharonovův-Bohmův efekt (blíže viz kapitola 3.1). V této části používáme především prostředků funkcionální analýzy a teorie operátorů. Pomocí metody samosdružených rozšíření (viz kapitola 2.2) nalezneme všechny operátory, které popisují náš systém, definujeme je pomocí jistých okrajových podmínek a dále vyšetříme jejich spektra.

K druhému modelu přistupujeme trochu jinak. Uvažujeme v něm molekulu vodíku H_2^+ v silném magnetickém poli. S využitím podobných metod jako v prvním případě popíšeme tento problém opět pomocí bodových interakcí, tentokrát dvou. Nyní ale zkoumáme numericky jen určité vlastnosti našeho modelu. Zajímá nás především poloměr molekuly ve stabilním stavu a její vazebná energie.

Další obecné informace o těchto dvou systémech je možno nalézt vždy v úvodu do jednotlivých oddílů, to jest v kapitolách 3.1 a 4.1 .

Co se struktury týče, práce je rozdělena do tří hlavních částí. V první (oddíl 2) zlehka nastíníme matematický aparát, který budeme používat. V dalších dvou částech se zabýváme zmiňovanými systémy, konkrétně v oddílu 3 Aharonovovým-Bohmovým efektem a v oddílu 4 molekulou H_2^+.

1.2 Otázka autorství

Jelikož se tento text zabývá problémy, na nichž autor nepracoval sám, bylo by záhodno krátce se zmínit o podílu vlastních výsledků. Týká se to oddílů 3 a 4.

Výsledky oddílu 3 byly zpracovány a vyšly v článku tří spoluautorů [ESV]. Z důvodu odlišení jsou proto vyčleněny podkapitoly 3.3.1 a 3.6.1. Na prvé nemá autor žádný podíl, na druhé tvoří jeho zásluhy na výsledcích množinu nulové míry. Uvádíme je zde především proto, aby tato část byla nějakým způsobem uzavřena a tvořila ucelený text. Ostatní výsledky jsou vlastní, i když je poctivé říci, že kapitola 3.5 vznikla především díky úsilí školitele. Dodejme, že i přes zařazení podkapitoly 3.3.1 doprostřed textu se jedná o nezávislou část, na niž následující kapitoly nenavazují.

Co se oddílu 4 týče, jsou vlastní výsledky shrnuty v kapitolách 4.4 a 4.5. Zkoumání této problematiky probíhalo ve spolupráci s jedním z autorů článku [BBDPO].

Poděkování

Děkuji svému školiteli, prof. Ing. Pavlu Šťovíčkovi, DrSc., za jeho ochotu, trpělivost a nezměrnou pomoc, bez níž by tato práce nemohla vzniknout.
Děkuji profesoru Pierru Duclosovi za podporu při stáži v Centre de Physique Théorique v Marseille.
Děkuji svým přátelům – oni vědí, za co.
Děkuji svým rodičům za vše, co mi v životě dali.

2 Obecné základy a vysvětlení pojmů

V tomto oddílu popíšeme velice stručně základy matematického aparátu, se kterým budeme v celé práci pracovat, a učiníme také několik dalších obecných poznámek o postupech a značení, které používáme. Bohužel není možné vysvětlovat zde hlouběji zmíněnou teorii, proto se omezíme jen na nejnutnější definice a vlastnosti. Podrobnější znalosti je možno získat v kterékoliv učebnici nebo knize věnované funkcionální analýze nebo lineárním operátorům na Hilbertových prostorech. Malou výjimku učiníme jen v kapitole 2.3, která pojednává o teorii obecně nepříliš známé. Už vůbec zde potom není místo zabývat se podstatou kvantové mechaniky.

2.1 Neomezené a samosdružené operátory

2.1.1 Motivace

V této práci se pohybujeme výhradně v Hilbertových prostorech a jejich podprostorech; v naprosté většině případů budeme používat Hilbertův prostor $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)\mathrm{d}x^n$ a jeho rozklady. Zabýváme se diferenciálními lineárními operátory, definovanými na těchto Hilbertových prostorech.

V následující podkapitole připomeneme teorii neomezených operátorů. Motivací pro ni bude následující fakt:

Tvrzení. Každý diferenciální operátor je neomezený.

2.1.2 Teorie neomezených samosdružených operátorů

Význačnou roli mezi neomezenými lieárními operátory hrají takvzané operátory hustě definované - můžeme pro ně totiž definovat pojem sdruženého operátoru.

Definice. Říkáme, že lineární operátor T na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ je **hustě definovaný**, právě když jeho definiční obor je hustý v $\mathcal{H}$, tedy $\overline{\mathrm{D}(T)} = \mathcal{H}$.

V této podkapitole budeme pod pojmem **operátor** vždy rozumět lineární operátor, hustě definovaný na nějakém Hilbertově prostoru. $\mathcal{H}$ bude vždy značit Hilbertův prostor. Zavedeme nyní postupně pojem operátoru sdruženého a následně samosdruženého.

Definice. Buďte T, S operátory. Potom T nazýváme **rozšíření** S, právě když $\mathrm{D}(S) \subset \mathrm{D}(T)$ a zároveň $T\varphi = S\varphi$ pro všechna $\varphi \in \mathrm{D}(S)$. Značíme $S \subset T$.

Definice. Operátor T nazveme **uzavřený** právě tehdy, když pro každou posloupnost $\{x_n\} \subset \mathrm{D}(T)$ takovou, že $x_n \to x$ a $Tx_n \to y$ platí $x \in \mathrm{D}(T)$

a $y = Tx$.

Definice. Říkáme, že operátor T **lze uzavřít**, existuje-li jeho uzavřené rozšíření. Každý operátor, který lze uzavřít, má nejmenší uzavřené rozšíření, které nazýváme **uzávěr** a značíme $\overline{T}$.

Definice. Nechť T je operátor na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$. Nechť

$$\varphi \in \mathrm{D}(T^*) \;\Leftrightarrow\; \exists \eta \in \mathcal{H}:\; (T\psi, \varphi) = (\psi, \eta)\ \forall \psi \in \mathrm{D}(T).$$

Pro každé $\varphi \in \mathrm{D}(T^*)$ definujeme $T^*\varphi = \eta$. Potom T^* s definičním oborem $\mathrm{D}(T^*)$ nazýváme operátorem **sdruženým** k operátoru T.

Věta. Nechť T je operátor. Potom:
a) $S \subset T \;\Rightarrow\; T^* \subset S^*$.
b) T^* je uzavřený.
c) T lze uzavřít právě tehdy, když $\mathrm{D}(T^*)$ je hustý; potom $\overline{T} = T^{**}$.
d) Jestliže T lze uzavřít, potom $(\overline{T}) = T^*$.

Definice. Operátor T nazýváme **symetrický**, jestliže $T \subset T^*$, tedy pokud $\mathrm{D}(T) \subset \mathrm{D}(T^*)$ a $T\varphi = T^*\varphi$ pro všechna $\varphi \in \mathrm{D}(T)$. Ekvivalentně se dá symetrie definovat podmínkou $(T\varphi, \psi) = (\varphi, T\psi)\ \forall \varphi, \psi \in \mathrm{D}(T)$.

Poznámka. Každý symetrický operátor lze uzavřít.

Definice. Operátor T nazýváme **samosdružený**, jestliže $T = T^*$, tedy pokud T je symetrický a $\mathrm{D}(T) = \mathrm{D}(T^*)$.

Tvrzení. Nechť T je operátor. Platí následující tvrzení:
a) Když T je symetrický, potom $T \subset T^{**} \subset T^*$.
b) Když T je symetrický a uzavřený, potom $T = T^{**} \subset T^*$.
c) Když T je samosdružený, potom $T = T^{**} = T^*$.

Zavedli jsme tedy velice důležitý pojem samosdruženého operátoru. Zmiňme ještě krátce několik definic, týkajících se spekter operátorů.

Definice. **Spektrum** $\sigma(T)$ uzavřeného operátoru T na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ je množina komplexních čísel λ, pro něž operátor $T - \lambda I$ není bijekcí $\mathrm{D}(T)$ na $\mathcal{H}$. Zavádíme dále
a) $\sigma_p(T) = \lambda \in \mathbb{C} : T - \lambda I$ není injektivní (λ je vlastní číslo).
Pro $\lambda \notin \sigma_p(T)$ definujeme
b) $\sigma_c(T) = \lambda \in \mathbb{C} : T - \lambda I$ není surjektivní a $\overline{\mathrm{Ran}(T - \lambda I)} = \mathcal{H}$.
c) $\sigma_r(T) = \lambda \in \mathbb{C} : T - \lambda I$ není surjektivní a $\overline{\mathrm{Ran}(T - \lambda I)} \neq \mathcal{H}$.
Potom se $\sigma_p(T)$ nazývá **bodové spektrum**, $\sigma_c(T)$ **spojité spektrum** a konečně $\sigma_r(T)$ **reziduální spektrum** operátoru T.

Poznámka. Platí $\sigma(T) = \sigma_p(T) \cup \sigma_c(T) \cup \sigma_r(T)$ a tento rozklad je disjunktní.

Samosdružené operátory mají tuto velice důležitou vlastnost:

Věta. Operátor T je samosdružený právě tehdy, když $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$. Pro samosdružený operátor T navíc platí $\sigma_r(T) = \emptyset$.

Definice. Říkáme, že normální operátor T (tedy operátor splňující podmínku $TT^* = T^*T$) na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ **má čistě bodové spektrum**, pokud existuje ortonormální báze $\mathcal{H}$ tvořená vlastními vektory operátoru T.

Definice. Nechť T je samosdružený operátor. **Esenciální spektrum** operátoru T, které značíme $\sigma_{ess}(T)$, tvoří množina $\lambda \in \mathbb{R}$ takových, že λ je hromadný bod množiny $\sigma(T)$ nebo vlastní hodnota nekonečné násobnosti.

S pojmem spektra operátoru úzce souvisí i takzvaná rezolventní množina.

Definice. Nechť T je uzavřený operátor na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$. Komplexní číslo λ je **regulární hodnota** operátoru T (leží v **rezolventní množině** $\rho(T)$), právě když $\lambda I - T$ je bijekce $\mathrm{D}(T)$ na $\mathcal{H}$ a inverzní operátor $(\lambda I - T)^{-1}$ je omezený. Jestliže $\lambda \in \rho(T)$, pak $R_T(\lambda) = (\lambda I - T)^{-1}$ se nazývá **rezolventa** operátoru T v bodě λ.

Poznámka. Platí $\sigma(T) = \mathbb{C} \setminus \rho(T)$.

Definice. Nechť $\mathcal{H} = \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^n)\mathrm{d}x^n$ je Hilbertův prostor, T operátor. Integrální jádro rezolventy $R_T(\lambda)$, tedy funkce $G : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ taková, že

$$R_T(\lambda)\psi(x) = \int_{\mathbb{R}^n} G(\lambda; x, y)\psi(y)\mathrm{d}y,$$

se nazývá **Greenova funkce** operátoru T v bodě λ.

Tím jsme s definicemi hotovi.

2.1.3 Význam samosdružených operátorů

Nyní zodpovíme nabízející se otázku, a sice proč jsou pro nás samosdružené operátory a spektra tak důležité. Důvod tkví v postulátech kvantové mechaniky.

V kvantové mechanice mluvíme o takzvaných pozorovatelných, což jsou v podstatě kvantové fyzikální veličiny – kupříkladu energie, poloha, hybnost, rychlost, spin a tak dále. Každé pozorovatelné je přitom přiřazen právě nějaký samosdružený operátor.

Hodnoty pozorovatelných můžeme samozřejmě měřit. Platí přitom, že množina hodnot, které můžeme pro danou veličinu naměřit, je shodná se spektrem příslušného operátoru. Připomeňme zde ještě jednou fakt, že spektra samosdružených operátorů jsou podmnožinou $\mathbb{R}$. To odpovídá skutečnosti, že můžeme naměřit jen reálné hodnoty pozorovatelných.

V této práci se budeme zabývat takzvanými Hamiltonovými operátory čili hamiltoniány, což jsou operátory, odpovídající celkové energii systému. V kvantové mechanice hrají nesmírně důležitou úlohu – mimo jiné určují i vývoj systému v čase. Motivace zkoumání spekter těchto operátorů je jasná – hodnoty spektra určují, v jakých energetických [MÓDECH] se systém může nacházet.

2.2 Metoda samosdružených rozšíření

V tomto oddílu popíšeme, za jakých okolností má daný symetrický operátor samosdružená rozšíření a jakým způsobem je můžeme získat.

Bez újmy na obecnosti uvažujeme jen uzavřené symetrické operátory. Pro každý symetrický operátor A totiž existuje $\overline{A}$ a platí $A^* = (\overline{A})^*$. Pro daný uzavřený symetrický operátor A tedy hledáme operátor B tak, aby platilo $A \subset B = B^* \subset A^*$.

Výraz **operátor** bude mít pro nás opět stejný význam jako v podkapitole 2.1.2, bude to tedy lineární operátor, hustě definovaný na nějakém Hilbertově prostoru.

Definice. Nechť A je symetrický operátor. Položme $\mathcal{N}_\pm = \mathrm{Ker}(A^* \pm \imath I)$. Pak $\mathcal{N}_\pm$ nazýváme **defektní podprostory** a čísla $n_\pm \in \mathbb{Z}_+ \cup \{\infty\}$ taková, že $n_\pm = \dim(\mathcal{N}_\pm)$ nazýváme indexy defektu.

Věta. Nechť A je uzavřený, symetrický operátor. Potom

$$\mathrm{D}(A^*) = \mathrm{D}(A) \dot{+} \mathcal{N}_+ \dot{+} \mathcal{N}_-,$$

kde $\dot{+}$ značí direktní součet vektorových prostorů, ne nutně diagonální.

Věta. Nechť A je uzavřený, symetrický operátor s indexy defekty n_+, n_-. Potom A má samosdružená rozšíření právě tehdy, když $n_+ = n_-$.

Věta. Nechť A je uzavřený symetrický operátor s indexy defektu $n_+ = n_-$. Potom samosdružená rozšíření A jsou v jednoznačném vztahu s unitárními zobrazeními $U : \mathcal{N}_+ \to \mathcal{N}_-$. Je-li U takové zobrazení, odpovídající samosdružené rozšíření A^U má definiční obor

$$\mathrm{D}(A^U) = \left\{\varphi + \varphi_+ + U\varphi_- \,\middle|\, \varphi \in \mathrm{D}(A),\ \varphi_+ \in \mathcal{N}_+\right\}$$

a platí

$$A^U(\varphi + \varphi_+ + U\varphi_-) = A\varphi + \imath\varphi_+ - \imath\varphi_+.$$

Poznámka. Nechť A je uzavřený symetrický operátor s indexy defektu $n_+ = n_- = n \in \mathbb{N}$. Potom zobrazení U z minulé věty můžeme ztotožnit s unitární maticí řádu n. Třída samosdružených rozšíření operátoru A se tedy například pro $n = 1$ dá popsat pomocí jednoho parametru, pro $n = 2$ čtyřmi parametry.

2.3 Bodová interakce

V tomto oddílu zlehka vysvětlíme, jak se pracuje v kvantové fyzice s modely popsanými Hamiltonovými operátory, jejichž potenciály jsou nenulové jen na diskrétní množině bodů, takzvaných zdrojů. Podáme také matematicky korektní definici takovýchto operátorů tak, jak byla popsána v [AGHH].

Hamiltoniány, které jsou v uvedené knize zkoumány, můžeme heuristicky zapsat jako

$$H = -\Delta + \sum_{y \in Y} \lambda_y \delta_y(.), \tag{1}$$

přičemž Δ je samosdružený Laplaceův operátor v $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$ s deifničním oborem $\mathrm{H}^{2,2}(\mathbb{R}^d)$. Dále $d \in \{1, 2, 3\}$ značí dimenzi konfiguračního prostoru, Y je diskrétní (konečná či nekonečná) podmožina $\mathbb{R}^d$, λ_y vazebná konstanta příslušná zdroji umístěnému v bodě y a δ_y Diracova δ-funkce vzhledem k y. Tímto způsobem se snažíme chatakterizovat situaci, kdy se kvantová částice pohybuje pod vlivem jakýchsi „kontaktních potenciálů“, tvořených bodovými zdroji o síle λ_y umístěnými v bodech y.

Modely, charakterizované Hamiltonvými operátory (1), byly již řadu let studovány v různých oblastech vědy, zvláště v atomové a jaderné fyzice a také ve fyzice pevných látek, ovšem způsobem „každý pes, jiná ves“. I proto se tyto interakce v literatuře označují mnoha názvy – „bodové interakce“, „potenciály s nulovým dosahem“, „delta interakce“, „Fermiho pseudopotenciály“ či „kontaktní interakce“. Celkové shrnutí a potřebnou preciznost přináší až publikace [AGHH].

K získání dobře definovaných samosdružených operátorů z formálního zápisu (1) se pro Y konečné dojde pomocí metody samosdružených rozšíření, popsané v minulé kapitole. Při nekonečném počtu bodových interakcí se pak používá určitého limitního přechodu; tím se zde ale nebudeme zabývat. Namísto toho popíšeme podrobněji postup ve speciálním dvourozměrném případě, a sice pro $Y = \{y\} = 0$. Vyjdeme z toho, že pro funkce $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{y\})$ musí platit $H\varphi = -\Delta\varphi$. Začneme tedy od symetrického operátoru $H' = -\Delta$ s definičním oborem $\mathrm{D}(H') = C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{y\})$ a působícího na prostoru $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^2)$. Na jeho uzávěr $\overline{H'}$ aplikujeme právě metodu samosdružených rozšíření. Zjistíme, že indexy defektu jsou rovny $(1, 1)$ a že tedy získaná samosdružená rozšíření jsou popsána jedním parametrem. Tento parametr, resp. obecně parametry (pro vyšší indexy defektu) můžeme interpretovat jako parametr, resp. parametry bodové interakce.

Je velice důležité, že na vzniklá samosdružená rozšíření se můžeme dívat jako na diferenciální operátory s jistými hraničními podmínkami v bodech $y \in Y$. Každá taková podmínka jednoznačně určuje systém, odpovídající nějakým parametrům bodové interakce. Bereme-li z těchto podmínek například tu „nejregulárnější možnou“, získáváme hamiltonián pro systém, ve kterém se delta interakce neprojevuje.

Na závěr ještě učiníme jednu krátkou poznámku. Protože modely, kterými se zde budeme zabývat my, neobsahují jen bodové interakce, ale i další vlivy, vyjádřené potenciálem A, mění se zápis (1) formálně na

$$H = -(\nabla - A(\nabla))^2 + \sum_{y \in Y} \lambda_y \delta_y(.).$$

Přitom v oddílu 3 budeme mít $Y = \{y\} = \{0\}$ a $\lambda_y = -1$, zatímco v oddílu 4 bude $Y = \{y_1, y_2\} = \{-c, c\}$, $c \in \mathbb{R}$ a $\lambda_1 = \lambda_2 = -2$. Způsob zavedení operátorů energie zůstává stejný jako v předchozím případě.

2.4 Poznámka k jednotkám a značení

Nakonec jenom stručně zmíníme otázku jednotek. Vzhledem k tomu, že se jedná o matematickou práci, fyzikální jednotky by nás jen brzdily v rozletu a překážely by nám. Nejedná se totiž o nic jiného než o konstanty, na kterých námi zkoumané vlastnosti (alespoň co se části 3 týče) zhola nezávisí. Položíme tedy

$$\hbar = e = m = c = 1,$$

kde $\hbar$ značí Planckovu konstantu, e jednotkový náboj, m hmotnost částice a c ryhlost světla. Fyzici tuto volbu nazývají přechod k atomickým jednotkám.

Na začátku části 4 se pohříchu fyzikálnímu značení nevyhneme.

3 Aharonovův-Bohmův efekt, magnetické pole a bodová interakce

3.1 Úvod

V oddílu 3 se budeme z matematického hlediska a matematickými metodami zabývat problémem, který vzejde z určité fyzikální situace. Jak již bylo řečeno, jedná se o otázku zobecněných okrajových podmínek pro rovinný Aharonovův-Bohmův efekt v homogenním magnetickém poli. Rozebereme nyní podrobněji, co se skrývá za tímto názvem.

Aharonovův-Bohmův efekt je jedním z významných a zajímavých výsledků kvantové teorie; nese název podle jmen autorů práce [AB], ve které byl před více než čtyřiceti lety tento jev popsán. Týká se vztahu magnetického toku, jehož potenciál je nenulový jen v určité oblasti, a nabité kvantové částice. Jeho podstatou je fakt, že tato částice je tokem ovlivněna, a to velice podstatně, i když je lokalizována mimo dosah totoho potenciálu. Aharonovův-Bohmův efekt byl záhy potvrzen experimentálně (viz [Ch] a [To]); od té doby se těší značnému zájmu a literatura s ním spojená je poměrně obsáhlá. Souvisí úzce s jinými kvantovými jevy, kupříkladu s Hallovým a Aharonovovým-Casherovým efektem. Smyslem této kapitoly ovšem není analýza tohoto fyzikálního jevu či jeho postavení v literatuře, toho ostatně autor ani není schopen, proto jen odkazujeme například na práce [OP], [PT] a [ChP]. Je ovšem důležité zmínit případ takzvaného čistého Aharonovova-Bohmova efektu; ten popisuje idealizovaný případ, ve kterém magnetický tok prochází někonečně úzkým a dlouhým vláknem (viz [R 2]).

Naše situace je tedy následující. Uvažujeme dvourozměrný prostor, tj. rovinu, ve které se pohybuje kvantová částice. Ta je navíc nerelativistická, má elektrický náboj a nemá spin. Na ni působí tři vlivy. První z nich je homogenní magnetické pole; to je kolmé na naši rovinu. Druhým je právě čistý Aharonovův-Bohmův efekt, přičemž tok probíhá přímkou, jež je rovněž vůči rovině kolmá a protíná ji v počátku. Konečně třetí je bodová interakce, rozebraná v kapitole 2.3, umístěná také v počátku.

Podobné situace samozřejmě již dříve neunikly pozornosti. Samostatné působení jednoho každého ze zmíněných tří jevů je dobře probádáno, Také kombinace magnetického pole a bodové interakce je dobře známa. Společným působením Aharonovova-Bohmova efektu a bodové interakce se zabývají práce [DS] a [AT], v nichž jsou nalezeny nejobecnější možné okrajové podmínky.

Otázku, co nastane, vložíme-li tento fyzikální model navíc do homogenního magnetického pole, se určitým způsobem pokusilo zodpovědět několik prací. Články [C], [Th] a [H] se zabývají čistým AB efektem, ovšem (na rozdíl od tohoto textu) pro Pauliho hamiltonián, to jest pro částici se spinem 1/2. Rovněž se nezabývají otázkou zobecněných hraničních podmínek.

Vyřešení tohoto problému je naopak hlavním cílem této části práce. Zde tedy budeme vyšetřovat šestiparametrickou množinu hamiltonových operátorů, jež vzejdou z našeho modelu pomocí metody samosdružených rozšíření. Po jednom parametru přísluší magnetickému poli i toku, zbývající čtyři potom bodové interakci. Tyto samosdružená rozšíření pak popíšeme slibovanými zobecněnými hraničními podmínkami (analogickými těm z článků [DS] a [AT]) a vyšetříme vlastnosti jejich spekter. Uvidíme, že ta se vlivem přidaného magnetické pole změní velmi výrazně - z původního absolutně spojitého spektra se stane spektrum čistě bodové. Dodejme, že na základě výsledků, jež zde popíšeme, vyšel článek [ESV], od nějž se následující kapitoly v mnoha ohledech odlišují jen málo.

3.2 Formulace problému

Principem korespondence je dán předpis pro formální Hamiltonův operátor

$$L = -(\nabla - A(\nabla))^2, \tag{2}$$

zde A značí potenciál. Ten, jak bylo řečeno, je dán součtem dvou částečných případů. Potenciál homogenního magnetického pole je určen vztahem

$$A_{hmp} = -\frac{\imath B}{2}(-x_2 \mathrm{d}x_1 + x_1 \mathrm{d}x_2),$$

přičemž B je parametr magnetické indukce. Bez újmy na obecnosti můžeme uvažovat pouze hodnoty $B > 0$; pro záporná B totiž dojde jen k obrácení směru působení magnetického pole, což je vzhledem k symetrii úlohy nepodstatné. Potenciál Aharonovova-Bohmova efektu je

$$A_{AB} = \frac{\imath \Phi}{2\pi r^2}(-x_2 \mathrm{d}x_1 + x_1 \mathrm{d}x_2), \quad r^2 = (x_1^2 + x_2^2)^2,$$

kde Φ je parametr intenzity toku. Přeškálujeme jej pomocí

$$\alpha = \frac{\Phi}{2\pi}.$$

Vzhledem k symetrii se můžeme (opět bez újmy na obecnosti) omezit na hodnoty $\alpha \in (0, 1)$. Pomocí unitárního zobrazení $U : \psi(r, \theta) \mapsto e^{\imath\theta}\psi(r, \theta)$ a označení $L_\alpha = -(\nabla - A^\alpha_{AB}(\nabla))^2$, které zdůrazňuje závislost na parametru α, se snadno zjistí, že platí vztah $UL_\alpha U^{-1} = L_{\alpha-1}$, resp. $U^{-1}L_\alpha U = L_{\alpha+1}$. To znamená, že změnou parametru α o hodnotu ± 1 dostaneme unitárně ekvivalentní formální Hamiltonův operátor. Hodnota $\alpha = -1$ odpovídá nulovému Aharonovovu-Bohmovu toku. Dosazením celkového potenciálu

$$A = A_{hmp} + A_{AB}$$

do vyjádření (2) dostaneme formální předpis ve tvaru

$$L = -\triangle + 2\left(\frac{\imath B}{2} + \frac{\imath\alpha}{r^2}\right) x_2^2 \partial_1 - 2\left(\frac{\imath B}{2} + \frac{\imath\alpha}{r^2}\right) x_1^2 \partial_2 + \left(\frac{B}{2} + \frac{\alpha}{r^2}\right) r^2.$$

V polárních souřadnicích má potom tento formální operátor tvar

$$L = -\frac{1}{r}\,\partial_r r \partial_r + \frac{1}{r^2}\left(-\imath\partial_\theta + \alpha + \frac{Br^2}{2}\right)^2.$$

Zavedeme nyní symetrický operátor

$$H : \psi \mapsto L\psi, \quad \mathrm{D}(H) = C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\}). \tag{3}$$

Z něj (resp. z jeho uzávěru $\overline{H}$) budeme v dalším postupu vycházet; definiční obor $\overline{H}$ popíšeme explicitně v kapitole 3.4. Protože $H^* = \left(\overline{H}\right)^*$, sdružený operátor k H je

$$H^* : \psi \mapsto L\psi,$$
$$\mathrm{D}(H^*) = \left\{\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^2, \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2) \cap \mathrm{H}^2_{loc}(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\}) \,\middle|\, L\psi \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^2, \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2)\right\}.$$

Dále přejdeme k polárním souřadnicím a využijeme rozkladu Hilbertova prostoru na ortogonální součet vlastních prostorů úhlového momentu,

$$\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^2, \mathrm{d}x^2) = \sum_{m\in\mathbb{Z}}^{\oplus} \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^+, r\mathrm{d}r) \otimes \mathbb{C}e^{im\theta}. \tag{4}$$

Operátor H^* komutuje na $D(H^*)$ s projektory P_m na vlastní podprostory úhlového momentu

$$P_m\psi(r,\theta) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \psi(r,\theta')\, e^{\imath m(\theta-\theta')}\,\mathrm{d}\theta',$$

a proto se dá v souhlasu s (4) rozložit jako

$$H^* = \sum_{m\in\mathbb{Z}}^{\oplus} (H^*)_m. \tag{5}$$

To znamená, že se můžeme zabývat pouze operátory H_m^* a redukovat tak problém na práci v sektorech $\operatorname{Ran} P_m,\ m \in \mathbb{Z}$.

V dalším textu budeme ještě potřebovat informace o řešení určité konkrétní diferenciální rovnice hypergeometrického typu. Uvažujme spektrální parametr $\lambda \in \mathbb{C}$; rovnice $H_m^* g(r) = \lambda g(r)$ má tvar

$$\left(-\frac{1}{r}\,\partial_r r \partial_r + \frac{1}{r^2}\left(m + \alpha + \frac{Br^2}{2} \right)^2 \right) g(r) = \lambda\, g(r). \tag{6}$$

Můžeme zvolit dvě řešení této rovnice, která jsou (až na speciální hodnoty parametru λ) lineárně nezávislá, a to konkrétně

$$\begin{aligned} g_m^1(\lambda; r) &= r^{|m+\alpha|}\, F\left(\beta(m,\lambda), \gamma(m), \frac{Br^2}{2} \right) \exp\left(-\frac{Br^2}{4} \right), \\ g_m^2(\lambda; r) &= r^{|m+\alpha|}\, G\left(\beta(m,\lambda), \gamma(m), \frac{Br^2}{2} \right) \exp\left(-\frac{Br^2}{4} \right), \end{aligned} \tag{7}$$

kde jsme zavedli značení

$$\begin{aligned} \beta(m,\lambda) &= \frac{1}{2}\left(1 + m + \alpha + |m+\alpha| - \frac{\lambda}{B} \right), \\ \gamma(m) &= 1 + |m+\alpha|\,. \end{aligned}$$

Zde se F, resp. G nazývají hypergeometrickou funkcí prvního druhu (či někdy Kummerovou), resp. druhého druhu (Tricomiho) a jsou rovny

$$F(\beta,\gamma,z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta)_n\, z^n}{(\gamma)_n\, n!}\,,$$

kde značíme

$$(a)_0 = 1, \quad (a)_n = a(a-1)...(a-n+1), \quad a \in \mathbb{C}, n \in \mathbb{N},$$

resp.

$$\begin{aligned} G(\beta,\gamma,z) =& \frac{\Gamma(1-\gamma)}{\Gamma(\beta-\gamma+1)}\, F(\beta,\gamma,z) + \\ &+ \frac{\Gamma(\gamma-1)}{\Gamma(\beta)}\, z^{1-\gamma} F(\beta-\gamma+1, 2-\gamma, z). \end{aligned}$$

Je vidět, že $F(\beta,\gamma,z)$ a $G(\beta,\gamma,z)$ jsou lineárně nezávislé právě tehdy, když $\beta \notin -\mathbb{Z}_+$.

Rozebereme ještě chování obou funkcí v počátku a nekonečnu. V okolí nuly je $F(\beta,\gamma,z)$ regulární, naproti tomu funkce $G(\beta,\gamma,z)$ má pro určité hodnoty parametrů γ a β singularitu; platí vztah

$$\lim_{z\to 0_+} z^{\gamma-1} G(\beta,\gamma,z) = \frac{\Gamma(\gamma-1)}{\Gamma(\beta)} \quad \beta \notin \mathbb{Z}_+,\ \gamma > 1 \tag{8}$$

a dále asymptotika při $z \to 0_+$

$$G(\beta,\gamma,z) = \frac{\Gamma(\gamma-1)}{\Gamma(\beta)} z^{1-\gamma} + \frac{\Gamma(1-\gamma)}{\Gamma(\beta-\gamma+1)} + O(z^{2-\gamma}) \quad 1 < \gamma < 2. \tag{9}$$

Věnujme se nyní asymptotickému chování v nekonečnu. Pro $\beta \in -\mathbb{Z}_+$ přechází $F(\beta,\gamma,z)$ v polynom s prvním členem $(\Gamma(\gamma)/\Gamma(\gamma-\beta))(-z)^{-\beta}$, zatímco pro $\beta \notin -\mathbb{Z}_+$ platí, že

$$F(\beta,\gamma,z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\beta)} e^z z^{-\beta-\gamma} \left(1 + O\left(z^{-1}\right)\right), \quad z \to +\infty. \tag{10}$$

Nakonec máme

$$G(\beta,\gamma,z) = z^{-\beta} \left(1 + O\left(z^{-1}\right)\right). \tag{11}$$

3.3 Standardní Aharonovův-Bohmův operátor

Budeme se teď zabývat spektrem jednoho konkrétního samosdruženého rozšíření operátoru H, takzvaného standardního Aharonovova-Bohmova hamiltoniánu. Na ten se v určitém smyslu můžeme dívat jako na případ magnetického pole a idealizovaného toku, ale bez přítomnosti bodové interakce. Tato situace odpovídá volbě nejregulárnější hraniční podmínky tak, jak to bylo popsáno v kapitole 2.3. Jedná se tedy o problém řešení rovnice na vlastní čísla

$$H^* f = \lambda f, \quad f \in \mathrm{D}(H^*)$$

s okrajovou podmínkou

$$\lim_{r\to 0_+} f(r,\theta) = 0. \tag{12}$$

Tato otázka se vzhledem k rozkladu (5) redukuje na spočetnou soustavu rovnic

$$(H^*)_m f = \lambda f, \quad m \in \mathbb{Z}$$

a tedy na diferenciální rovnice (6).

Řešení $g_m^2(\lambda; r)$ je vyloučeno, protože nevyhovuje okrajové podmínce v počátku (12). Naproti tomu $g_m^1(\lambda; r)$ regulární je; integrabilní je však podle (10) a vztahu

$$F(-n, 1+\vartheta, z) = \frac{n!\Gamma(\vartheta+1)}{\Gamma(n+\vartheta+1)} L_n^\vartheta(z), \quad n \in \mathbb{Z}_+\,,$$

pouze když $\beta(m, \lambda) = -n$ pro nějaké $n \in \mathbb{Z}_+$. Přitom L_n^ϑ značí Laguerrovy polynomy. Z tohoto omezení dostáváme spočetnou množinu vlastních čísel operátoru H^{AB} ve tvaru

$$\lambda_{m,n} = B(m + \alpha + |m+\alpha| + 2n + 1), \qquad m \in \mathbb{Z},\, n \in \mathbb{Z}_+$$

a příslušné vlastní funkce

$$f_{m,n}(r, \theta) = C_{m,n} r^{|m+\alpha|} L_n^{|m+\alpha|} \left(\frac{Br^2}{2}\right) e^{-Br^2/4} e^{\imath m\theta},$$

kde

$$C_{m,n} = \left(\frac{B}{2}\right)^{\frac{1}{2}(|m+\alpha|+1)} \left(\frac{n!}{\pi\,\Gamma(n+|m+\alpha|+1)}\right)^{1/2}$$

jsou normalizační konstanty.

Je známo, že pro pevné $m \in \mathbb{Z}$ tvoří funkce $\{f_{m,n}(r,\theta)\}_{n=0}^\infty$ ortonormální bázi $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}_+, r\mathrm{d}r) \otimes \mathbb{C}e^{\imath m\theta}$ a tedy množina vlastních funkcí $\{f_{m,n}(r,\theta)\}_{m\in\mathbb{Z}, n\in\mathbb{Z}_+}$ je v Hilbertově prostoru $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}_+, r\mathrm{d}r) \otimes \mathrm{L}^2([0, 2\pi], \mathrm{d}\theta) = \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^2, \mathrm{d}^2x)$ rovněž ortonormální bází. Protože jsou dále všechny vlastní hodnoty $\lambda_{m,n}$ reálné, máme dobře definován samosdružený operátor, nazývaný obvykle standardní Aharonovův-Bohmův hamiltonián; značíme ho H^{AB}. Můžeme ho formálně zapsat pomocí vztahu

$$H^{AB}\left(\sum \xi_{m,n} f_{m,n}\right) = \sum \lambda_{m,n} \xi_{m,n} f_{m,n},$$

$$D(H^{AB}) = \left\{ \sum \xi_{m,n} f_{m,n} \,\middle|\, \sum |\xi_{m,n}|^2 < +\infty, \sum |\lambda_{m,n}\xi_{m,n}|^2 < +\infty \right\},$$

přičemž všechny sumy probíhají indexovou množinu $m \in \mathbb{Z}$, $n \in \mathbb{Z}_+$. Také vidíme, že spektrum je čistě bodové a lze vyjádřit jako sjednocení dvou disjunktních množin,

$$\begin{aligned}\sigma(H^{AB}) =& \sigma_p(H^{AB}) = \\ =& \{B(2k+1) \,|\, k \in \mathbb{Z}_+\} \cup \{B(2k+2\alpha+1) \,|\, k \in \mathbb{Z}_+\}.\end{aligned}$$

Vlastní hodnoty první podmnožiny spektra jsou přitom přesně rovny Landauovým hladinám . Dále platí, že vlastní čísla tvaru $B(2k+1)$ mají nekonečnou degeneraci, zatímco vlastní hodnoty $B(2k+2\alpha+1)$ jsou degenerované právě $(k+1)$-krát.

3.3.1 Greenova funkce

Pro úplnost dodáme ještě několik málo poznámek ke Greenově funkci hamiltoniánu H^{AB}. Greenova funkce se dá vyjádřit pomocí nekonečné řady

$$G^{AB}(z; r_1, \theta_1, r_2, \theta_2) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} G_m^{AB}(z; r_1, r_2)\, e^{\imath m(\theta_1 - \theta_2)},$$

kde

$$\begin{aligned} G_m^{AB}(z; r_1, r_2) &= 2\left(\frac{B}{2}\right)^{|m+\alpha|+1} (r_1 r_2)^{|m+\alpha|} \exp\left(-\frac{1}{4}\, B({r_1}^2 + {r_2}^2)\right) \times \\ &\times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{\Gamma(n + |m+\alpha| + 1)} \times \\ &\times \frac{L_n^{|m+\alpha|}(\frac{1}{2}B{r_1}^2)\, L_n^{|m+\alpha|}(\frac{1}{2}B{r_2}^2)}{B(m + \alpha + |m+\alpha| + 2n + 1) - z}\,. \end{aligned}$$

Radiální části se dají přepsat pomocí standardní konstrukce Greenových funkcí pro obyčejné diferenciální operátory druhého řádu,

$$\begin{aligned} G_m^{AB}(z; r_1, r_2) &= \left(\frac{B}{2}\right)^{|m+\alpha|+1} (r_1 r_2)^{|m+\alpha|} \exp\left(-\frac{1}{4}\, B({r_1}^2 + {r_2}^2)\right) \times \\ &\times \frac{\Gamma\big(-w(m,z)\big)}{\Gamma(|m+\alpha|+1)}\, F(-w(m,z), |m+\alpha|+1, r_<) \times \\ &\times G(-w(m,z), |m+\alpha|+1, r_>), \end{aligned}$$

přičemž

$$w(m,z) = \frac{z}{2B} - \frac{1}{2}(m + \alpha + |m+\alpha| + 1)$$

a značíme $r_< = \min(r_1, r_2)$, $r_> = \max(r_1, r_2)$. To dává rovnost

$$\begin{aligned} &\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{\Gamma(n+\sigma+1)}\, \frac{L_n^\sigma(y_1)\, L_n^\sigma(y_2)}{n - w} \\ &\qquad = \frac{\Gamma(-w)}{\Gamma(\sigma+1)}\, F(-w, \sigma+1, y_<)\, G(-w, \sigma+1, y_>)\,. \end{aligned}$$

Nelze očekávat, že by se dalo nalézt jednodušší vyjádření Greenovy funkce, uvážíme-li, že systém má pouze rotační symetrii.

3.4 Samosdružená rozšíření

Víme již, že existuje samosdružený operátor H^{AB}, který je jedním z rozšíření hamiltoniánu H. V dalším kroku určíme všechna tato samosdružená rozšíření. K tomu nejprve potřebujeme zodpovědět otázku indexů defektu a defektních prostorů $\mathcal{N}_{\pm\imath}$. Řešíme tedy rovnici

$$H^* f = \pm\imath f, \quad f \in \mathrm{D}(H^*),$$

která opět vede na diferenciální rovnice (6).

Řešení $g^1_m(\pm\imath; r)$ má podle (10) v nekonečnu exponenciální chování a není proto integrabilní. Naopak $g^1_m(\pm\imath; r)$ v tomto ohledu vyhovuje; z (8) ovšem plyne, že v počátku má singularitu řádu $r^{-|m+\alpha|}$. Z toho je snadno vidět, že $g^1_m(\pm\imath; r) \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}_+, r\mathrm{d}r)$ právě tehdy, když $m = -1$ nebo $m = 0$. Indexy defektu jsou tudíž rovny $(2, 2)$ a množina všech samosdružených rozšíření operátoru H tedy bude tvořit čtyřparametrickou grupu. Jako báze ortonormálních prostorů můžeme zvolit funkce

$$f_{m,\pm}(r, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N_m\, g^2_m(\pm\imath; r)\, e^{\imath m\theta}, \quad m = -1, 0.$$

Dostáváme tedy

$$\begin{aligned} f_{-1,\pm}(r, \theta) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N_{-1}\, r^{1-\alpha}\, G\left(\frac{1}{2} \mp \frac{\imath}{2B}, 2-\alpha, \frac{Br^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{Br^2}{4}\right) e^{-\imath\theta}, \\ f_{0,\pm}(r, \theta) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N_0\, r^{\alpha}\, G\left(\frac{1}{2} + \alpha \mp \frac{\imath}{2B}, 1+\alpha, \frac{Br^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{Br^2}{4}\right), \end{aligned}$$

přičemž N_{-1} a N_0 jsou normalizační konstanty.

Každé samosdružené rozšíření operátoru (3) je možno vyjádřit pomocí unitárního operátoru $\dot{U} : \mathcal{N}_{+\imath} \to \mathcal{N}_{-\imath}$. Svážeme-li s $\dot{U}$ unitární matici $U \in \mathbb{R}^{2,2}$ (její prvky jsou právě ony čtyři parametry bodové interakce) pomocí volby ortonormální báze $\{f_{-1,\pm}, f_{0,\pm}\}$, je možno zapsat každé rozšíření H^U jako

$$H^U\psi = H\widetilde{\psi} + \sum_{m=-1,0} c_m \left(\imath f_{k,+} - \imath \sum_{j=-1,0} f_{j,-} U_{j,k}\right)$$

pro nějaká $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$, $\widetilde{\psi} \in \mathrm{D}(H)$, přičemž

$$D(H^U) = \left\{ \psi = \widetilde{\psi} + c_1\psi^1 + c_2\psi^2 \,\middle|\, c_1, c_2 \in \mathbb{C},\ \widetilde{\psi} \in D(H) \right\},$$

kde

$$\psi^m = f_{m,+} + \sum_{j=-1,0} f_{j,-} U_{j,k}, \quad m = -1, 0.$$

To je samozřejmě velmi formální zápis; později najdeme lepší vyjádření.

Nyní určíme hodnoty konstant N_{-1} a N_0 explicitně. Pomocí vtahu

$$W_{\upsilon,\tau}(z) = z^{\tau+1/2}e^{-z/2}G\left(1/2-\upsilon+\tau, 2\tau+1, z\right),$$

kde $W_{\upsilon,\tau}$ je Whittakerova funkce, dostaneme

$$\begin{aligned} N_m^{-2} &= \int_0^\infty \left|g_m^2(\pm\imath;r)\right|^2 r\mathrm{d}r = \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{2}{B}\right)^{|m+\alpha|+1}\int_0^\infty x^{-1}W_{\varrho,\sigma}(x)\,W_{\bar{\varrho},\sigma}(x)\,\mathrm{d}x, \end{aligned}$$

přičemž

$$\varrho = \frac{1}{2}\left(-m-\alpha+\frac{\imath}{B}\right),\ \sigma = \frac{1}{2}\left|m+\alpha\right|.$$

Na výpočet integrálu použijeme vzorce [PBM, 306/2.19.24.6.]

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty x^{-1}W_{\varrho,\sigma}(x)\,W_{\mu,\sigma}(x)\,\mathrm{d}x = \frac{\pi}{\sin(2\pi\sigma)}\times \\ &\quad\times\Bigg(-\frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\sigma-\mu\right)\,\Gamma\left(\frac{3}{2}+\sigma-\varrho\right)}\,{}_2F_1\left(\frac{1}{2}+\sigma-\mu,1;\frac{3}{2}+\sigma-\varrho;1\right)+ \\ &\qquad+\frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\sigma-\mu\right)\,\Gamma\left(\frac{3}{2}-\sigma-\varrho\right)}\,{}_2F_1\left(\frac{1}{2}-\sigma-\mu,1;\frac{3}{2}-\sigma-\varrho;1\right)\Bigg), \end{aligned}$$

kde ${}_2F_1$ je zobecněná hypergeometrická funkce, obecně definovná jako

$${}_pF_q(a_1\dots a_p;b_1\dots b_q;z) = \sum_{s=0}^{+\infty}\frac{(a_1)_k\dots(a_p)_k}{(b_1)_k\dots(b_p)_k}\frac{z^k}{k!}.$$

S využitím

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a,b;c;z) =& \frac{\Gamma(c)\,\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\,\Gamma(c-b)}\,{}_2F_1(a,b;a+b-c+1;1-z)+ \\ &+\frac{\Gamma(c)\,\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\,\Gamma(b)}\,(1-z)^{c-a-b}\times \\ &\times{}_2F_1(c-a,c-b;c-a-b+1;1-z) \end{aligned}$$

dospějeme ke vztahu

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty x^{-1}W_{\varrho,\sigma}(x)\,W_{\mu,\sigma}(x)\,\mathrm{d}x = \frac{\pi}{\sin(2\pi\sigma)(\mu-\varrho)}\times \\ &\quad\times\left(-\frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\mu-\sigma\right)\,\Gamma\left(\frac{1}{2}-\varrho+\sigma\right)}+\frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\mu+\sigma\right)\,\Gamma\left(\frac{1}{2}-\varrho-\sigma\right)}\right). \end{aligned}$$

Konečně pak získáme normalizační konstanty v explicitním tvaru

$$N_{-1} = \left(\frac{B}{2}\right)^{\frac{1}{2}(1-\alpha)} \sqrt{\frac{\sin(\pi\alpha)}{2\pi}} \left(\operatorname{Im} \frac{1}{\Gamma\left(-\frac{1}{2}+\alpha+\frac{\imath}{2B}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{\imath}{2B}\right)}\right)^{-1/2},$$
$$N_0 = \left(\frac{B}{2}\right)^{\frac{1}{2}\alpha} \sqrt{\frac{\sin(\pi\alpha)}{2\pi}} \left(\operatorname{Im} \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\frac{\imath}{2B}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}+\alpha-\frac{\imath}{2B}\right)}\right)^{-1/2}.$$

Dále budeme potřebovat znát asymptotické chování bazických funkcí defektních podprostorů. Z (7) a (9) plyne

$$\begin{aligned} g^1_{-1}(r) &= a_{-1,\pm} r^{-1+\alpha} + b_{-1,\pm} r^{1-\alpha} + \mathrm{O}\left(r^{1+\alpha}\right), \quad r \to 0_+, \\ g^2_0(r) &= a_{0,\pm} r^{-\alpha} + b_{0,\pm} r^{\alpha} + \mathrm{O}\left(r^{2-\alpha}\right), \quad r \to 0_+, \end{aligned} \tag{13}$$

kde je zavedeno značení

$$a_{-1,\pm} = \frac{\Gamma(1-\alpha)}{\Gamma(\frac{1}{2} \mp \frac{\imath}{2B})} \left(\frac{B}{2}\right)^{\alpha-1}, \qquad b_{-1,\pm} = \frac{\Gamma(\alpha-1)}{\Gamma(-\frac{1}{2}+\alpha \mp \frac{\imath}{2B})},$$
$$a_{0,\pm} = \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\frac{1}{2}+\alpha \mp \frac{\imath}{2B})} \left(\frac{B}{2}\right)^{-\alpha}, \qquad b_{0,\pm} = \frac{\Gamma(-\alpha)}{\Gamma(\frac{1}{2} \mp \frac{\imath}{2B})}.$$

Platí také některé vztahy spojující tyto koeficienty s normalizačními konstantami N_m, konkrétně

$$\det M_{-1} = -\frac{\imath}{1-\alpha}(N_{-1})^{-2}, \qquad \det M_0 = -\frac{\imath}{\alpha}(N_0)^{-2}. \tag{14}$$

Zde

$$M_n = \begin{pmatrix} a_{m,+} & b_{m,+} \\ a_{m,-} & b_{m,-} \end{pmatrix}, \quad m = -1, 0.$$

Vztahy (14) pak znamenají, že obě matice M_n jsou regulární. Tuto vlastnost budeme později potřebovat.

Nyní určíme slíbený definiční obor uzávěru operátoru H. Dle rozkladu (5) máme

$$\overline{H} = \sum_{m \in \mathbb{Z}}^{\oplus} \overline{H}_m\,;$$

přitom $\overline{H}_m = (H^*)^*_m$. Je jasné, že $\psi \in \mathrm{D}(H^*)$ patří do $\mathrm{D}(\overline{H})$, právě když

$$(\psi, H^*\varphi) = (H^*\psi, \varphi) \quad \forall \varphi \in D(H^*). \tag{15}$$

Anžto ovšem $\mathrm{D}(H^*) = \mathrm{D}(\overline{H}) + \mathcal{N}_{+\imath} + \mathcal{N}_{-\imath}$ a pro všechna $\varphi \in \mathrm{D}(\overline{H})$ je tato podmínka splněna, stačí zaručit platnost (15) pro $\forall \varphi \in \mathcal{N}_{+\imath} + \mathcal{N}_{-\imath}$. To také znamená, že $\overline{H}_m$ je samosdružený pro $m \notin \{-1, 0\}$. Pro $m \notin \{-1, 0\}$ potom platí, že $\varphi(r)e^{\imath m\theta} \in \mathrm{D}((H^*)_m)$ patří do $\mathrm{D}(\overline{H}_m)$ tehdy a jen tehdy, když

$$\lim_{r \to 0_+} r\, W(\overline{\varphi(r)}, g_m^2(\pm\imath, r)) = 0,$$

kde $W(f, g) = (\partial_r f)g - f\,\partial_r g$ je Wronskián. S použitím asymptotického chování (13) dostaneme nutnou a postačující podmínku pro to, aby funkce $\varphi(r)e^{\imath m\theta}$ náležela do $\mathrm{D}(\overline{H})$, konkrétně

$$\begin{aligned} &\lim_{r\to 0_+} r^{-\alpha}\varphi(r) = 0, &&\lim_{r\to 0_+} r^{1-\alpha}\varphi'(r) = 0 \quad \text{pro} \quad m = 0,\\ &\lim_{r\to 0_+} r^{-1+\alpha}\varphi(r) = 0, &&\lim_{r\to 0_+} r^{\alpha}\varphi'(r) = 0 \qquad \text{pro} \quad m = -1. \end{aligned} \tag{16}$$

To také znamená, že každé $\psi \in \mathrm{D}(H^*)$ se dá napsat jako

$$\psi(r, \theta) = \left(\Phi_1^1(\psi) r^{-1+\alpha} + \Phi_2^1(\psi) r^{1-\alpha}\right) e^{-\imath\theta} + \Phi_1^2(\psi) r^{-\alpha} + \Phi_2^2(\psi) r^{\alpha} \\ + \text{regulární část}.$$

Funkcionály Φ_j^m jsou definovány na $\mathrm{D}(H^*)$ a udávají koeficient u singulárních členů rozvoje funkce ψ v sektorech $m = -1, 0$. Zavádíme je formálně jako

$$\begin{aligned} \Phi_1^{-1}(\psi) &= \lim_{r\to 0} r^{1-\alpha} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(r, \theta) e^{\imath\theta} d\theta,\\ \Phi_2^{-1}(\psi) &= \lim_{r\to 0} r^{-1+\alpha} \left[\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(r, \theta) e^{\imath\theta} d\theta - r^{-1+\alpha}\Phi_1^1(f)\right],\\ \Phi_1^0(\psi) &= \lim_{r\to 0} r^{\alpha} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(r, \theta) d\theta,\\ \Phi_2^0(\psi) &= \lim_{r\to 0} r^{-\alpha} \left[\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(r, \theta) d\theta - r^{-\alpha}\Phi_1^2(f)\right]. \end{aligned}$$

Horní index zde označuje sektor úhlového momentu, zatímco spodní udává řád singularity. Pro $\psi \in \mathrm{D}(\overline{H})$ dle (16) platí, že $\Phi_j^m(\psi) = 0$ pro $m = -1, 0$ a $j = -1, 2$. Pokud naopak pro $\psi \in \mathcal{N}_{+\imath} + \mathcal{N}_{-\imath}$ je $\Phi = 0$ pro všechny indexy $m = -1, 0$, $j = 1, 2$, potom díky regularitě matic M_m je $\psi = 0$.

Nyní aplikujeme funkcionály Φ_j^m na bazické funkce defektních podprostorů. Definujeme čtyři matice z $\mathbb{R}^{2,2}$ jako

$$(\Phi_{j,\pm})_{kl} = \sqrt{2\pi}\,\Phi_j^{k-2}(f_{l-2,\pm}),\ \ j, k, l = 1, 2.$$

Z (13) je snadno vidět, že mají tvar

$$\Phi_{1\pm} = \begin{pmatrix} N_{-1}a_{-1,\pm} & 0 \\ 0 & N_0 a_{0,\pm} \end{pmatrix}, \quad \Phi_{\pm}^2 = \begin{pmatrix} N_{-1}b_{-1,\pm} & 0 \\ 0 & N_0 b_{0,\pm} \end{pmatrix}.$$

Označme ještě

$$\Phi_j(\psi) = \begin{pmatrix} \Phi_j^1(\psi) \\ \Phi_j^2(\psi) \end{pmatrix}, \quad j = 1, 2, \quad \Phi_j \in \mathbb{R}^{4,2}.$$

Dospíváme tedy k další definici samosdružených rozšíření H^U. Podle ní jsou $H^U \subset H^*$ a $\psi \in \mathrm{D}(H^*)$ patří do $\mathrm{D}(H^U)$, právě když

$$\begin{pmatrix} \Phi_1(\psi) \\ \Phi_2(\psi) \end{pmatrix} \in \mathrm{Ran} \begin{pmatrix} \Phi_{1+} + \Phi_{1-}U \\ \Phi_{2+} + \Phi_{2-}U \end{pmatrix}. \tag{17}$$

Ani tato podmínka ovšem není pro praktické účely příliš vhodná. Tento nedostatek odstraníme v kapitole 3.5.

3.5 Okrajové podmínky

V této kapitole najdeme jednoduché okrajové podmínky, které určují samosdružená rozšíření operátoru H. Nejprve označme

$$D = \begin{pmatrix} 1-\alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix}.$$

Tvrzení. *Pro libovolnou dvojici matic X_1, X_2 splňujících požadavky*

$$\mathrm{Rank}(X_1, X_2)^T = 2, \tag{18}$$

$$X_1^* D X_2 = X_2^* D X_1 \tag{19}$$

existují $Y \in \mathbb{C}^{2,2}$ regulární a $U \in \mathbb{C}^{2,2}$ unitární tak, že

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} Y = \begin{pmatrix} \Phi_{1+} & \Phi_{1-} \\ \Phi_{2+} & \Phi_{2-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ U \end{pmatrix}.$$

Důkaz. Začneme tím, že nejprve zavedeme matici J vztahem

$$J = \begin{pmatrix} \Phi_{1,+} & \Phi_{1,-} \\ \Phi_{2,+} & \Phi_{2,-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{-1}a_{-1,+} & 0 & N_{-1}a_{-1,-} & 0 \\ 0 & N_0 a_{0,+} & 0 & N_0 a_{0,-} \\ N_{-1}b_{-1,+} & 0 & N_{-1}b_{-1,-} & 0 \\ 0 & N_0 b_{0,+} & 0 & N_0 b_{0,-} \end{pmatrix}.$$

Vzhledem k platnosti (14) se snadno ověří regularita J a také vztah

$$J^{-1} = \imath \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{2-} & -\Phi_{1-} \\ -\Phi_{2+} & \Phi_{1+} \end{pmatrix}.$$

Můžeme proto zadefinovat nové matice $V_-, V_+ \in \mathbb{R}^{2,2}$ pomocí

$$\begin{pmatrix} V_- \\ V_+ \end{pmatrix} = J^{-1} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}$$

a snadno nahlédneme platnost vztahu $V_\pm = \mp \imath D(\Phi_{2,\pm} X_1 - \Phi_{1,\pm} X_2)$, z něhož plyne, že

$$V_\pm^* V_\pm = \begin{pmatrix} X_1^* & X_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{2,\pm}^* D^2 \Phi_{2,\pm} & -\Phi_{2,\pm}^* D^2 \Phi_{1,\pm} \\ -\Phi_{1,\pm}^* D^2 \Phi_{2,\pm} & \Phi_{1,\pm}^* D^2 \Phi_{1,\pm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}.$$

Navíc $\Phi_{j,\pm}$ a D jsou diagonální a komutují, $\Phi_{j,\pm}^* = \Phi_{j,\mp}$ a také

$$-\Phi_{1,+}\Phi_{2,-} + \Phi_{1,-}\Phi_{2,+} = \imath D^{-1}.$$

Toho se využije při odvození rovnosti

$$V_-^* V_- - V_+^* V_+ = (X_1^*, X_2^*) \begin{pmatrix} 0 & -\imath D \\ \imath D & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} = \imath (X_2^* D X_1 - X_1^* D X_2) = 0.$$

Pomocí předpokladu (19) jsme tedy dospěli k výsledku

$$V_-^* V_- = V_+^* V_+, \tag{20}$$

díky němuž a (18) už je snadné zjistit, že platí

$$\ker V_- = \ker V_+ = \ker \begin{pmatrix} V_- \\ V_+ \end{pmatrix} = \ker \begin{pmatrix} X_- \\ X_+ \end{pmatrix}.$$

Zavedeme matice Y a U jako

$$Y = V_-^{-1}, \qquad U = V_+ V_-^{-1};$$

je zřejmé, že splňují (20) a že U je unitární.

Musíme ještě dokázat, že máme-li unitární matici U a položíme-li

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} I \\ U \end{pmatrix},$$

platí pro takto definované matice z $\mathbb{R}^{2,2}$ právě vztahy (18) a (19). Podmínka (18) plyne z regularity matice J a (19) z rovností

$$X_1^* D X_2 - X_2^* D X_1 = (I U^*)\, J^* \begin{pmatrix} 0 & D \\ -D & 0 \end{pmatrix} J \begin{pmatrix} I \\ U \end{pmatrix}$$

a také

$$J^* \begin{pmatrix} 0 & D \\ -D & 0 \end{pmatrix} J = \imath \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}. \tag{21}$$

Tím je tvrzení dokázáno. □

Z platnosti tohoto tvrzení je zřejmé, že existuje vzájemně jednoznačný vztah mezi dvojicí matic X_1, X_2 s vlastnostmi (18), (19) a samosdruženým operátorem H^U zadaným pro $\psi \in \mathrm{D}(H^*)$ podmínkou

$$\psi \in D(H^U) \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \Phi_1(\psi) \\ \Phi_2(\psi) \end{pmatrix} \in \operatorname{Ran} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}. \tag{22}$$

Přitom dvojice (X_1, X_2) a (X_1', X_2') určují stejné samosdružené rozšíření, právě když existuje regulární matice Y taková, že $(X_1', X_2') = (X_1 Y, X_2 Y)$. Navíc se tímto způsobem dají získat všechna samosdružená rozšíření operátoru H.

Nyní se omezíme jen na samosdružená rozšíření určená maticemi X_1, X_2 takovými, že X_2 je regulární. Tato množina je otevřená a hustá v prostoru všech H^U. Bez újmy na obecnosti můžeme vzít $X_2 = I$ a přeznačit $X_1 = \Lambda$, $\Lambda \in \mathbb{C}^{2,2}$. Potom se (19) dá přepsat jako

$$D\Lambda = \Lambda^* D. \tag{23}$$

Matice splňující tento požadavek mohou být parametrizovány pomocí čtyř reálných parametrů (nebo dvou reálných a jednoho komplexního),

$$\Lambda = \begin{pmatrix} u & \alpha\overline{w} \\ (1-\alpha)w & v \end{pmatrix}, \quad u, v \in \mathbb{R},\ w \in \mathbb{C}.$$

Ty opět de facto odpovídají parametrům bodové interakce. Vztah mezi maticemi Λ a U je potom dán

$$\Lambda = (\Phi_{1+} + \Phi_{1-} U)(\Phi_{2+} + \Phi_{2-} U)^{-1}, \tag{24}$$

pokud má pravá strana smysl.

Samosdružená rozšíření operátoru H se tedy dají charakterizovat i pomocí matice Λ; budeme je značit H^Λ. Vztah (17) se tím podstatně zjednoduší. Platí, že $H^\Lambda \subset H^*$ a $\psi \in \mathrm{D}(H^*)$ náleží do $\mathrm{D}(H^\Lambda)$ tehdy a jen tehdy, když

$$\Phi_1(\psi) = \Lambda\Phi_2(\psi). \tag{25}$$

To je tedy ona slibovaná okrajová podmínka, jednoznačně určující samosdružená rozšíření.

„Nejregulárnější možná" ze všech okrajových podmínek, $\Phi_1(\psi) = 0$, je určena maticí $\Lambda = 0$ a odpovídá standardnímu Aharonovovu-Bohmovu hamiltoniánu H^{AB}. Podle rovnosti (24) je H^{AB} definován unitární maticí

$$U = -\Phi_{1,-}^{-1}\Phi_{1,+} = \mathrm{diag}\left[-\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\frac{\imath}{2B}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{\imath}{2B}\right)}, -\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\alpha+\frac{\imath}{2B}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\alpha-\frac{\imath}{2B}\right)}\right]. \tag{26}$$

3.6 Spektrum

Budeme se nyní zabývat spektrálními vlastnostmi samosdružených rozšíření. Vzhledem k předchozí diskuzi je jasné, že vše podstatné se odehrává v sektorech $m = -1, 0$. Rozložíme tedy Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ na ortogonální součet „stabilní" a „kritické" části,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s \oplus \mathcal{H}_c,$$

kde

$$\mathcal{H}_s = \sum_{m\in\mathbb{Z}\setminus\{-1,0\}}^{\oplus} L^2(\mathbb{R}_+, r\,\mathrm{d}r) \otimes \mathbb{C}\, e^{\imath m\theta}, \quad \mathcal{H}_c = L^2(\mathbb{R}_+, r\,\mathrm{d}r) \otimes (\mathbb{C}\, e^{-\imath\theta} \oplus \mathbb{C}\,1).$$

Stejně tak se rozloží i hamiltonián H^Λ,

$$H^\Lambda = H^\Lambda|_{\mathcal{H}_s} \oplus H^\Lambda|_{\mathcal{H}_c},$$

přičemž ze samosdruženosti operátorů H_m pro $m \neq -1, 0$ je jasné, že na $\mathcal{H}_s$ nezávisí tvar H^Λ na Λ, to jest

$$H^\Lambda|_{\mathcal{H}_s} = H^{AB}|_{\mathcal{H}_s}.$$

Z toho také vyplývá, že

$$\sigma(H^\Lambda) = \sigma(H^{AB}|_{\mathcal{H}_s}) \cup \sigma(H^\Lambda|_{\mathcal{H}_c})$$

a z výsledků kapitoly 3.3 známe tvar

$$\sigma(H^{AB}|_{\mathcal{H}_s}) = \{B(2k+1)\big|k \in \mathbb{Z}_+\} \cup \{B(2k+2\alpha+1)\big|k \in \mathbb{Z}_+\}.$$

Přitom násobnost vlastních čísel tvaru $B(2k+1)$ je nekonečná a násobnost vlastních čísel tvaru $B(2k+2\alpha+1)$ je právě rovna k. Spektrum $H^{AB}|_{\mathcal{H}_c}$ je potom ve tvaru

$$\sigma(H^{AB}|_{\mathcal{H}_c}) = \{B(2k+1)\big|k \in \mathbb{Z}_+\} \cup \{B(2k+2\alpha+1)\big|k \in \mathbb{Z}_+\},$$

kde všechny vlastní hodnoty jsou jednoduché. Přitom první podmnožina spektra je příspěvek ze sektoru $m=-1$ a druhá odpovídá sektoru $m=0$. Vzhledem ke konečnosti indexů defektu z Kreinovy formule (viz [AG]) plyne, že operátor $(H_r^{AB}-\imath)^{-1}-(H_r-\imath)^{-1}$ je kompaktní a můžeme tedy použít Weylovu větu [RS 4, Theorem XIII. 14], která pro všechna Λ dává výsledek

$$\sigma_{ess}(H^{\Lambda}|_{\mathcal{H}_c}) = \emptyset.$$

Spektrum $H|_{\mathcal{H}_c}$ je proto tvořeno vlastními hodnotami s nejvýše konečnou násobností a nemá žádný hromadný bod.

Odvodíme nyní rovnici na vlastní čísla operátoru $H^{\Lambda}|_{\mathcal{H}_c}$. Znamená to pro dané $\lambda \in \mathbb{R}$ nalézt případná řešení rovnice $H_m^*\psi = \lambda\psi$ v sektorech $m=-1,0$ a rozhodnout, zda patří do $\mathrm{D}(H^{\Lambda})$ pro nějaké Λ. Pro každý ze sektorů $m=-1,0$ existuje právě jedno integrabilní řešení, můžeme za něj zvolit $g_m^2(\lambda;r)e^{\imath m\theta}$. Jako druhé lineárně nezávislé řešení lze brát $g_m^1(\lambda;r)e^{\imath m\theta}$, pokud $\beta(m,\lambda) \notin -\mathbb{Z}_+$. V případě $\beta(m,\lambda) \in -\mathbb{Z}_+$ je za lineárně nezávislé druhé řešení možno vzít

$$r^{|m+\alpha|}\,H\left(\beta(m,\lambda),\gamma(m),\frac{Br^2}{2}\right)\,\exp\left(-\frac{Br^2}{4}\right),$$

kde

$$H(\beta,\gamma,z) = z^{1-\gamma}F(\beta-\gamma+1,2-\gamma,z).$$

Obě tato druhá řešení ovšem nejsou L^2-integrabilní. Zbývá otázka okrajových podmínek. Vidíme, že $\lambda \in \mathbb{R}$ je vlastním číslem $H^{\Lambda}|_{\mathcal{H}_c}$, právě když existuje nenulový vektor $(\mu,\nu) \in \mathbb{C}^2$ tak, že funkce

$$\psi_\lambda(r,\theta) = \mu\, g_{-1}^2(\lambda;r)\,e^{-\imath\theta} + \nu\, g_0^2(\lambda;r)$$

splňuje okrajovou podmínku (25). Buďte

$$a_{-1} = \frac{\Gamma(1-\alpha)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{2B}\right)}\left(\frac{B}{2}\right)^{-1+\alpha}, \qquad b_{-1} = \frac{\Gamma(-1+\alpha)}{\Gamma\left(-\frac{1}{2}+\alpha-\frac{\lambda}{2B}\right)},$$

$$a_0 = \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\alpha-\frac{\lambda}{2B}\right)}\left(\frac{B}{2}\right)^{-\alpha}, \qquad b_0 = \frac{\Gamma(-\alpha)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{2B}\right)};$$

potom ze vztahů (7) a (9) lze získat asymptotiku ψ_Λ,

$$\Phi_1(\psi_\lambda) = \begin{pmatrix} a_{-1} & 0 \\ 0 & a_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \nu \end{pmatrix}, \qquad \Phi_2(\psi_\lambda) = \begin{pmatrix} b_{-1} & 0 \\ 0 & b_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \nu \end{pmatrix}.$$

Potom se tedy (25) dá vyjádřit jako požadavek $\det A = 0$, kde

$$A = \begin{pmatrix} a_{-1} & 0 \\ 0 & a_0 \end{pmatrix} - \Lambda \begin{pmatrix} b_{-1} & 0 \\ 0 & b_0 \end{pmatrix}.$$

Přepisem a substitucí

$$z = \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2B} \quad \Leftrightarrow \quad \lambda = B(1-2z)$$

dostaneme rovnici

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\alpha-1)}{\Gamma(z)\Gamma(z+\alpha)}\frac{2}{B} - \frac{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(-\alpha)}{\Gamma^2(z)}\left(\frac{2}{B}\right)^{1-\alpha} v - \\ - \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\alpha-1)}{\Gamma(z+\alpha-1)\Gamma(z+\alpha)}\left(\frac{2}{B}\right)^{\alpha} u + \\ + \frac{\Gamma(\alpha-1)\Gamma(-\alpha)}{\Gamma(z)\Gamma(z+\alpha-1)}(\alpha(\alpha-1)|w|^2 + uv) \quad &= \quad 0. \end{aligned}$$

Tu ještě trochu zjednodušíme zavedením reálných parametrů

$$\xi = \left(\frac{B}{2}\right)^{1-\alpha} \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(2-\alpha)} u, \quad \eta = \left(\frac{B}{2}\right)^{\alpha} \frac{\Gamma(1-\alpha)}{\Gamma(1+\alpha)} v, \quad \zeta = \sqrt{\frac{B}{2}}\,|w|. \tag{27}$$

Dostáváme se tedy ke zmiňované rovnici na vlastní čísla, jež nabývá vskutku obludné podoby, a sice

$$\frac{1}{\Gamma(z)\,\Gamma(z+\alpha)} + \frac{\xi}{\Gamma(z+\alpha-1)\,\Gamma(z+\alpha)} + \frac{\eta}{\Gamma(z)^2} + \frac{\xi\,\eta - \zeta^2}{\Gamma(z)\,\Gamma(z+\alpha-1)} = 0. \tag{28}$$

Tuto rovnici samozřejmě nelze řešit explicitně. Lze ji obecně analyzovat (viz podkapitola 3.6.1) či zabývat se některými speciálními případy. To učiníme nyní.

Prvním význačným případem je samozřejmě standardní Aharonovův-Bohmův hamiltonián H^{AB}. Ten je dle (27) určen hodnotami parametrů $\xi = \eta = \zeta = 0$ a kořeny rovnice (28) tvoří množinu $-\mathbb{Z}_+ \cup (-\alpha - \mathbb{Z}_+)$.

Další taková speciální situace nastane pro $\xi = \eta = 0$ a $\zeta \neq 0$. Potom jsou kořeny rovnice ve tvaru $-\mathbb{Z}_+ \cup (-\alpha - \mathbb{Z}_+)$ a navíc přibude jedno záporné řešení, konkrétně $1 - \alpha + \zeta^{-2}$. To roste nade všechny meze při $\zeta \to 0$.

Poslední explicitně řešitelný případ dostaneme pro $\zeta \to +\infty$. Okrajová podmínka má v limitě tvar

$$\Phi_2(\psi) = 0; \tag{29}$$

příslušné samosdružené rozšíření značíme H^∞. Je to zároveň jedno z těch, které jsme nebrali v potaz, když jsme se omezili jen na podmnožinu všech samosdružených rozšíření. Zde rovnice (28) přechází na

$$\frac{1}{\Gamma(z)\,\Gamma(z+\alpha-1)} = 0 \tag{30}$$

a řešení tvoří množinu $-\mathbb{Z}_+ \cup (1-\alpha-\mathbb{Z}_+)$.

Nakonec zmíníme případ, kdy $\zeta = 0$. Ten sice není explicitně řešitelný, ale (28) se u něj dá také poněkud zjednodušit. Je vidět, že při této volbě je matice Λ diagonální, což odpovídá tomu, že mezi sektory $m = -1, 0$ není žádná vazba. Tím pádem se i (28) rozpadá na dvě nezávislé rovnice

$$\frac{1}{\Gamma(z)} + \frac{\xi}{\Gamma(z+\alpha-1)} = 0, \qquad \frac{1}{\Gamma(z+\alpha)} + \frac{\eta}{\Gamma(z)} = 0. \tag{31}$$

Zabývejme se teď první z těchto rovnic. Pro každé $m \in \mathbb{Z}$ existuje analytická funkce $z_m^1(\xi)$ definovaná a řešící pro všechna ξ první z rovnic (31) a navíc taková, že $z_m^1(0) = -m$. Lze o ní dokázat, že ostře roste na celém $\mathbb{R}$ a je možno nalézt limity

$$\lim_{\xi\to+\infty} z_m^1(\xi) = -m + 1 - \alpha, \qquad \lim_{\xi\to-\infty} z_m^1(\xi) = -m - \alpha.$$

Analogická tvrzení platí i u druhé rovnice v (31).

3.6.1 Analýza rovnice na vlastní čísla

V této kapitole doplníme výsledky dosavadní o zevrubnou analýzu rovnice na vlastní čísla.

Nejprve krátce probereme závislost kořenů rovnice (28) na parametrech ξ, η, ζ. Protože derivace levé strany (28) vzhledem k z pro hodnoty parametrů $(\xi, \eta, \zeta) = (0, 0, 0)$ je rovna

$$\frac{(-1)^m m!}{\Gamma(-m+\alpha)} \neq 0 \quad \text{pro } z = -m, \qquad \frac{(-1)^m m!}{\Gamma(-m-\alpha)} \neq 0 \quad \text{pro } z = -m-\alpha,$$

kde $m \in \mathbb{Z}_+$, z věty o implicitní funkci dostaneme, že kořeny jsou alespoň na nějakém okolí počátku (obecně závislém na kořeni) analytickou funkcí

ξ, η, ζ. Označme $z_{1,m}(\xi,\eta,\zeta)$ a $z_{2,m}(\xi,\eta,\zeta)$ kořeny (28) jako analytické funkce v ξ,η,ζ takové, že $z_{1,m}(0,0,0) = -m$ a $z_{2,m}(0,0,0) = -\alpha - m$, kde $m \in \mathbb{Z}_+$. Snadno se pak získá vyjádření mocninnou řadou; uvádíme členy až do řádu 4. Zadefinujme nejprve

$$\begin{aligned}
h_m^0(z) &= \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{j} - \gamma - \psi(z), \\
h_m^1(z) &= \frac{\pi^2}{6} + \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{j^2} - \psi'(z), \\
h_m^2(z) &= -2\,\boldsymbol{\zeta}(3) + 2\sum_{j=1}^{m} \frac{1}{j^3} - \psi''(z),
\end{aligned}$$

kde γ je Eulerova konstanta a $\psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$ je logaritmická derivace gama funkce a $\boldsymbol{\zeta}$ je zeta funkce. Potom jsou zmiňované řady tvaru

$$\begin{aligned}
z_{1,m}(\xi,\eta,\zeta) &= -m + \frac{(-1)^{m+1}}{m!\,\Gamma(-1-m+\alpha)}\,\xi + \frac{h_m^0(-1-m+\alpha)}{(m!)^2\,\Gamma(-1-m+\alpha)^2}\,\xi^2 + \\
&+ \frac{(-1)^{m+1}\left[3\,h_m^0(-1-m+\alpha)^2 + h_m^1(-1-m+\alpha)\right]}{2\,(m!)^3\,\Gamma\left(-1-m+\alpha\right)^3}\,\xi^3 + \\
&+ \frac{(-1)^m\,(1+m-\alpha)}{m!\,\Gamma(-1-m+\alpha)}\,\xi\,\zeta^2 + \\
&+ \frac{1}{6\,(m!)^4\,\Gamma(-1-m+\alpha)^4}\Big[4\,h_m^0(-1-m+\alpha)\times \qquad (32)\\
&\times\left[4\,h_m^0(-1-m+\alpha)^2 + 3\,h_m^2(-1-m+\alpha)\right] + \\
&+ h_m^2(-1-m+\alpha)\Big]\,\xi^4 + \\
&+ \frac{3 - 2\,(1+m-\alpha)\,h_m^0(-m+\alpha)}{(m!)^2\,\Gamma(-1-m+\alpha)^2}\,\xi^2\zeta^2 + \cdots,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
z_{2,m}(\xi,\eta,\zeta) &= -\alpha - m + \frac{(-1)^{m+1}}{m!\,\Gamma(-m-\alpha)}\,\eta + \frac{h_m^0(-m-\alpha)}{(m!)^2\,\Gamma(-m-\alpha)^2}\,\eta^2 + \\
&+ \frac{(-1)^{m+1}\,(3\,h_m^0(-m-\alpha)^2 + h_m^1(-m-\alpha))}{2\,(m!)^3\,\Gamma\left(-m-\alpha\right)^3}\,\eta^3 + \\
&+ \frac{(-1)^m\,(m+1)}{m!\,\Gamma(-m-\alpha)}\,\eta\,\zeta^2 + \\
&+ \frac{1}{6\,(m!)^4\,\Gamma(-m-\alpha)^4}\Big[4\,h_m^0(-m-\alpha)\times \qquad (33)\\
&\times\left[4\,h_m^0(-m-\alpha)^2 + 3\,h_m^2(-m-\alpha)\right] +
\end{aligned}$$

Tabulka 1: Počty kořenů

interval $(1-\alpha, +\infty)$			
podmínky			p. k.
$\xi \geq 0$	$\eta \geq 0$	$\zeta^2 > \xi\eta$	1
$\xi \geq 0$	$\eta \geq 0$	$\zeta^2 \leq \xi\eta$	0
$\xi \geq 0$	$-\Gamma(1-\alpha) < \eta < 0$	—	1
$\xi \geq 0$	$\eta \leq -\Gamma(1-\alpha)$	—	0
$\xi < 0$	$\eta \geq 0$	—	1
$\xi < 0$	$-\Gamma(1-\alpha) < \eta < 0$	$\zeta^2 \geq \xi\eta$	1
$\xi < 0$	$-\Gamma(1-\alpha) < \eta < 0$	$\zeta^2 < \xi\eta$	2
$\xi < 0$	$\eta \leq -\Gamma(1-\alpha)$	$\zeta^2 \geq \xi\eta$	0
$\xi < 0$	$\eta \leq -\Gamma(1-\alpha)$	$\zeta^2 < \xi\eta$	1

$$\left. + \, h_m^2(-m-\alpha)\right] \eta^4 + \\ + \frac{1 - 2\,(m+1)\,h_m^0(-m-\alpha)}{(m!)^2\,\Gamma(-m-\alpha)^2}\,\eta^2\zeta^2 + \cdots .$$

Podobně můžeme analyzovat asymptotické chování kořenů pro velké hodnoty parametrů ξ, η, ζ. Abychom to mohli udělat, předpokládejme $\xi\eta - \zeta^2 \neq 0$ a položme

$$\xi' = \frac{\xi}{\xi\eta - \zeta^2}, \quad \eta' = \frac{\eta}{\xi\eta - \zeta^2}, \quad \zeta' = \frac{\zeta}{\xi\eta - \zeta^2}.$$

Je vidět, že $\xi'\eta' - \zeta'^2 = (\xi\eta - \zeta^2)^{-1}$. Rovnice (28) přechází na

$$\frac{\xi'\eta' - \zeta'^2}{\Gamma(z)\,\Gamma(z+\alpha)} + \frac{\xi'}{\Gamma(z+\alpha-1)\,\Gamma(z+\alpha)} + \frac{\eta'}{\Gamma(z)^2} + \frac{1}{\Gamma(z)\,\Gamma(z+\alpha-1)} = 0. \tag{34}$$

Kořeny rovnice (34) jsou alespoň na nějakém okolí počátku analytickou funkcí v proměnných ξ', η', ζ'. Znova by se daly spočíst první členy mocninného rozvoje a odvodit formule podobné (32) a (33), ale to zde neučiníme.

Pravděpodobně nejúplnější obecná informace, kterou jsme pro rovnici (28) schopni získat, je lokalizace kořenů při nějakém vhodném rozdělení reálné osy do intervalů. Zvolme toto rozdělení tak, aby hraniční body intervalů byly právě kořeny rovnice (30). Předpokládajíc $z \neq -\mathbb{Z}_+ \cup (1-\alpha-\mathbb{Z}_+)$, přepíšeme rovnici (28) do ekvivalentního tvaru

$$\left(\frac{\Gamma(z-1+\alpha)}{\Gamma(z)} + \xi\right)\left(\frac{\Gamma(z)}{\Gamma(z+\alpha)} + \eta\right) = \zeta^2. \tag{35}$$

Tabulka 2: Počty kořenů

interval $(0, 1-\alpha)$		
podmínky		počet kořenů
$\xi \leq 0$	$\eta \geq -\Gamma(1-\alpha)$	0
$\xi \leq 0$	$\eta < -\Gamma(1-\alpha)$	1
$\xi > 0$	$\eta \geq -\Gamma(1-\alpha)$	1
$\xi > 0$	$\eta < -\Gamma(1-\alpha)$	2

Položíme-li navíc

$$F_\alpha(z) = \frac{\Gamma(z-1+\alpha)}{\Gamma(z)},$$

můžeme rovnici (35) ještě upravit na tvar

$$\left(F_\alpha(z) + \xi\right)\left(F_{1-\alpha}(z+\alpha) + \eta\right) = \zeta^2. \tag{36}$$

Je snadné ověřit některé vlastnosti funkce $F_\alpha(z)$. Předně platí

$$F_\alpha{}'(z) = F_\alpha(z)\left(\psi(z-1+\alpha) - \psi(z)\right).$$

Dále potom

$$F_\alpha(z) \begin{cases} > 0, & z \in (1-\alpha, +\infty) \bigcup \left(\bigcup\limits_{m \in \mathbb{Z}_+} (-\alpha - m, -m) \right) =: I_1 \\ < 0, & z \in \bigcup\limits_{m \in \mathbb{Z}_+} (-m, 1-\alpha-m) =: I_2\ ; \end{cases}$$

každopádně $F_\alpha{}'(z) < 0\ \forall z \in \mathbb{R}$. Pro $z \in I_1$ to vyplývá z toho, že $\psi(z)$ je ostře rostoucí na každém z intervalů $(0, +\infty)$ a $(-m-1, -m)$, kde $m \in \mathbb{Z}_+$. Pro $z \in I_2$ je to důsledek vztahu

$$\begin{aligned} \psi(z-1+\alpha) - \psi(z) = & \frac{\pi \sin(\pi\alpha)}{\sin(\pi z)\sin(\pi(z+\alpha))} + \\ & + \int_0^\infty \frac{e^{-(1-z)t}\left(1 - e^{-(1-\alpha)t}\right)}{1 - e^{-t}}\, \mathrm{d}t. \end{aligned}$$

Tabulka 3: Počty kořenů

intervaly $(-\alpha - m, -m)$, $m \in \mathbb{Z}_+$		
podmínky		počet kořenů
$\xi \geq 0$	$\eta \leq 0$	0
$\xi \geq 0$	$\eta > 0$	1
$\xi < 0$	$\eta \leq 0$	1
$\xi < 0$	$\eta > 0$	2

Tabulka 4: Počty kořenů

intervaly $(-1-m, -\alpha-m)$, $m \in \mathbb{Z}_+$		
podmínky		počet kořenů
$\xi \leq 0$	$\eta \geq 0$	0
$\xi \leq 0$	$\eta < 0$	1
$\xi > 0$	$\eta \geq 0$	1
$\xi > 0$	$\eta < 0$	2

Navíc

$$\lim_{z \to +\infty} F_\alpha(z) = 0, \qquad \lim_{z \to (1-\alpha-m)\pm} F_\alpha(z) = \pm\infty, \quad F_\alpha(-m) = 0 \qquad \forall m \in \mathbb{Z}_+.$$

Máme také

$$F_{1-\alpha}(z) \begin{cases} > 0, & z \in (0, +\infty) \bigcup \left(\bigcup_{m \in \mathbb{Z}_+} (-1-m, -m) \right) \\ < 0, & \beta \in \bigcup_{m \in \mathbb{Z}_+} (-\alpha - m, m); \end{cases}$$

v každém případě $F_{1-\alpha}{}'(z+\alpha) < 0\ \forall z \in \mathbb{R}$ a dále

$$\begin{aligned} &\lim_{z \to +\infty} F_{1-\alpha}(z+\alpha) = 0, && F_{1-\alpha}(-\alpha - m) = 0, \\ &\lim_{z \to -m\pm} F_{1-\alpha}(z+\alpha) = \pm\infty && \forall m \in \mathbb{Z}_+. \end{aligned}$$

Se znalostí těchto vlastností funkce $F_\alpha(z)$ je už nyní snadné zjistit počet kořenů rovnice (36) v každém z intervalů $(1-\alpha, +\infty)$, $(-m, 1-\alpha-m)$ a $(-\alpha-m, -m)$, kde $m \in \mathbb{Z}_+$. Výsledky shrnují tabulky 1-4.

Pro úplnost dodejme, že $1-\alpha$ je kořen (28), právě když $\eta = -\Gamma(1-\alpha)$, zatímco pro $m \in \mathbb{Z}_+$ je $-m$ kořen tehdy a jen tehdy, pokud $\xi = 0$. Konečně $-\alpha - m$, kde $m \in \mathbb{Z}_+$ je kořenem, právě když $\eta = 0$.

Poznamenejme, že tato lokalizace je ve shodě s následujícím obecným tvrzením: *Nechť A a B jsou dvě samosdružená rozšíření téhož symetrického operátoru s konečnými indexy defektu rovnými (d,d). Potom každý interval $J \subset \mathbb{R}$, který neprotíná spektrum A, obsahuje nejvýše d vlastních čísel operátoru B (včetně násobností) a žádnou jinou část spektra B* [W 1, §8.3]. Nechť tedy v našem případě J je otevřený interval, jehož hraniční body jsou buď dvě po sobě jdoucí vlastní hodnoty H^∞ nebo nejnižší vlastní hodnota H^∞ a $-\infty$; potom libovolné samosdružené rozšíření H^Λ má v J nejvýše dvě vlastní hodnoty.

3.7 Závěr

Je vidět, že získané výsledky jsou ucelené a podstatné (o tom koneckonců svědčí i existence časopiseckého článku). Je nicméně pravda, že zde již nejsou diskutovány další otázky a možná rozšíření našeho modelu, které se po zpracování těchto výsledků nabízejí (a z nichž alespoň některé skutečně byly v plánu). Jmenujme například situaci dvou a více (obecně konečně mnoha) či dokonce nekonečného počtu bodových interakcí. Je také možné omezit se jen na část našeho prostoru, například na polorovinu. V neposlední řadě zmiňme široké možnosti při řešení problému rozptylu. Všechny tyto otázky zůstávají otevřené pro případné další práce v tomto oboru.

4 Molekula H_2^+ ve velmi silném magnetickém poli

4.1 Úvod

Počátky podrobnějšího a systematičtějšího zkoumání hmoty ve velmi silných magnetických polích se datují do první poloviny šedesátých let dvacátého století. Od té doby bylo publikováno značné množství prací, roztroušených v oblastech astrofyziky, molekulární fyziky a fyziky pevných látek, zabývajících se tímto tématem.

Příčina zájmu o tuto oblast leží mimo jiné v astrofyzice. Již na začátku sedmdesátých let bylo zjištěno, že extrémně silná magnetická pole se nacházejí v některých astronomických objektech, typické je to například na povrchu neutronových hvězd (viz [R 1]). Potvrzena byla jejich existence na pulsarech a (v o něco slabší intenzitě) i v několika desítkách bílých trpaslíků. Tento jev se dá napodobit i v laboratorních podmínkách při použití polovodičů.

Řekněme nejprve, kde leží hranice intenzity, za kterou se již mluví o velmi silných (též ultrasilných či supersilných) polích. Tato mez je dána silou magnetického pole zvící

$$B_0 = \frac{m_e^2 e^3 c}{\hbar^3} = 2,35 \times 10^9 \text{ G};$$

v supersilném režimu se nachází systém, pro nějž $B \gg B_0$. Při studiu těchto problémů se ovšem nejčastěji používají atomické jednotky, u nichž se definuje síla magnetického pole bezrozměrným parametrem $b = B/B_0$. Podmínka velmi silného pole potom zní $b \gg 1$.

Zmiňme krátce i způsob, jakým se k hodnotě B_0 dojde. Je známo, že elektron se v homogenním magnetickém poli o síle B pohybuje po kruhové dráze s poloměrem

$$\rho = \left(\frac{\hbar c}{eB}\right)^{1/2} = 2,5656 \times 10^{-10} B_{12}^{-1/2} \text{ cm}$$

a nejnižší energie (a také rozdíl Landauových hladin) činí

$$\hbar\omega_{ce} = \hbar\frac{eB}{m_e c} \doteq 12 B_{12} \text{ keV},$$

kde $B_{12} = B/10^{12}$ G. Odtud B_0 snadno získáme položením $\hbar\omega_{ce} = e^2/a_0$ či ekvivalentně $\rho = a_0$; zde a_0 je Bohrův poloměr (radius).

Pro velmi silné pole, tedy pro $b \gg 1$, je cyklotronová energie elektronu $\hbar\omega_{ce}$ mnohem větší než Coulombova energie, která jinak svým působením v molekulách dominuje. Pro tyto případy dochází k dramatickým změnám chování hmoty. Magnetická síla už není pouhou poruchou, způsobující například Zeemanův jev (štěpení hladin energie), ale je naopak příčinou, že se elektron stabilizuje na nejnižší Landauově hladině a roli poruchy přebírají síly mezi čásicemi. Coulombova síla potom spolu s omezením $\rho \ll a_0$ způsobuje, že se elektron pohybuje jen ve velice úzké oblasti podél směru působení magnetického pole. Atomy a molekuly tak dostávají tenký válcový tvar. Díky tomu například u našeho systému dojde k redukci problému z původního trojrozměrného prostoru do jedné dimenze.

Opět není účelem kapitoly ani v možnostech autora podávat detailnější informace, odkazujeme proto na souhrnnou literaturu, kde se dají najít další podněty. Jedná se o [SS], [GHRW], [CKS] a také [L], jehož značení jsme se drželi.

My se zde budeme zabývat molekulou H_2^+, to jest dvěma protony a elektronem, v působení silného magnetického pole v $\mathbb{R}^3$. Právě přítomnost pole způsobuje, že se jinak nestabilní molekula nerozpadne. Zajímat nás bude základní stav, jeho energie a poloměr molekuly; tyto dvě hodnoty se pokusíme přibližně spočítat.

Tato problematika byla již v minulosti zkoumána pomocí variačních a numerických metod, odlišných nicméně od té, již zde použijeme my. Zmiňme práce [LSS], [GZ-J], [BFMM], [HRW] a [W 2].

4.2 Molekula H_2^+; základní definice a vztahy

Následující postup, který popíšeme v kapitolách 4.2 a 4.3, je převzat z práce [BBDPO]. Uvažujeme takzvanou Born-Oppenheimerovu aproximaci (viz například [CKS], [CMS]). Protony mají jednotkový náboj $Z = 1$, nekonečnou hmotnost a jsou umístěny na ose z symetricky vzhledem k počátku a ve vzdálenosti $R > 0$ od sebe navzájem. Magnetické pole působí rovněž ve směru osy z.

Takovýto systém je popsán Pauliho operátorem definovaným v prostoru $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$ pomocí

$$H = \frac{1}{2m_e}\left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - eV + \frac{e^2}{R} + H_{spin},$$

kde $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ je hybnost elektronu, V značí Coulombův potenciál $V(\vec{r}) = e\left(|\vec{r} - R/2|^{-1} + |\vec{r} + R/2|^{-1}\right)$ a zavádíme

$$H_{spin} = -\frac{e}{m_e c}\vec{S}\cdot\vec{B}, \quad \vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r}\times\vec{B}, \quad \vec{B} = B\vec{z}, \quad \vec{z} = (0,0,1), \quad B > 0.$$

Zde $\vec{S} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ jsou Pauliho matice. V atomických jednotkách se H potom dá přepsat jako

$$H = -\frac{1}{2}\nabla_z^2 + H_{osc}(B) + \frac{B}{2}L_z - BS_z - V + \frac{1}{R},$$

kde $L_z = \imath x\partial_y - \imath y\partial_x$ je moment hybnosti vzhledem k ose z a značíme

$$H_{osc}(B) = -\frac{1}{2}\left(\nabla_x + \nabla_y\right)^2 + \frac{B^2}{8}\left(x^2 + y^2\right).$$

V cylindrických souřadnicích ($x = \rho\cos\varphi$, $y = \rho\sin\varphi$ a $z = z$) navíc máme

$$V(z,\rho) = \frac{1}{\sqrt{\left(z - \frac{R}{2}\right)^2 + \rho^2}} + \frac{1}{\sqrt{\left(z + \frac{R}{2}\right)^2 + \rho^2}}.$$

Využijeme nyní komutačních relací $[H, L_z] = [H, S_z] = [S_z, L_z] = 0$ a také rozkladů operátorů L_z, S_z a H_{osc} na ortogonální součet projektorů na vlastní podprostory. V souladu s [AHS] vezmeme pouze tu část operátoru H, která přísluší volbě vlastních čísel $m = 0$, $s_z = -1/2$ a nejnižšího vlastního čísla H_{osc}; tento hamiltonián budeme značit h_z. Tím jsme problém z původního Hilbertova prostoru $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^2, \mathrm{d}x^3) \otimes \mathbb{C}^2$ zredukovali do prostoru $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}, \mathrm{d}z)$, kde h_z působí. Definujme U_L jako unitární operátor realizující škálování $z \mapsto z/L$ pro nějaké L a nový hamiltonův operátor pomocí $h_L = 1/L^2 U_L h_z U_L^{-1}$. V našem případě budeme používat speciálně

$$L = 2W\left(\frac{\sqrt{B}}{2}\right),$$

kde W je Lambertova funkce. Zavádíme tedy vlastně nový parametr popisující sílu pole a ekvivalentní s původními b a B. Hamiltonián h_L je dán vztahem

$$h_L = -\frac{1}{2}\Delta_z - V_L, \qquad V_L = V_L^+ + V_L^-,$$

kde je

$$V_L^{\pm}(z) = \int_0^\infty \frac{e^{-u}}{\sqrt{\frac{1}{L^2}\left(z \pm \frac{R}{2}\right)^2 + \frac{2u}{B}}}\,\mathrm{d}u.$$

Tento operátor stále ještě popisuje náš model přesně.

Přejdeme teď k modelu přibližnému. Zavedeme nový hamiltonián předpisem

$$h_\delta = -\frac{1}{2}\Delta_z - \delta\left(z+a\right) - \delta\left(z-a\right),$$

kde $a = RL/2$.

To ovšem není operátor přesně toho tvaru, o kterém jsme mluvili v kapitole 2.3, tedy zadaný předpisem (1). Abychom dostali hamiltonián v této podobě a mohli tak použít výsledků [AGHH], pokládáme $\dot{h}_\delta = 2h_\delta$, tedy $\dot{h}_\delta = -\Delta_z - 2\delta(z+a) - 2\delta(z-a)$. Zde se už jedná o speciální případ operátoru se dvěma bodovými interakcemi v jedné dimenzi; těmi se podrobně zabývá kapitola II.2 v [AGHH]. Podle tam použitého značení máme $\alpha = \alpha_1 = \alpha_2 = -2$ parametr δ-interakcí, které jsou umístěny v bodech $y_1 = -a$ a $y_2 = a$. Zavádí se také $Y = \{y_1, y_2\}$. Definiční obor $\dot{h}_\delta$ je dán následovně: funkce $g \in \mathrm{H}^{2,1}(\mathbb{R}) \cap \mathrm{H}^{2,2}(\mathbb{R})$ patří do $\mathrm{D}(\dot{h}_\delta)$, právě když splňuje okrajovou podmínku v počátku ve tvaru

$$g'(y_j+) - g'(y_j-) = -2g(y_j), \quad j = 1, 2. \tag{37}$$

Symboly y_j+, y_j- značí limity zprava a zleva v těchto bodech. Takto definovaný operátor je samosdružený.

V [BBDPO] je dokázáno, že h_δ konverguje k h_L ve smyslu normy rezolventy pro $B \to \infty$. Označíme-li navíc e_0 jako nejnižší vlastní číslo operátoru h_δ, energie základního stavu h_L se asymptoticky blíží k e_0 ve stejné limitě. Nevyznačujeme zde explicitně závislost na B a R, ačkoliv je jasné, že tyto parametry určují celý systém.

4.3 Poruchová řada

Vzhledem k tomu, co bylo řečeno v závěru minulé kapitoly, se můžeme na h_L dívat jako na určitou perturbaci h_δ. Lze zapsat

$$h_L = h_\delta + \Delta V,$$

kde

$$\Delta V = \delta(\cdot - a) + \delta(\cdot + a) - \frac{1}{L^2}V_L$$

značí poruchu. Takový přístup má jednu zásadní výhodu: model s hamiltoniánem h_δ je totiž řešitelný.

Podrobné informace o poruchové teorii se dají nalézt kupříkladu v [K]. Platí, že hodnotu vlastní energie e_L operátoru h_L můžeme aproximovat pomocí jednoduššího limitního modelu h_δ, konkrétně řadou

$$e_L = e_0 + \sum_{i=1}^{\infty} e_i;$$

přitom e_0 je již zmiňovaná energie základního stavu h_δ a vzorce pro výpočet členů e_i jsou známy. V našem případě budeme uvažovat jen první dva členy rozvoje, výpočet dalších by už byl tak zatížen numerickými chybami, že by nepředstavoval žádný přínos. Platí

$$e_1 = (\Delta V \psi_0, \psi_0)\,, \qquad e_2 = -(\Delta V S(e_0) \Delta V \psi_0, \psi_0), \tag{38}$$

kde ψ_0 je vlastní funkce příslušná vlastnímu číslu e_0 a $S(e_0)$ je redukovaná Greenova funkce operátoru h_δ v bodě e_0. Pro další počítání tedy budeme potřebovat nalézt e_0, ψ_0 a $S(e_0)$. To bude obsahem další kapitoly.

4.4 Redukovaná Greenova funkce; základní stav

K výpočtu nejnižšího vlastního čísla, příslušné vlastní funkce a redukované Greenovy funkce operátoru h_δ použijeme hamiltonián $\dot{h}_\delta$. Pomocí něj tvar e_0, ψ_0 a $S(e_0)$ snadno dostaneme.

Nalezneme nejprve nejnižší vlastní hodnotu operátoru $\dot{h}_\delta$. To znamená, že hledáme řešení rovnice $\dot{h}_\delta \dot{\psi}(w;x) = -w^2 \dot{\psi}(w;x)$, $w > 0$ taková, že $\dot{\psi} \in \mathrm{D}(\dot{h}_\delta)$. Podle [AGHH, Theorem 2.1.3] platí, že

$$-w^2 \in \sigma_p(\dot{h}_\delta) \cap (-\infty, 0) \iff \det[\Gamma(w)] = 0,$$

kde $\Gamma(w)$ je definována jako

$$\Gamma(w) = -[\alpha_j^{-1} \delta_{jj'} + \dot{G}_0(w; y_j, y_j')]_{j,j'=1}^{N}$$

a $\dot{G}_0$ je Greenova funkce pro případ volné částice, která je rovna

$$\dot{G}_0(w; x, x') = \frac{1}{2w} e^{-w|x-x'|}.$$

Přitom jsme použili o trochu jiné značení než v citaci, konkrétně $w = -\imath k$ pro $w > 0$. Vzorec (2.1.26) z téhož zdroje nám pro náš konkrétní případ dává

$$\Gamma(w) = \begin{pmatrix} -1/2 + (1/2w) & (1/2w)e^{-2aw} \\ (1/2w)e^{-2aw} & -1/2 + (1/2w) \end{pmatrix}.$$

Je snadné zjistit, že požadavek $\det[\Gamma(w)] = 0$ vede na rovnici na vlastní čísla

$$e^{-4aw} = (1-w)^2 \quad \Leftrightarrow \quad e^{-2aw} = -1 + w \ \vee \ e^{-2aw} = 1 - w.$$

Vidíme, že máme dvě záporné vlastní hodnoty, přičemž ta nižší z nich (a tedy nejnižší vlastní číslo operátoru $\dot{h}_\delta$) je rovna $-w_0^2$, kde

$$w_0 = 1 + \frac{W(2ae^{-2a})}{2a} \tag{39}$$

řeší rovnici $e^{-2aw} = -1 + w$. To také znamená, že $e_0 = -w_0^2/2$ je hledané nejnižší vlastní číslo hamiltoniánu h_δ.

Dále najdeme Greenovu funkci operátoru $\dot{h}_\delta$, kterou budeme značit $\dot{G}$. Je známo ([AGHH, Theorem 2.1.1]), že

$$\dot{G}(w; x, x') = \dot{G}_0(w; x, x') + \sum_{j,j'=1}^{N} [\Gamma(w)]^{-1}_{j,j'} \dot{G}_0(w; x - y_j, 0) \dot{G}_0(w; 0, x' - y'_{j'}).$$

Protože podle (2.1.27) tamtéž je

$$[\Gamma(w)]^{-1} = -\{[-1/2 + (1/2w)]^2 - [e^{4aw}/4w^2]\}^{-1}\ \Gamma(w),$$

pokud $\det \Gamma(w) \neq 0$, dostaneme už lehce vyjádření neredukované Greenovy pro operátor h_δ funkce ve tvaru

$$\begin{aligned} \dot{G}(w; x, y) = \frac{1}{2w} \Bigg[e^{-w|x-y|} + \frac{1}{e^{-4aw} - (1-w)^2} \times \\ \times \Big[(1-w) \Big(e^{-w(|x+a|+|y+a|)} + e^{-w(|x-a|+|y-a|)} \Big) - \\ - e^{-2aw} \Big(e^{-w(|x+a|+|y-a|)} + e^{-w(|x-a|+|y+a|)} \Big) \Big] \Bigg] \end{aligned}$$

(pro lepší přehlednost nahrazujeme x' proměnnou y).

Rádi bychom se ještě dobrali tvaru redukované Greenovy funkce. Ta je podle definice pro bod w_0 (ve kterém má $\dot{G}$ pól) dána vztahem

$$\dot{G}^{red}(w_0; x, y) = \lim_{w \to w_0} \left(\dot{G}(w; x, y) - \frac{\dot{\psi}_0(w; x)\overline{\dot{\psi}_0(w; y)}}{w_0^2 - w^2} \right), \tag{40}$$

kde ψ_0 je vlastní funkce příslušná vlastní hodnotě e_0.

Nejprve ovšem musíme tuto $\dot{\psi}_0$ určit. Použijeme k tomu rovnosti

$$\dot{\psi}_0(w; x)\overline{\dot{\psi}_0(w; y)} = \lim_{w \to w_0} \dot{G}(w; x, y)(w_0^2 - w^2), \tag{41}$$

jejíž platnost se snadno ověří z (40). Tvar funkce $\dot{\psi}_0$ potom získáme, pokud vezmeme v (41) pevnou hodnotu proměnné y, konkrétně $y = 1$. Tímto způsobem zjistíme, že

$$\dot{\psi}_0(w;x) = \frac{1}{\sqrt{2+4a(-1+w_0)}} \left(e^{-w_0|x+a|} + e^{-w_0|x-a|} \right).$$

Je vidět, že $\dot{\psi}_0$ je sudá, spojitá, normalizovaná a splňuje hraniční podmínku (37), to jest náleží do $\mathrm{D}(\dot{h}_\delta)$. Vlastní funkce operátoru h_δ příslušná nejnižšímu vlastnímu číslu e_0 je potom rovna $\psi_0(x) = \dot{\psi}_0(w_0;x)$.

Vraťme se teď k otázce nalezení redukované Greenovy funkce. Zapíšeme poslední člen na pravé straně rovnice (40) jako funkci

$$\begin{aligned} H(w;x,y) = & \frac{1}{(2+4a(-1+w_0))\,(w_0^2-w^2)} \times \\ & \times \Big[e^{-w_0(|x+a|+|y+a|)} + e^{-w_0(|x-a|+|y-a|)} + \\ & \quad + e^{-w_0(|x+a|+|y-a|)} + e^{-w_0(|x-a|+|y+a|)} \Big]. \end{aligned}$$

Potom $\dot{G}^{red}$ ve w_0 získáme z limity

$$\dot{G}^{red}(w_0;x,y) = \lim_{w\to w_0} \Big[\dot{G}(w;x,y) - H(w;x,y) \Big].$$

Jejím výpočtem zjistíme, že redukovaná Greenova funkce pro hamiltonián $\dot{h}_\delta$ nabývá v bodě w_0 tvaru

$$\begin{aligned} \dot{G}^{red}(w_0;x,y) = & \frac{1}{2w_0} e^{-w_0|x-y|} + \\ & + \frac{1}{2\,[2+4a(-1+w_0)]\,[2-4a(-1+w_0)^2-2w_0]\,w_0^2} \times \\ & \times \Bigg[-(-3+4w_0)(1-2a(-1+2w_0)^2) \times \\ & \quad \times \sum_{p\in\{|x+a|,|x-a|\},\, r\in\{|y+a|,|y-a|\}} e^{-w_0(p+r)} + \\ & \quad + w_0\,[2+4a(-1+w_0)] \times \\ & \quad \times \left[e^{-w_0(|x+a|+|y+a|)} + e^{-w_0(|x-a|+|y-a|)} \right] + \\ & \quad + 2aw_0(-1+w_0)(2+4a(-1+w_0)) \times \\ & \quad \times \left[e^{-w_0(|x+a|+|y-a|)} + e^{-w_0(|x+a|+|y-a|)} \right] \Bigg]. \end{aligned}$$

Redukovanou Greenovu funkci pro operátor h_δ v bodě e_0 získáme pomocí vztahu $G^{red}(e_0; x, y) = \dot{G}^{red}(w_0; x, y)$. Poznamenejme ještě, že $S(e_0)$ je integrální operátor s jádrem $G^{red}(w_0; . , .)$.

4.5 Numerické výsledky

V předchozí kapitole jsme dokázali nalézt e_0, ψ_0 i $S(e_0)$, tedy vše potřebné k tomu, abychom mohli určit přibližnou hodnotu energie základního stavu molekuly H_2^+ podle vztahů z kapitoly 4.3. Zde popíšeme, jakým způsobem budeme postupovat.

Na rozdíl od předchozích kapitol, kde byla diskuze spíše obecná, budeme nyní explicitně zdůrazňovat závislost všech námi popisovaných hodnot a funkcí na parametrech, to jest značit je jako funkce proměnných B, R. Píšeme proto

$$\begin{gathered} e_L = e_L(B,R), \quad e_0 = e_0(B,R), \quad e_1 = e_1(B,R), \quad e_2 = e_2(B,R), \\ L = L(B), \qquad G^{red}(e_0; x, y) = G^{red}(B, R, e_0; x, y), \\ \psi_0(x) = \psi_0(B, R; x), \qquad V_L(.) = V_L(B, R; .). \end{gathered}$$

Dále budeme značit

$$\Delta V(B, R; z) = \delta(z+a) + \delta(z-a) - \frac{1}{L^2(B)} V_L(B, R; z).$$

Uvažujme pevně zvolený parametr magnetického pole B. Pro každé takové B bychom rádi získali funkci celkové energie molekuly $E(B,R)$ v závislosti na R, tedy vzdálenosti protonů. Víme, že tato funkce má tvar

$$E(B,R) = L^2(B) e_L(B,R) + \frac{1}{R} \cdot \tag{42}$$

Základní fyzikální postuláty říkají, že systém se snaží dostat se do energeticky nejvýhodnějšího stavu, tj. do stavu s nejnižší energií. Pro to nás znamená, že hledáme minimum funkce $E(B,R)$; hodnota $R_{\mathrm{eq}}(B)$, pro kterou je minima nabyto, odpovídá vzdálenosti protonů při stabilní, rovnovážné poloze molekuly, a tedy jejímu průměru. Zajímavá je také hodnota $E_{\mathrm{b}}(B)$ definovaná vztahem

$$E_{\mathrm{b}}(B) = \lim_{R \to \infty} E(B,R) - E(B, R_{\mathrm{eq}}(B)).$$

Ta udává takzvanou vazebnou energii; $|E_{\mathrm{b}}(B)|$ udává množství energie potřebné k rozbití molekuly.

Tabulka 5: Ekvilibria

B	$R^0_{\mathrm{eq}}(B)$	$R^{1*}_{\mathrm{eq}}(B)$	$R^1_{\mathrm{eq}}(B)$	$R^2_{\mathrm{eq}}(B)$	$R'_{\mathrm{eq}}(B)$
$1, \times 10^{10}$	—[1]	$1,343$	$1,417$	$1,494$[7]	$1,246$[3]
$2,35 \times 10^{10}$	—[1]	$0,958$	$1,008$	$1,073$[7]	$0,959$[4]
$5, \times 10^{10}$	—[1]	$0,725$	$0,761$	$0,813$[7]	$0,747$[3]
$1, \times 10^{11}$	—[1]	$0,569$	$0,597$	$0,632$[7]	$0,593$[3]
$2,35 \times 10^{11}$	$0,419$	$0,430$	$0,451$	$0,467$[7]	$0,448$[4]
$5, \times 10^{11}$	$0,274$	$0,341$	$0,357$	$0,364$[7]	$0,350$[5]
$7,05 \times 10^{11}$	$0,233$	$0,308$	$0,322$	$0,325$[7]	$0,318$[4]
$1, \times 10^{12}$	$0,200$	$0,278$	$0,292$	$0,291$[7]	$0,280$[5]
$2,35 \times 10^{12}$	$0,144$	$0,219$	$0,229$	$0,224$[7]	$0,224$[4]
$5, \times 10^{12}$	$0,112$	$0,179$	$0,188$	$0,182$[7]	$0,180$[5]
$1, \times 10^{13}$	$0,091$	$0,150$	$0,158$	$0,148$[7]	$0,147$[6]
$5, \times 10^{13}$	$0,060$	$0,103$	$0,107$	$0,099$[7]	$0,104$[5]
$1, \times 10^{14}$	$0,052$	$0,088$	—[2]	$0,084$[7]	$0,085$[5]
$5, \times 10^{14}$	$0,038$	$0,063$	—[2]	$0,060$[7]	$0,060$[5]

[1] funkce nemá minimum

[2] numerická nestabilita, nemožnost dopočítat

[3] porovnání: převzato z [W 2]

[4] porovnání: převzato z [GZ-J]

[5] porovnání: převzato z [LSS]

[6] porovnání: převzato z [BFMM]

[7] numerické chyby; převzato z [BBDPO]

My ovšem ve vyjádření (42) neznáme e_L explicitně. Dokážeme spočíst jen určitou jeho aproximaci, o které ovšem víme, že pro $B \to \infty$ k e_L konverguje. Můžeme proto předpokládat, že pro námi uvažované vysoké hodnoty B dostaneme dobrý odhad. Zavádíme tedy funkci pro přibližnou hodnotu energie, a to vzorcem

$$E^n(B,R) = L^2(B) \sum_{i=0}^{n} e_i(B,R) + \frac{1}{R} \cdot$$

Přitom E^0 nazveme nultým přiblížením E a analogicky E^1, resp. E^2 prvním, resp. druhým přiblížením. Pro tyto funkce platí totéž, co bylo řečeno v minulém odstavci o E. Jejich minima budeme značit $R^0_{\mathrm{eq}}(B)$, $R^1_{\mathrm{eq}}(B)$ a $R^2_{\mathrm{eq}}(B)$ a příslušné odhady vazebné energie jako $E^0_{\mathrm{b}}(B)$, $E^1_{\mathrm{b}}(B)$ a $E^2_{\mathrm{b}}(B)$. Nalezené hodnoty shrnují tabulky 5 a 6, kde je možno porovnat je s čísly, které udává jiná literatura (značíme je jako $R'_{\mathrm{eq}}(B)$ a $E'_{\mathrm{b}}(B)$). Podrobněji budeme diskutovat tyto výsledky a hlavně postup pro jejich získání v následujících odstavcích.

Zmiňme se nejprve krátce o nultém přiblížení. To je velice snadné spočítat, protože hodnotu $w_0(B,R)$ a tím i $e_0(B,R)$ známe z (39). Tento nejhrubší odhad je ovšem nedostatečný, jak je vidět z tabulky. Pro 4 nejnižší hodnoty B nemá funkce $E_0(B,R)$ minimum; v následujících dvou řádcích vychází kladná vazebná energie, což nemá smysl. Vidíme, že až při velmi silných magnetických polích dostáváme alespoň trochu přijatelné výsledky. Tato hrubá aproximace nám ale poslouží jiným způsobem - je totiž ještě natolik jednoduchá, že umožňuje vypočítat a graficky znázornit R^0_{eq} jako funkci B tak, jak to ukazuje obrázek 1. Je přitom důležité, že charakter této závislosti zůstává stejný i pro první a druhé přiblížení a především pro přesné hodnoty minima $R_{\mathrm{eq}}(B)$.

První přiblížení už dává velice rozumné odhady i pro menší B. Dle (38) zjistíme, že první člen poruchové řady je roven

$$e_1(B,R) = \int_{\mathbb{R}} \Delta V(B,R;z)\psi_0^2(B,R;z) = 2\psi_0^2(B,R;a) + I(B,R),$$

kde poslední člen na pravé straně se počítá jako

$$\begin{aligned} I(B,R) &= -\frac{1}{L^2(B)} \int_{\mathbb{R}} \psi_0^2(B,R;z) V_L(B,R;z) = \\ &= -\frac{1}{L^2(B)} \int_{\mathbb{R}} \left[\psi_0^2(B,R;z+a) + \psi_0^2(B,R;z-a)\right] F(B,R;z)\,\mathrm{d}z, \end{aligned} \tag{43}$$

Tabulka 6: Energie

B	$-E_\mathrm{b}^0(B)$	$-E_\mathrm{b}^{1*}(B)$	$-E_\mathrm{b}^1(B)$	$-E_\mathrm{b}^2(B)$	$-E_\mathrm{b}'(B)$
$1, \times 10^{10}$	—[1]	$1,50$	$1,76$	$1,49$[8]	$1,58$[4]
$2,35 \times 10^{10}$	—[1]	$2,16$	$2,38$	$2,14$[8]	$2,10$[5]
$5, \times 10^{10}$	—[1]	$2,95$	$3,09$	$2,92$[8]	$2,89$[4]
$1, \times 10^{11}$	—[1]	$3,90$	$3,91$	$3,84$[8]	$3,75$[4]
$2,35 \times 10^{11}$	$-0,41$[2]	$5,44$	$5,20$	$5,30$[8]	$4,94$[5]
$5, \times 10^{11}$	$-0,02$[2]	$7,21$	$6,67$	$6,97$[8]	$6,74$[6]
$7,05 \times 10^{11}$	$0,24$	$8,17$	$7,46$	$7,86$[8]	$7,23$[5]
$1, \times 10^{12}$	$0,60$	$9,26$	$8,35$	$8,86$[8]	$8,35$[6]
$2,35 \times 10^{12}$	$1,81$	$12,41$	$10,94$	$11,75$[8]	$10,68$[5]
$5, \times 10^{12}$	$3,35$	$15,87$	$13,80$	$14,90$[8]	$14,46$[6]
$1, \times 10^{13}$	$5,21$	$19,67$	$16,98$	$18,35$[8]	$17,88$[7]
$5, \times 10^{13}$	$11,42$	$31,12$	$26,77$	$28,76$[8]	$26,90$[6]
$1, \times 10^{14}$	$15,01$	$37,12$	—[3]	$34,40$[8]	$33,83$[6]
$5, \times 10^{14}$	$25,72$	$54,94$	—[3]	$50,60$[8]	$50,07$[6]

[1] funkce nemá minimum

[2] nepřípustné řešení

[3] numerická nestabilita, nemožnost dopočítat

[4] porovnání: převzato z [W 2]

[5] porovnání: převzato z [GZ-J]

[6] porovnání: převzato z [LSS]

[7] porovnání: převzato z [BFMM]

[8] numerické chyby; převzato z [BFMM]

přičemž použijeme vyjádření

$$F(B,R;z) = \int\limits_{\mathbb{R}} \frac{e^{-u}}{\sqrt{\frac{z^2}{L^2(B)} + \frac{2u}{B}}}\,\mathrm{d}u = \sqrt{\frac{\pi B}{2}}\left[\operatorname{erfc}\left(\frac{z}{L(B)}\sqrt{\frac{B}{2}}\right)\right] e^{\frac{Bz^2}{2L^2(B)}}\,.$$

Zde erfc značí poruchovou funkci. Výsledky je opět možno najít v tabulce. Pro dvě nejvyšší hodnoty síly magnetického pole ovšem nebylo možno kvůli numerickým chybám dobrat se konkrétního $R^1_{\mathrm{eq}}(B)$. Abychom tento nedostatek odstranili, stačí použít vzorec ([AS])

$$\operatorname{erfc}(x)e^{x^2} \leq \frac{2}{\sqrt{\pi}\left(|x| + \sqrt{x^2 + \frac{\pi}{4}}\right)}\,,$$

díky němuž můžeme ve vyjádření (43) nahradit přesnou hodnotu funkce F odhadem

$$F(z) \approx \sqrt{2}L(B)\frac{1}{|z| + \sqrt{z^2 + \frac{8L^2(B)}{\pi B}}}\,.$$

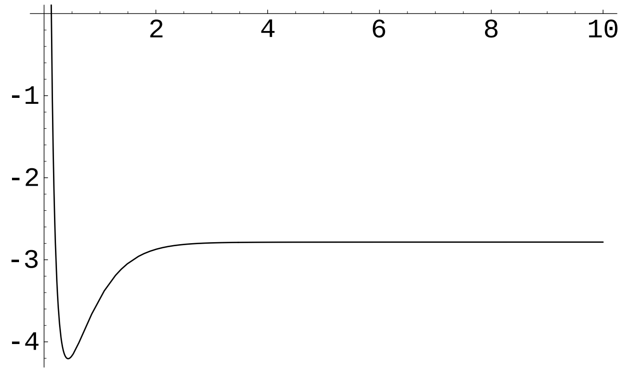
Takto získané přibližné hodnoty poloměru molekuly, resp. vazebné energie jsou v tabulce označeny jako $R^{1*}_{\mathrm{eq}}(B)$, resp. $E^{1*}_{\mathrm{b}}(B)$.

Nakonec se dostáváme k nejpřesnějšímu odhadu, které zde budeme uvažovat, k druhému přiblížení. Druhý člen poruchové řady se dá opět pomocí (38) vyjádřit ve tvaru

$$\begin{aligned}
e_2(B,R) = &- 2\psi_0^2(B,R;a)\,G(B,R,e_0;a,a) - \\
&- 2\psi_0^2(B,R;a)\,G(B,R,e_0;a,-a) + \\
&+ \frac{2\psi_0(B,R;a)}{L^2(B)}\int\limits_{\mathbb{R}} V_L(B,R;x)G(B,R,e_0;x,a)\psi_0(B,R;x)\,\mathrm{d}x + \\
&+ \frac{2\psi_0(B,R;a)}{L^2(B)}\int\limits_{\mathbb{R}} V_L(B,R;x)G(B,R,e_0;x,-a)\psi_0(B,R;x)\,\mathrm{d}x - \\
&- \frac{1}{L^4(B)}\int\limits_{\mathbb{R}}\int\limits_{\mathbb{R}} V_L(B,R;x)V_L(B,R;y)G(B,R,e_0;x,y)\times \\
&\qquad\times \psi_0(B,R;x)\psi_0(B,R;y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y.
\end{aligned}$$

Přitom první dva členy získáme snadno pouhým dosazením a s jednoduchými integrály pracujeme podobně jako při výpočtu $I(B,R)$. Poslední člen, dvojný integrál, ovšem způsobuje numerické problémy – zatím se nepodařilo všechny odstranit a tak musíme vzít zavděk tím, že alespoň uvedeme výsledky autorů [BBDPO]. Jejich hodnoty, získané pomocí druhého přiblížení, lze nalézt v tabulkách ve sloupcích 5 a 6.

Obrázek 1: Charakter závislosti energie na vzdálenosti protonů (funkce $E^0(5000, R)$.)



4.6 Závěr

Na závěr učiníme několik poznámek o použité metodě. Je vidět, že nulté přiblížení se sice ukazuje jako zcela nedostatečné, ale už při prvním přiblížení dostáváme hodnoty, které jsou ve velice dobré shodě s výsledky udávanými v literatuře; to platí i pro druhé přiblížení. Větší rozptyly nalezneme snad jen pro nižší hodnoty síly magnetického pole. Námi zvolený explicitně řešitelný model je tedy velice dobrou aproximací přesného systému, alespoň co se týče vlastností, které nás v tomoto textu zajímaly.

Co se týče toho, že se nepodařilo vyčíslit druhý člen poruchové řady, zmiňované numerické problémy by neměly být zásadního charakteru (jak napovídá i existence výsledků [BBDPO]) a jejich odstranění by zřejmě nemělo být příliš náročné a mělo by být jen otázkou určitého času.

5 Závěr

V této práci jsme se tedy zabývali studiem dvou kvantových systémů.

V oddíle 3 jsme pro Aharonovův-Bohmův efekt v magnetickém poli s bodovou interakcí nalezli všechny samosdružené operátory, které tento model popisují, a ty charakterizovali zobecněnými okrajovými podmínkami v počátku. Zabývali jsme se také spektry těchto hamitoniánů. Rovněž jsme zmínili další situace a problémy, které by se daly zkoumat podobnými metodami a které jsou rozšířením našeho uvažovaného systému.

V 4 jsme nejprve popsali postup, jak popsat molekulu vodíku H_2^+ pomocí jednoduššího, řešitelného modelu, a poté zkoumali jeho některé význačné vlastnosti. Naznačili jsme, že uvedená metoda je velmi uspokojivá a dává kvalitní výsledky.

Reference

[AB] Y. Aharonov and D. Bohm, Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory, Phys. Rev. **115** (1959), 485-491.

[AG] N. I. Akhiezer, I. M. Glazman, Theory of Linear Operators in Hilbert Spaces II, Pitman, Boston, 1981.

[AGHH] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn, H. Holden, Solvable Models in Quantum Physics, Texts and Monographs in Physics, Berlin-Heidelbrg-New York 1987.

[AGHH 2] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn, H. Holden, Point interactios in two dimensions: Basic properties, aproximations and aplications to solid state physics, J. reine angew. Math. **380** (1987), 87-107.

[AHS] Y. Avron, I. Herbst, B. Simon, Schrödinger Operators with Magnetic Fields III. Atoms in Homogenous Magnetic Field, Commun. Math. Phys. **79** (1981), 529.

[AS] M. Abramowitz, I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Funcitons, Dover Publications, Inc., New York 1970.

[AT] R. Adami, A. Teta, On the Aharonov-Bohm Hamiltonian, Lett. Math. Phys., **43** (1998), 43.

[BD 1] R. Brummelhuis, P. Duclos, On the one dimensional behaviour of atoms in intense homogenous magnetic fields, pp 25-35 in Operator Theory, Advances and Applications **126**, Birhkhäuser Verlag Basel 2001.

[BD 2] R. Brummelhuis, P. Duclos, Effective Hamiltonians for atoms in very strong magnetic fields, Few-Body Systems **0** (2001), 1-6.

[BEH] J. Blank, P. Exner, M. Havlíček, Lineární operátory v kvantové fyzice, Univerzita Karlova, Praha, 1993.

[BFMM] H. S. Brandi, R. Ferreira, L. C. M. Miranda, C. P. de Melo, Phys. Rev. Lett **37** (1976), 676.

[C] R. M. Cavalcanti, Comment on “Quantum mechanics of an electron in a homogeneous magnetic field and a singular magnetic flux tube”, quant-ph/0003148.

[CKS] L. S. Cederbaum, U. Kappers, P. Schmelcher, in Conceptual Trends in Quantum Chemistry, edited by E.S. Kryachko, Kluwe Academic Publishers, 1994.

[CMS] L. S. Cederbaum, H.-D. Meyer, P. Schmelcher, Phys. Rev. A. **38** (1988), 6066.

[BBDPO] R. Benguria, R. Brummelhuis, P. Duclos, S. S.Pérez-Oyarzún, H_2^+ in a strong magnetic field described via an exact solvable model, in preparation and to be submitted to Phys. Rev. A

[DMM] V. V. Dodonov, I. A. Malkin, V. I. Man'ko, The Green function of the stationary Schrödinger equation for a particle in a uniform magnetic field, Phys. letters **51** (1975), 133-134.

[DS] L. Dabrowski, P. Šťovíček, Aharonov-Bohm effect with δ-type interaction, J. Math. Phys. **39** (1998), 47-62.

[ESV] P. Exner, P. Šťovíček, P. Vytřas, Generalizes boundary conditions for the Aharonov-Bohm effect combined with a homogenous magnetic field, J. of Math. Phys., **43** (2002), 2151-2168.

[GHRW] F. Geyer, H. Herold, H. Ruder, G. Wunner, Atomes in Strong Magnetic Fields, Springer-Verlag 1994.

[GHS] F. Gesztesy, H. Holden, P. Šeba, On point interaction in magnetic field systems, ve sborníku Rigorous results in quantum dynamics, J. Dittrich a P. Exner (eds.), 147-184.

[GS] P. Giacconi, R. Soldati, Exacct solution of the one-impurity quantum Hall problem, cond-mat/0006259, 2000.

[GZ-J] J. C. de Guillou, J. Zinn-Justin, Ann. Phys. **154** (1984), 440.

[H] M. Hirokawa, O. Ogurisu, Ground state of a spin 1/2 charged particle in a two-dimensional magnetic field, J. Math. Phys. **42** (2001), 3334-3343.

[HRW] H. Herold, R. Ruder, G. Wunner, Phys. Rev. A **88** (1982), 344.

[Ch] R. G. Chambers, Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux, Phys. Rev. Lett. **5** (1960), 3-5.

[ChP] T. Chakraborty, P. Pietiläinen, The Quantum Hall Effects, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1995.

[K] T. Kato, Perturbation theory of linear operators, Springer-Verlag, New York 1966.

[L] D. Lai, Matter in strong magnetic fields, Rev. Mod. Phys. **73** (2001), 629-661.

[LSS] D. Lai, E. E. Salpeter, S. L. Shapiro, Phys. Rev. A **45** (1992), 4832.

[NU] A. F. Nikiforov, V. B. Uvarov, Special functions of mathematical physics, Birkhäuser Verlag Basel, Boston, 1988.

[OP] S. Olariu, I. I. Popescu, The quantum effects of electromagnetic fluxes, Rev. Mod. Phys. **57** (1985), 339-453.

[PBM] A. P. Prudnikov, J. A. Bryškov, O. I. Maričev, Intĕgraly i rjady, Nauka, Moskva, 1986.

[PT] M. Peškin, A. Tonomura, The Aharonov-Bohm Effect, Springer-Verlag, Berlin, 1989.

[R 1] M. Ruderman, Matter in superstrong magnetic fields: the surface of a neutron star, Phys. Rev. Lett. **27** (1971), 1306.

[R 2] S. N. M. Ruijsenaars, The Aharonov-Bohm effect and scattering theory, Annals Phys. **146** (1983), 1-34.

[RS 1] M. Reed, B. Simon, Methods of modern mathematical physics I. Functional analysis, Academic Press, New York, 1980.

[RS 2] M. Reed, B. Simon, Methods of modern mathematical physics II. Fourier analysis, self-adjoitness, Academic Press, New York, 1975.

[RS 4] M. Reed and B. Simon, Methods of Modern Mathematical Physics IV, Academic, New York, 1975.

[SS] P. Schmelcher, W. Schweizer editors, Atoms and Molecules in Strong External Fields, Plenum Press, N. Y. 1998.

[ST] A. A. Samarskij, A. N. Tichonov, Rovnice matematické fysiky, STN, Praha, 1955.

[Th] H.-P. Thienel, Quantum mechanics of an electron in a homogeneous magnetic field and a singular magnetic flux tube, Annals Phys. **280** (2000), 140-162.

[To] A. Tonomura et al., Phys. Rev. Lett. 56 (1986), 792.

[V] V. S. Vladimirov, Uravněnija matěmatičeskoj fiziki, Nauka, Moskva, 1976.

[W 1] J. Weidmann, Linear Operators in Hilbert Spaces, Springer-Verlag, New York, 1980.

[W 2] U. Wille, Phys. Rev. A **38** (1988), 3210.