



Univerzita Hradec Králové
Přírodovědecká fakulta

ÚVOD DO KVANTOVÉ MECHANIKY NA GRAFECH

RNDr. Jiří Lipovský, Ph.D.

Hradec Králové 2017

Obsah

1	Matematický popis Sternova-Gerlachova experimentu	4
1.1	Popis experimentu	4
1.2	Sekvenční Sternův-Gerlachův experiment	5
1.3	Matematický popis sekvenčního Sternova-Gerlachova experimentu	6
1.4	Příklady k samostatnému procvičování	9
1.5	Výsledky příkladů k samostatnému procvičování	9
2	Postuláty kvantové mechaniky	10
2.1	Postulát o vlnové funkci	10
2.2	Postulát o operátorech	11
2.3	Postulát o kvantování	13
2.4	Postulát o redukci vlnové funkce	14
2.5	Postulát o časové Schrödingerově rovnici	15
2.6	Příklady k samostatnému procvičování	15
2.7	Výsledky příkladů k samostatnému procvičování	16
3	Nečasová Schrödingerova rovnice	17
3.1	Odvození nečasové Schrödingerovy rovnice	17
3.2	Stacionární stavy	18
4	Spektrum kvantových grafů	19
4.1	Popis modelu	19
4.2	Úsečka s Neumannovými podmínkami	20
4.3	Kružnice o délce ℓ	21
4.4	Stromový graf se třemi hranami	22
4.5	Příklady k samostatnému procvičování	24
4.6	Výsledky příkladů k samostatnému procvičování	25
5	Rezonance v kvantových grafech	26
5.1	Rezolventní rezonance	26
5.2	Polopřímka s úsečkou – rezolventní rezonance	27
5.3	Přímka a apendix – rezolventní rezonance	29
5.4	Rozptylové rezonance	30
5.5	Polopřímka s úsečkou – rozptylové rezonance	31
5.6	Přímka a apendix – rozptylové rezonance	33
5.7	Příklady k samostatnému procvičování	34
5.8	Výsledky příkladů k samostatnému procvičování	35
6	Transformace grafů	36
6.1	Hvězdicovitý graf se čtyřmi stejnými hranami	36
6.2	Obecný postup při transformaci grafů	37
6.3	Příklady k samostatnému procvičování	39
6.4	Výsledky příkladů k samostatnému procvičování	39
	Použitá a doporučená literatura	40

Předmluva

Tento studijní text je určen zejména jako studijní pomůcka pro studenty předmětů Seminář matematické fyziky 1 a 2, vyučované ve 2. nebo 3. ročníku bakalářského studia oboru Fyzika se zaměřením na vzdělávání na Katedře fyziky Přírodovědecké fakulty Univerzity Hradec Králové.

Text je rozdělen do šesti sekcí. Nejdříve jako motivaci pro studium kvantové mechaniky představíme Sternův-Gerlachův experiment a zaměříme se hlavně na matematický popis situace, kdy částice prochází několika Sternovými-Gerlachovými přístroji za sebou. V následujících dvou sekcích představíme základní postuláty kvantové mechaniky a nečasovou Schrödingerovu rovnici. Přístup k této formulaci kvantové teorie vychází z učebnice [11]. V posledních třech kapitolách se zaměříme na kvantovou mechaniku na grafech. Na jednoduchých příkladech studujeme spektrum kvantových grafů a jejich rezonanční vlastnosti. Nakonec uvedeme tvrzení o unitární transformaci hamiltoniánu na grafech s cílem zjednodušit si studium spektra.

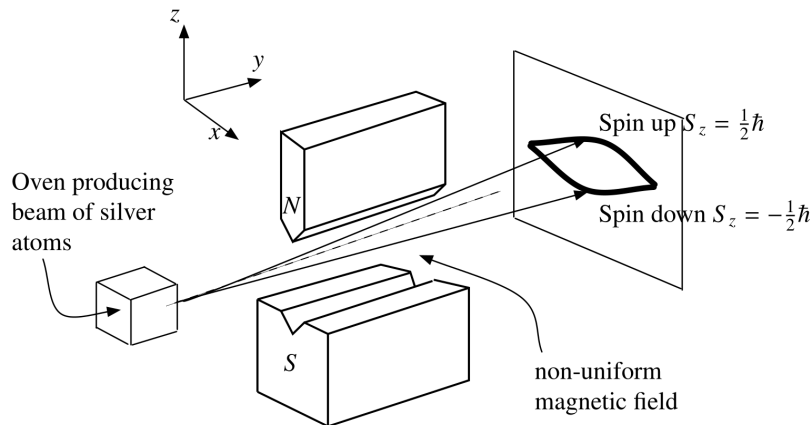
Pro další studium Sternova-Gerlachova experimentu doporučujeme např. [3, 4, 12], úvodními učebnicemi kvantové mechaniky jsou [11, 10]. Pro studium kvantových grafů lze využít zejména učebnici [2], dále pak publikace [1, 6, 7, 8, 9].

Tento text byl připraven za podpory projektu „Úvod do kvantové mechaniky na grafech“ Interní grantové soutěže v rámci Institucionálního rozvojového programu UHK na PřF UHK.

Budu rád, když tento text bude sloužit mým studentům, ale nejen jim. V případě, že v textu objevíte chybu, překlep či nejasnost, sdělte mi ji prosím na emailu jiri.lipovsky@uhk.cz. Děkuji doc. P. Heřmanovi za cenné připomínky.

V Hradci Králové, 24. 10. 2017

Jiří Lipovský



Obrázek 1: Popis Sternova-Gerlachova experimentu. Převzato z [4].

1 Matematický popis Sternova-Gerlachova experimentu

1.1 Popis experimentu

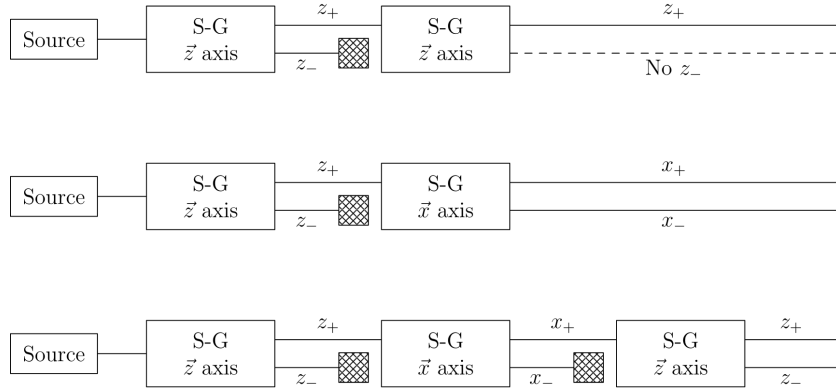
Sternův-Gerlachův experiment je jedním ze základních pokusů kvantové fyziky. Zvláště sekvenční experimenty, popsané níže, ilustrují, jak neintuitivní mohou být výsledky kvantové mechaniky. Pokus byl poprvé proveden německými fyziky Otto Sternem a Waltherem Gerlachem v roce 1922 ve Frankfurtu. Experiment ukázal, že prostorová orientace momentu hybnosti je kvantovaná. Nyní jej můžeme popsat pomocí spinu, který byl zaveden až o několik let později.

Popis experimentu je následující. Z pícky (oven na obr. 1) vylétává ve směru osy y svazek atomů stříbra (ty mají jeden valenční elektron, proto v následujícím textu budeme uvažovat proud elektronů) a vstupuje do nehomogenního magnetického pole s nehomogenitou ve směru osy z . Složky magnetického pole ve směru os x a y budeme uvažovat konstantní. Elektron má magnetický moment

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{s} \frac{e\hbar}{m},$$

kde \mathbf{s} je spin elektronu (jeho z -ová složka může nabývat hodnot $+1/2$ a $-1/2$), e je jeho náboj, m jeho hmotnost a \hbar je redukovaná Planckova konstanta. Potenciální energie částice v magnetickém poli je

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B},$$



Obrázek 2: Sekvenční Sternův-Gerlachův experiment. Převzato z [12].

kde \mathbf{B} je magnetická indukce. Sílu, která působí na elektron, určíme jako záporně vzatou derivaci potenciální energie

$$F = -\frac{\partial U}{\partial z} = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z},$$

kde indexem z značíme z -ovou složku veličiny. Proto se síla působící na elektron se spinem $+1/2$ a $-1/2$ liší, na jeden z nich působí směrem nahoru, na druhý dolů. Svazek se tedy nehomogenním magnetickým polem rozdělí na dva, v horním svazku mají elektrony spin „nahoru“, v dolním „dolů“. Takto dopadají na stínítko a vytváří dvě různá maxima.

1.2 Sekvenční Sternův-Gerlachův experiment

Nyní můžeme provést sekvenční experiment tak, že umístíme několik Sternových-Gerlachových aparatur za sebe (viz obr. 2). Na horním obrázku umístíme za sebe dvě aparatury s nehomogenním magnetickým polem ve směru osy z . Po prvním rozdělení elektronového svazku zastavíme elektrony se spinem dolů stínítkem a do druhé aparatury pokračují pouze elektrony se spinem nahoru. Není překvapením, že na stínítku umístěném za druhou aparaturou se objeví pouze elektrony se spinem nahoru.

V experimentu na prostředním obrázku opět elektrony nejdříve projdou aparaturou s nehomogenním magnetickým polem ve směru osy z a ty se spinem dolů

jsou zastaveny stínítkem. Elektronky se spinem nahoru dále pokračují do aparatury s nehomogenitou magnetického pole ve směru osy x , kde se svazek opět rozdělí. Také nepřekvapí, že polovina těchto elektronů má spin doprava a polovina doleva.

Nejzajímavější je třetí experiment na dolním obrázku. Tam za sebe umístíme aparaturu ve směru osy z , elektronky se spinem dolů odstíníme, pak aparaturu ve směru osy x , elektronky se spinem doleva odstíníme a nakonec přístroj ve směru osy z . Očekávali bychom, že na stínítku se objeví pouze elektronky se spinem nahoru, protože jsme spin dolů odstínili. Realita je ovšem jiná; polovina elektronů bude mít spin nahoru a polovina dolů. To ukazuje, že měření spinu ve směru osy x nám „likviduje“ informaci o spinu ve směru osy z .

1.3 Matematický popis sekvenčního Sternova-Gerlachova experimentu

Použijeme Diracovu bra-ketovou notaci. Bra-vektor $\langle \uparrow z |$, značící stav spin v ose z nahoru, je řádkový vektor se dvěma komplexními složkami. Ket-vektor $|\uparrow z\rangle$ je sloupcový vektor také se dvěma komplexními složkami, který z bra-vektoru získáme tak, že jej transponujeme a komplexně sdružíme. Bracket (anglicky závorka) $\langle \uparrow z | \uparrow z \rangle$ bude skalární součin obou vektorů v \mathbb{C}^2 , tj. maticové násobení bra-vektoru s ket-vektorem.

Popíšme si experiment na horním obrázku. Po průchodu první aparaturou je atom ve stavu $\langle \uparrow z |$. Zajímá nás, jaká je šance, že druhým přístrojem naměříme spin nahoru; to znázorníme výrazem (maticí) $|\uparrow z\rangle \langle \uparrow z |$. Elektron bude ve stavu odpovídajícím maticovému součinu zmíněného vektoru a matice $\langle \uparrow z | \uparrow z \rangle \langle \uparrow z |$. Bude mít spin nahoru a skalární součin (číslo) $\langle \uparrow z | \uparrow z \rangle$ má následující interpretaci: druhá mocnina jeho absolutní hodnoty je pravděpodobnost naměření spinu nahoru druhou aparaturou. Pokud by nás zajímalo naměření spinu dolů druhou aparaturou, dostali bychom $\langle \uparrow z | \downarrow z \rangle \langle \downarrow z |$. Pravděpodobnost jeho naměření bude $|\langle \uparrow z | \downarrow z \rangle|^2$. Z experimentu víme, že $|\langle \uparrow z | \downarrow z \rangle| = 0$ a $|\langle \uparrow z | \uparrow z \rangle| = 1$. Můžeme tedy například zvolit

$$\begin{aligned} |\uparrow z\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & |\downarrow z\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \langle \uparrow z | &= (1, 0), & \langle \downarrow z | &= (0, 1). \end{aligned}$$

Obdobně zavedeme pro spin doprava bra-vektor $\langle \uparrow x |$ a doleva $\langle \downarrow x |$. Nyní budeme studovat experiment na prostředním obrázku. Budeme-li mít elektron po průchodu prvním přístrojem ve stavu spin nahoru, bude pravděpodobnost naměření spinu doleva nebo doprava stejná, poloviční. Dostáváme tedy

$$\begin{aligned} |\langle \uparrow z | \downarrow x \rangle|^2 &= \frac{1}{2}, & |\langle \downarrow z | \downarrow x \rangle|^2 &= \frac{1}{2}, \\ |\langle \uparrow z | \uparrow x \rangle|^2 &= \frac{1}{2}, & |\langle \downarrow z | \uparrow x \rangle|^2 &= \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Obdobně jako v prvním případě máme

$$\begin{aligned} |\langle \uparrow x | \downarrow x \rangle|^2 &= 0, & |\langle \uparrow x | \uparrow x \rangle|^2 &= 1, \\ |\langle \downarrow x | \downarrow x \rangle|^2 &= 1, & |\langle \downarrow x | \uparrow x \rangle|^2 &= 0. \end{aligned}$$

Pokud zvolíme

$$|\uparrow x\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow x\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix},$$

dostáváme z předchozích rovnic podmínky

$$|b_1|^2 = \frac{1}{2}, \quad |b_2|^2 = \frac{1}{2}, \quad |a_1|^2 = \frac{1}{2}, \quad |a_2|^2 = \frac{1}{2}, \quad \bar{a}_1 b_1 + \bar{a}_2 b_2 = 0.$$

Těm odpovídají např. vektory

$$\begin{aligned} |\uparrow x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, & |\downarrow x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \\ \langle \uparrow x | &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1), & \langle \downarrow x | &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1). \end{aligned}$$

Kdybychom posílali elektrony z jiného směru a provedli ostatní možné kombinace experimentu se dvěma přístroji, dostali bychom obdobně pro

$$|\uparrow y\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow y\rangle = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}$$

mj. následující vztahy

$$\begin{aligned} |\langle \uparrow z | \uparrow y \rangle|^2 &= \frac{1}{2}, & |\langle \uparrow x | \uparrow y \rangle|^2 &= \frac{1}{2}, \\ |\langle \downarrow x | \uparrow y \rangle|^2 &= \frac{1}{2}, & |\langle \uparrow y | \uparrow y \rangle|^2 &= 1, \end{aligned}$$

Z nich a jim obdobných máme

$$|c_1|^2 = |c_2|^2 = \frac{1}{2}, \quad |c_1 + c_2|^2 = 1, \quad |c_1 - c_2|^2 = 1, \quad |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

Tomu například odpovídají vektory

$$\begin{aligned} |\uparrow y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, & |\downarrow y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \\ \langle \uparrow y | &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i), & \langle \downarrow y | &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1, i). \end{aligned}$$

Vektory lze vynásobit číslem $e^{i\varphi}$ a změnit jejich fázi, větší volnost už nyní nemáme.

Takto zvolené vektory už předpovídají výsledek experimentu na obrázku dole. Z prvního přístroje vylétávají elektrony se spinem nahoru, druhým projdou

jen elektrony se spinem doprava, proto dostáváme amplitudu $\langle \uparrow z | \uparrow x \rangle$, chceme-li dostat množství elektronů se spinem dolů po třetím přístroji, uvažujeme součin $\langle \uparrow x | \downarrow z \rangle$. Celkem tedy máme pravděpodobnost naměření spinu dolů

$$|\langle \uparrow z | \uparrow x \rangle \langle \uparrow x | \downarrow z \rangle|^2 = \left| (1, 0) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1, 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{4}.$$

Toto udává podíl elektronů z těch, které projdou prvním přístrojem (mají tedy spin nahoru) a po průchodu třetím přístrojem mají spin dolů. Zjevně tento výsledek odpovídá experimentu; polovina elektronů se zachytí na stínítku za druhým přístrojem a další čtvrtina bude mít po průchodu třetím přístrojem spin nahoru.

Nyní uvažujme pozměněný experiment, kde za druhým přístrojem není stínítko. Opět se ptáme, jaký podíl z elektronů, které měly za prvním přístrojem spin nahoru, bude mít za třetím přístrojem spin dolů. Nyní musíme uvažovat obě možnosti průchodu druhým přístrojem: spin doprava i doleva. Hledaná pravděpodobnost je tedy

$$\begin{aligned} & |\langle \uparrow z | \downarrow x \rangle \langle \downarrow x | \downarrow z \rangle + \langle \uparrow z | \uparrow x \rangle \langle \uparrow x | \downarrow z \rangle|^2 = \\ & = \left| (1, 0) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1, -1) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + (1, 0) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1, 1) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \\ & = \left| -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right|^2 = 0. \end{aligned}$$

Pokud tedy druhým přístrojem neprovedeme žádné měření, systém se chová tak, jako by zde tento přístroj nebyl.

Spočtěme matici

$$|\uparrow x\rangle \langle \uparrow x| + |\downarrow x\rangle \langle \downarrow x| = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (1, 1) + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (1, -1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dostáváme jednotkovou matici, proto vidíme, že výraz v předchozím příkladě můžeme nahradit výrazem $\langle \uparrow z | \downarrow z \rangle$ a výsledek plyne rovnou.

Nakonec ještě spočteme maticovou reprezentaci operátoru spinu ve směru osy z , který je definován výrazem

$$\hat{s}_z = \frac{1}{2} |\uparrow z\rangle \langle \uparrow z| - \frac{1}{2} |\downarrow z\rangle \langle \downarrow z|.$$

Dostáváme

$$\hat{s}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0, 1) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Jedná se o jednu z tzv. Pauliho matic vynásobenou jednou polovinou.

1.4 Příklady k samostatnému procvičování

Příklad 1.1. Uvažujte, že v experimentu na dolním obrázku bude uprostřed přístroj s nehomogenitou magnetického pole ve směru osy y (zbylé dva jsou ve směru osy z). Za prvním přístrojem zastavíme stínítkem elektrony se spinem dolů ve směru osy z , za druhým přístrojem zastavíme elektrony se spinem proti směru osy y . Určete, jaký podíl elektronů z těch, které po průchodu prvním přístrojem měly spin nahoru, bude mít po průchodu třetím přístrojem spin dolů.

Příklad 1.2. Uvažujte příklad 1.1 pouze s tím rozdílem, že za druhým přístrojem není stínítko. Jaká je pravděpodobnost v tomto případě?

Příklad 1.3. Vypočítejte matice $|\uparrow y\rangle\langle\uparrow y| + |\downarrow y\rangle\langle\downarrow y|$ a $|\uparrow z\rangle\langle\uparrow z| + |\downarrow z\rangle\langle\downarrow z|$.

Příklad 1.4. Vypočítejte zbylé dva operátory spinu $\hat{s}_x = \frac{1}{2}|\uparrow x\rangle\langle\uparrow x| - \frac{1}{2}|\downarrow x\rangle\langle\downarrow x|$ a $\hat{s}_y = \frac{1}{2}|\uparrow y\rangle\langle\uparrow y| - \frac{1}{2}|\downarrow y\rangle\langle\downarrow y|$.

1.5 Výsledky příkladů k samostatnému procvičování

1.1 $|\langle\uparrow z|\uparrow y\rangle\langle\uparrow y|\downarrow z\rangle|^2 = 1/4$.

1.2 $|\langle\uparrow z|\downarrow y\rangle\langle\downarrow y|\downarrow z\rangle + \langle\uparrow z|\uparrow y\rangle\langle\uparrow y|\downarrow z\rangle|^2 = 0$.

1.3 V obou případech dostáváme jednotkovou matici.

1.4 Dostáváme násobky Pauliho matic $\hat{s}_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{s}_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$.

2 Postuláty kvantové mechaniky

V minulé sekci jsme si na jednoduchém experimentu ukázali, že předpovědi kvantové mechaniky mohou být někdy neintuitivní. Tento příklad nám bude sloužit jako motivace k rigoróznímu zavedení kvantové mechaniky. Tu si, podobně jako v učebnici [11] zavedeme formou pěti postulátů, z nichž bude teorie vyplývat. Ve druhé polovině studijního textu je uplatníme na částici na grafu. V této sekci si postuláty zavedeme pro trojrozměrný prostor, aplikace na graf je přímočará. Pro více detailů o jednotlivých postulátech odkazujeme na učebnici L. Skály [11].

2.1 Postulát o vlnové funkci

Postulát 2.1. *Všechny informace o stavu částice jsou dány vlnovou funkcí, komplexní funkcí tří proměnných a času $\psi : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$. Druhá mocnina absolutní hodnoty vlnové funkce udává hustotu pravděpodobnosti nalezení částice v daném místě a čase $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$, kde \mathbf{r} je polohový vektor částice. Vlnová funkce je kvadraticky integrabilní, konečná, jednoznačná, spojitá a při konečných změnách potenciálu má spojitě parciální derivace podle jednotlivých proměnných.*

Pokud bychom uvažovali více částic, museli bychom vzít do úvahy polohy všech těchto částic. (V tomto textu se ale budeme zabývat jen kvantovou mechanikou jedné částice.) Obdobně, pokud uvažujeme spin (jako u Sternova-Gerlachova experimentu), bude vlnová funkce záviset i na této proměnné.

Nyní si vysvětlíme, jak pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce souvisí s kvadratickou integrabilitou. Z postulátu plyne, že šance nalezení částice v malém objemu dV v okolí polohového vektoru \mathbf{r} a čase t je $d\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$. Pravděpodobnosti, že částici nalezneme někde v celém trojrozměrném prostoru, je 1; částice se někde nalézat musí. Proto

$$1 = \int_{\mathbb{R}^3} d\rho(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV.$$

Tudíž integrál z druhé mocniny absolutní hodnoty vlnové funkce musí být 1. Pokud je integrál z druhé mocniny absolutní hodnoty funkce konečný, říkáme, že funkce je *kvadraticky integrabilní*, značíme $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Kvadraticky integrabilní funkci můžeme snadno převést na funkci, která má integrál z druhé mocniny absolutní hodnoty 1. Funkci tzv. *znormujeme*, vynásobíme takovým číslem, aby výše uvedený integrál byl jedna.

Z matematického pohledu můžeme vlnovou funkci považovat za vektor v *Hilbertově prostoru* \mathcal{H} . Hilbertovým prostorem budeme rozumět komplexní lineární vektorový prostor se skalárním součinem, který je úplný vzhledem k metrice indukované tímto skalárním součinem. *Skalární součin* dvou vektorů u a v značíme

$\langle u|v \rangle$. Je definovaný tak, že splňuje následující tři axiomy

$$\begin{aligned} \langle u|\alpha v + \beta w \rangle &= \alpha \langle u|v \rangle + \beta \langle u|w \rangle, \\ \langle u|v \rangle &= \overline{\langle v|u \rangle}, \\ \langle u|u \rangle &\geq 0, \quad \text{přičemž} \quad \langle u|u \rangle = 0, \quad \text{právě, když} \quad u = 0. \end{aligned}$$

Zde u, v a w jsou vektory, α, β jsou komplexní čísla. Nadtržením značíme komplexní sdružení. Vzdálenost v metrice indukované tímto skalárním součinem je $\rho(u, v) := \sqrt{\langle u - v|u - v \rangle}$. Úplný metrický prostor je ten, ve kterém každá cauchyovská posloupnost je konvergentní.

2.2 Postulát o operátorech

Postulát 2.2. *Každé fyzikální veličině, kterou můžeme měřit, je přiřazen lineární hermitovský operátor. Tento operátor zobrazuje funkce z Hilbertova prostoru do Hilbertova prostoru, tedy působí na vlnovou funkci.*

V kvantové mechanice většinou značíme operátory stříškou, tedy např. $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Linearita operátoru znamená, že pro všechny vektory z Hilbertova prostoru \mathcal{H} (vlnové funkce) u, v a libovolné komplexní konstanty α, β platí

$$\hat{A}(\alpha u + \beta v) = \alpha \hat{A}u + \beta \hat{A}v.$$

Pojem hermitovského operátoru využívá skalární součin. Operátor \hat{A} je hermitovský, pokud platí

$$\langle u|\hat{A}v \rangle = \langle \hat{A}u|v \rangle$$

pro všechny u, v z definičního oboru operátoru \hat{A} .

Pozn.: V matematické fyzice spíše zavádíme pojem *symetrického* a *samosdruženého* operátoru. Budeme uvažovat hustě definovaný operátor \hat{A} v Hilbertově prostoru. Operátor je symetrický, když platí $\langle u, \hat{A}v \rangle = \langle \hat{A}u, v \rangle$ pro všechny u, v z definičního oboru \hat{A} . Akci operátoru \hat{A}^* sdruženého k operátoru \hat{A} na prvek u z Hilbertova prostoru definujeme vztahem $\hat{A}^*u = u^*$, kde u^* je určeno vztahem $\langle u, \hat{A}^*v \rangle = \langle u^*, v \rangle$ platícím pro všechny v z definičního oboru operátoru \hat{A} . Definiční obor \hat{A}^* jsou všechna u , pro která uvedené vztahy platí. Obecně je definiční obor \hat{A}^* nadmnožinou definičního oboru \hat{A} . Operátory, pro které jsou tyto definiční obory rovny, nazveme samosdružené. Pro omezené operátory (např. matice) pojmy symetrický, samosdružený a hermitovský operátor splývají.

Nyní si zavedeme operátory, které jsou v kvantové fyzice ve trojrozměrném prostoru důležité. Operátory kartézských souřadnic

$$\begin{aligned} \hat{x}\psi &= x\psi, \\ \hat{y}\psi &= y\psi, \\ \hat{z}\psi &= z\psi. \end{aligned}$$

Operátory kartézských souřadnic hybnosti

$$\begin{aligned}\hat{p}_x\psi &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi, \\ \hat{p}_y\psi &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\psi, \\ \hat{p}_z\psi &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\psi.\end{aligned}$$

Operátory souřadnic si definujeme jako násobení danou souřadnicí, operátory hybnosti jako násobek parciální derivace podle této souřadnice. Zde $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ je redukovaná Planckova konstanta.

Zkoumejme nyní výraz $[\hat{x}, \hat{p}_x] := \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}$, kterému říkáme komutátor obou operátorů. Pro akci komutátoru na vlnovou funkci dostáváme

$$\begin{aligned}[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi(x, y, z) &= \hat{x}(-i\hbar)\frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial x} - \hat{p}_x x\psi(x, y, z) = \\ &= x(-i\hbar)\frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial x} - (-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x, y, z)) = \\ &= -i\hbar x\frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial x} + i\hbar x\frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial x} + i\hbar\psi(x, y, z) = i\hbar\psi(x, y, z).\end{aligned}$$

Tedy

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

a obdobně

$$[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \quad [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar.$$

Pokud spočítáme akci komutátoru operátorů \hat{x} a \hat{p}_y , dostáváme

$$\begin{aligned}[\hat{x}, \hat{p}_y]\psi(x, y, z) &= \hat{x}(-i\hbar)\frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial y} - \hat{p}_y x\psi(x, y, z) = \\ &= x(-i\hbar)\frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial y} - (-i\hbar)\frac{\partial}{\partial y}(x\psi(x, y, z)) = \\ &= -i\hbar x\frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial y} + i\hbar x\frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial y} = 0.\end{aligned}$$

A odsud máme

$$\begin{aligned}[\hat{x}, \hat{p}_y] &= [\hat{y}, \hat{p}_x] = 0, \\ [\hat{y}, \hat{p}_z] &= [\hat{z}, \hat{p}_y] = 0, \\ [\hat{z}, \hat{p}_x] &= [\hat{x}, \hat{p}_z] = 0.\end{aligned}$$

Je také snadné ověřit, že

$$\begin{aligned}[\hat{x}, \hat{y}] &= [\hat{y}, \hat{x}] = 0, \\ [\hat{y}, \hat{z}] &= [\hat{z}, \hat{y}] = 0, \\ [\hat{z}, \hat{x}] &= [\hat{x}, \hat{z}] = 0.\end{aligned}$$

Z těchto komutačních relací mj. plyne, že zároveň spolu můžeme měřit souřadnici a složku hybnosti, která odpovídá jiné souřadnici. x -ovou složku souřadnice a x -ovou složku hybnosti spolu měřit zároveň nemůžeme; více o tom v jednom z dalších postulátů.

Dalším důležitým operátorem je kinetická energie. V analogii s teoretickou mechanikou jej definujeme jako

$$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m},$$

kde $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ je operátor vektoru hybnosti a m je hmotnost částice. Po využití $\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$ a definice složek operátoru hybnosti dostáváme

$$\hat{T} = (-i\hbar)^2 \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta,$$

kde Δ je Laplaceův operátor. Neméně důležitým operátorem je hamiltonián (operátor energie)

$$\hat{H} = \hat{T} + V(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}, t),$$

kde $V(\mathbf{r}, t)$ je potenciální energie.

2.3 Postulát o kvantování

Postulát 2.3. *Jediné hodnoty, které může veličina A při měření nabývat, jsou vlastní čísla odpovídajícího operátoru \hat{A} . Pokud je systém popsán v okamžiku měření vlnovou funkcí ψ , výsledkem měření je střední hodnota veličiny A daná vztahem*

$$\bar{A} = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle.$$

Pro trojrozměrný prostor výše uvedený skalární součin znamená

$$\bar{A} = \int \bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi(\mathbf{r}, t) dx dy dz.$$

Vlastní čísla operátoru jsou definována podobně jako vlastní čísla matice, jsou to všechna A_n , pro která existuje vlnová funkce ψ_n taková, že

$$\hat{A} \psi_n = A_n \psi_n.$$

Rozvinutím vlnové funkce do báze vlastních funkcí

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n, \quad c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle$$

dostaneme

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = \sum_{m,n} \langle c_m \psi_m | \hat{A} c_n \psi_n \rangle = \sum_{m,n} \bar{c}_m c_n A_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \\ &= \sum_{m,n} \bar{c}_m c_n A_n \delta_{mn} = \sum_n |c_n|^2 A_n. \end{aligned}$$

Zde δ_{mn} je tzv. Kroneckerovo delta, symbol, který je roven 1, když $m = n$ a 0 v opačném případě. Využili jsme toho, že vektory ψ_n můžeme uvažovat ortonormální (kolmé na sebe a jednotkové).

Porovnáním naší definice střední hodnoty s obecnou definicí

$$\bar{A} = \sum_n p_n A_n$$

(p_n je pravděpodobnost naměření hodnoty A_n) dostáváme pro pravděpodobnost (za předpokladu ortonormální báze)

$$p_n = |c_n|^2$$

Všimněme si, že z měření můžeme určit pouze absolutní hodnoty koeficientů c_n , ne jejich přesné hodnoty.

2.4 Postulát o redukci vlnové funkce

Postulát 2.4. *Pokud měříme veličinu A danou operátorem \hat{A} a naměříme hodnotu rovnou vlastnímu číslu A_n , přejde systém do stavu odpovídajícímu vlastnímu vektoru (vlnové funkci) ψ_n pro toto vlastní číslo. Mluvíme o tzv. redukci vlnové funkce.*

Tedy nezávisle na tom, jaký byl stav systému před měřením, provedením měření přejde systém do vlastního stavu a pro vlnovou funkci platí

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n.$$

Pokud budeme měřit více veličin A, B, C, \dots , můžeme měření současně provést pouze v případě, že ψ_n je vlastní funkcí všech operátorů odpovídajících těmto veličinám. Tedy

$$\begin{aligned}\hat{A}\psi_n &= A_n\psi_n, \\ \hat{B}\psi_n &= B_n\psi_n, \\ \hat{C}\psi_n &= C_n\psi_n, \dots\end{aligned}$$

Systém hermitovských operátorů má společný systém vlastních vektorů, právě když tyto operátory komutují. Takže ekvivalentní podmínkou je

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] = 0.$$

Tento problém souvisí s tím, co jsme se dozvěděli v sekci 1. Operátory jednotlivých složek spinu spolu nekomutují, takže nemohou být současně měřeny. Provedením dalšího měření se ztratí informace o měření předchozím, vlnová funkce přejde do vlastního stavu nově měřené veličiny. Proto i když jsme zastavili všechny částice se spinem ve směru osy z dolů, mohli jsme opět po provedení měření v jiné souřadnici naměřit spin dolů v ose z .

Obdobná situace nastává u operátorů souřadnice a hybnosti. Nemůžeme současně měřit operátory stejných složek souřadnice a hybnosti, protože (jak jsme

si spočítali v podsekcí 2.2) spolu nekomutují. Toto souvisí s tzv. *Heisenbergovými relacemi neurčitosti*. V tomto textu se jimi zabývat nebudeme, odkazujeme např. na Skálovu učebnici [11]. Naproti tomu operátory různých složek souřadnice a hybnosti společně měřit můžeme.

Nakonec uvedme, že redukce vlnové funkce je zásadním rozdílem kvantové fyziky a klasické fyziky. V klasické fyzice bylo možné integrovat pohyb částice zpět v čase. To v kvantové fyzice už není kvůli redukci vlnové funkce možná: měřením ztratíme informaci o původním stavu částice.

2.5 Postulát o časové Schrödingerově rovnici

Nyní potřebujeme rovnici, která by udávala časový vývoj stavu, tj. časový vývoj vlnové funkce. Tuto rovnici, kterou nyní postulujeme, zavedl Ervin Schrödinger.

Postulát 2.5. *Nechť je v čase $t = t_0$ stav částice popsán vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t_0)$. Časový vývoj vlnové funkce částice $\psi(\mathbf{r}, t)$ je dán rovnicí*

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t),$$

kde \hat{H} je operátor energie, hamiltonián.

Schrödingerova rovnice je parciální diferenciální rovnicí (protože se v ní vyskytují parciální derivace) prvního řádu (je zde první parciální derivace podle t). K tomu, abychom ji mohli vyřešit, musíme znát počáteční podmínku, tedy vlnovou funkci $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ v čase $t = t_0$. Tuto funkci ale musíme znát v celém prostoru. S touto znalostí a znalostí hamiltoniánu můžeme obdržet vlnovou funkci v celém prostoru v libovolném následujícím čase.

Schrödingerovu rovnici můžeme formálně obdržet pro případ systému s konzervativní potenciální energií tak, že budeme uvažovat tvar hamiltoniánu $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V$ (inspirovaný teoretickou mechanikou) a v rovnici pro energii

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V$$

nahradíme $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ a $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$.

2.6 Příklady k samostatnému procvičování

Příklad 2.6. *Určete, zda následující funkce jsou kvadraticky integrabilní na množinách $(0, 1)$ a $(0, \infty)$.*

a) e^x ,

b) e^{-x} ,

c) e^{ix} .

Příklad 2.7. Definujeme-li složky operátoru momentu hybnosti jako $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$, $\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z$, $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$, určete, čemu je roven komutátor $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$. Využijte výsledku pro komutátory operátorů souřadnic a složek hybností.

Příklad 2.8. Dokažte, že vlastní čísla symetrického (hermitovského) operátoru jsou reálná. Využijte definice symetrického operátoru použitou na vlastní funkce tohoto operátoru

$$\langle \psi_m | \hat{A} \psi_n \rangle = \langle \hat{A} \psi_m | \psi_n \rangle$$

a vlastností skalárního součinu.

2.7 Výsledky příkladů k samostatnému procvičování

2.6 a) Na $(0, 1)$ ANO (výsledek integrálu $\frac{e^2-1}{2}$), na $(0, \infty)$ NE (výsledek integrálu ∞),

b) na $(0, 1)$ ANO (výsledek integrálu $\frac{1-e^{-2}}{2}$), na $(0, \infty)$ ANO (výsledek integrálu $1/2$),

c) na $(0, 1)$ ANO (výsledek integrálu 1), na $(0, \infty)$ NE (výsledek integrálu ∞).

2.7 $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$.

2.8

$$\begin{aligned} A_n \delta_{mn} &= A_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \langle \psi_m | \hat{A} \psi_n \rangle = \\ &= \langle \hat{A} \psi_m | \psi_n \rangle = \overline{A_m} \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \overline{A_m} \delta_{mn} = \overline{A_n} \delta_{mn}. \end{aligned}$$

Odsud $A_n = \overline{A_n}$.

3 Nečasová Schrödingerova rovnice

3.1 Odvození nečasové Schrödingerovy rovnice

Nyní si odvodíme nečasovou Schrödingerovu rovnici. Vyjdeme z časové Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t)$$

a budeme uvažovat hamiltonián \hat{H} , který je časově nezávislý. V takovém případě lze řešení předchozí rovnice hledat pomocí separace proměnných; budeme uvažovat že vlnová funkce je ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\varphi(t).$$

Zde jsme mírně „ohnuli“ značení, značíme písmenem ψ dvě různé funkce, budeme však důsledně psát argumenty, které tyto funkce odlišují.

Dosazením výše uvedeného vztahu pro vlnovou funkci do časové Schrödingerovy rovnice dostáváme

$$i\hbar \psi(\mathbf{r}) \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = \varphi(t) \hat{H} \psi(\mathbf{r}).$$

Využili jsme toho, že funkce $\psi(\mathbf{r})$ není časově závislá a hamiltonián působí pouze na funkci $\psi(\mathbf{r})$ závislou na souřadnici. Nyní obě strany rovnice vydělíme $\psi(\mathbf{r})\varphi(t)$ a dostáváme

$$i\hbar \frac{\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t}}{\varphi(t)} = \frac{\hat{H} \psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})} = E.$$

Levá strana rovnice nezávisí na souřadnici, výraz s hamiltoniánem zase nezávisí na čase. Protože se oba výrazy rovnají, nezávisí ani na souřadnici, ani na čase a můžeme je tedy položit rovny konstantě, kterou označíme E . Dostáváme tedy dvě rovnice

$$\begin{aligned} \hat{H} \psi(\mathbf{r}) &= E \psi(\mathbf{r}), \\ i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} &= E \varphi(t). \end{aligned}$$

První rovnice je nečasová Schrödingerova rovnice a je to v podstatě rovnice na určení vlastních čísel hamiltoniánu (vlastních energií)

$$\hat{H} \psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}).$$

Když tyto energie určíme, můžeme je dosadit do druhé rovnice. Tu řešíme separací proměnných.

$$\begin{aligned} \int \frac{d\varphi_n}{\varphi_n} &= \int \frac{E_n}{i\hbar} dt, \\ \ln \varphi_n(t) &= \frac{E_n}{i\hbar} t + C, \\ \varphi_n(t) &= N e^{\frac{E_n}{i\hbar} t}, \end{aligned}$$

kde N je normalizační konstanta, kterou obvykle klademe rovnou 1. V tom případě z normalizace vlnové funkce dostáváme podmínku

$$\int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi_n(\mathbf{r})} \psi_n(\mathbf{r}) dV = 1.$$

3.2 Stacionární stavy

Jak jsme si odvodili v předchozí podsekcí, vlnová funkce daná nečasovou Schrödingerovou rovnicí má tvar

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{\frac{E_n}{i\hbar} t}.$$

Tyto stavy se nazývají *stacionární stavy*.

Hustota pravděpodobnosti nalezení částice v bodě o polohovém vektoru \mathbf{r} v čase t je

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2 \left| e^{\frac{E_n}{i\hbar} t} \right|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2.$$

Hustota pravděpodobnosti je tedy časově nezávislá.

Obdobně je časově nezávislá i střední hodnota libovolné veličiny, jejíž operátor je časově nezávislý.

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_n &= \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi_n(\mathbf{r}, t)} \hat{A} \psi_n(\mathbf{r}, t) dV = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi_n(\mathbf{r})} e^{-\frac{E_n}{i\hbar} t} \hat{A} \psi_n(\mathbf{r}) e^{\frac{E_n}{i\hbar} t} dV = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi_n(\mathbf{r})} \hat{A} \psi_n(\mathbf{r}) dV. \end{aligned}$$

Díky časové nezávislosti stacionárních stavů jsou např. stabilní atomy a molekuly.

4 Spektrum kvantových grafů

4.1 Popis modelu

Uvažujeme metrický graf Γ , který se skládá z množiny vrcholů \mathcal{V} a množiny hran \mathcal{E} , které spojují tyto vrcholy. V této sekci budeme uvažovat pouze vnitřní hrany o konečných délkách $\ell_j > 0$. Hrany mohou být parametrizovány intervaly $(0, \ell_j)$. Na grafu definujeme operátor (hamiltonián) H , který na hranách působí jako $-\frac{d^2}{dx^2}$. Definičním oborem hamiltoniánu jsou funkce ze Sobolevova prostoru $W^{2,2}(\Gamma)$. Zjednodušeně řečeno, jsou to funkce, pro které existuje první a druhá derivace a jak komponenty těchto funkcí na jednotlivých hranách, tak jejich první a druhé derivace jsou kvadraticky integrabilní, tj. integrály $\int_0^{\ell_j} |f_j(x)|^2 dx$, $\int_0^{\ell_j} |f_j'(x)|^2 dx$ a $\int_0^{\ell_j} |f_j''(x)|^2 dx$ jsou konečné. Další podmínkou toho, aby funkce náležela do definičního oboru hamiltoniánu, je, že splňuje vazebné podmínky v jednotlivých vrcholech grafu. Ty jsou obecně dány rovnicí

$$(U_j - I)\Psi_j + i(U_j + I)\Psi_j' = 0,$$

kde pro každý vrchol je definovaná unitární matice U_j typu $d_j \times d_j$ (d_j je počet hran vycházejících z daného vrcholu; unitarita znamená, že $U_j U_j^\dagger = I$; zde \dagger znamená komplexní sdružení a transpozici matice), I je $d_j \times d_j$ jednotková matice, Ψ_j je vektor, jehož složky jsou limity funkčních hodnot z jednotlivých hran do daného vrcholu a Ψ_j' je vektor limit vycházejících derivací (pokud je hrana parametrizována tak, že $x = 0$ odpovídá danému vrcholu, bereme $f_j'(0)$, pokud vrcholu odpovídá $x = \ell_j$, bereme $-f_j'(\ell_j)$).

Uvedeme nejběžnější příklady vazebných podmínek.

- Dirichletova podmínka. Pro všechny hrany v daném vrcholu v uvažujeme podmínku

$$f_j(v) = 0.$$

To znamená, že efektivně je ve vrcholu graf rozpojený a jednotlivé hrany „o sobě neví“. Odpovídající unitární matice je $U = -I$.

- Neumannova podmínka. Pro všechny hrany v daném vrcholu v uvažujeme podmínku

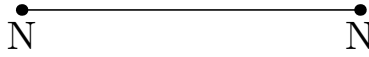
$$f_j'(v) = 0.$$

I v tomto případě je graf ve vrcholu rozpojený. Odpovídající unitární matice je $U = I$.

- δ -podmínka. Funkce ve vrcholu splňují podmínku

$$f_i(v) = f_j(v) \equiv f(v), \quad i, j \in \{1, \dots, d(v)\},$$

$$\sum_{j=1}^{d(v)} f_j'(v) = \alpha f(v).$$



Obrázek 3: Úsečka s Neumannovými podmínkami

Funkce jsou tedy v daném vrcholu spojité a suma vycházejících derivací (zde je opět nutné brát $f'_j(0)$ a $-f'_j(\ell_j)$) je rovna násobku této funkční hodnoty. Konstanta α je dané reálné číslo.

- Standardní podmínka (též zvaná Kirchhoffova). Jde o δ -podmínku s hodnotou síly interakce $\alpha = 0$, tj. funkce jsou spojité ve vrcholu a suma vycházejících derivací je nulová.

4.2 Úsečka s Neumannovými podmínkami

Uvažujeme úsečku o délce ℓ s Neumannovými podmínkami v obou krajních vrcholech (viz obr. 3). Úsečka je parametrizována $x \in (0, \ell)$. Podmínka na vlastní čísla hamiltoniánu (energie, které můžeme v kvantové fyzice naměřit) je $Hf = Ef$ (nečasová Schrödingerova rovnice). Pro energii si zvolíme substituci $E = k^2$, takže dostáváme diferenciální rovnici

$$-\frac{d^2}{dx^2}f(x) = k^2f(x).$$

To je homogenní diferenciální rovnice s konstantními koeficienty, která se řeší substitucí $f(x) = e^{\lambda x}$, kde λ je komplexní konstanta. Díky $f''(x) = \lambda^2 e^{\lambda x}$ máme

$$(\lambda^2 + k^2)e^{\lambda x} = 0.$$

Protože exponenciála se nerovná nikdy nule, dostáváme $\lambda = \pm ik$. Tedy obecné řešení rovnice je lineární kombinací funkcí e^{ikx} a e^{-ikx} :

$$f(x) = ae^{ikx} + be^{-ikx}.$$

Díky Moivreově větě $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$ můžeme psát

$$f(x) = a \cos kx + ai \sin kx + b \cos kx - bi \sin kx = A \cos kx + B \sin kx,$$

kde A a B jsou nové komplexní konstanty. Odsud

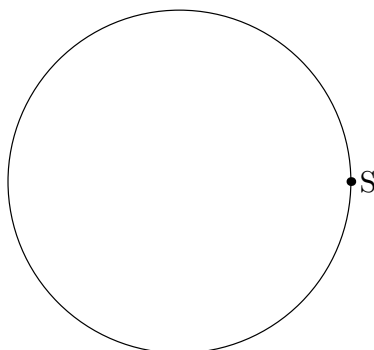
$$f'(x) = -Ak \sin kx + Bk \cos kx.$$

Vazebné podmínky jsou

$$f'(0) = 0, \quad f'(\ell) = 0.$$

Z první z nich máme díky tomu, že $\sin 0 = 0$ a $\cos 0 = 1$,

$$f'(0) = Bk = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0,$$



Obrázek 4: Kružnice o délce ℓ .

z druhé podmínky

$$f'(\ell) = -Ak \sin k\ell + Bk \cos k\ell = 0.$$

S využitím $B = 0$ a toho, že $A \neq 0$ (protože pak by funkce byla identicky nulová) máme

$$\sin k\ell = 0 \quad \Rightarrow \quad k\ell = n\pi, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Proto dostáváme vlastní energie

$$E_n = \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2.$$

Odpovídající vlastní funkce jsou

$$f_n(x) = A_n \cos k_n x = A_n \cos \frac{n\pi x}{\ell}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Dále musíme zahrnout vlastní energii $E_0 = 0$ odpovídající $k = 0$ s konstantní vlastní funkcí

$$f_0(x) = C_n.$$

4.3 Kružnice o délce ℓ .

Uvažujme kružnici o délce ℓ (viz obr. 4). Na kružnici můžeme představit nový vrchol se standardní podmínkou. Tato podmínka předepisuje, že jak funkční hodnota, tak derivace jsou spojité v tomto vrcholu. Tudíž nepřináší žádné omezení. Kružnice je parametrizovaná intervalem $(0, \ell)$. Nečasová Schrödingerova rovnice je opět

$$-f''(x) = k^2 f(x),$$

její obecné řešení je jako v předchozím příkladě

$$f(x) = A \cos kx + B \sin kx,$$

jeho derivace je

$$f'(x) = -Ak \sin kx + Bk \cos kx.$$

Vazebná podmínka v nově vytvořeném vrcholu je

$$f(0) = f(\ell), \quad f'(0) = f'(\ell).$$

Dosazením obecného řešení dostáváme

$$\begin{aligned} A &= A \cos k\ell + B \sin k\ell, \\ Bk &= -Ak \sin k\ell + Bk \cos k\ell. \end{aligned}$$

Vyloučíme-li případ $k = 0$, můžeme tuto soustavu rovnic zapsat jako

$$\begin{pmatrix} \cos k\ell - 1 & \sin k\ell \\ -\sin k\ell & \cos k\ell - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0.$$

Tato soustava má netriviální řešení, pouze pokud je determinant matice soustavy nulový. Tím dostáváme podmínku

$$(\cos k\ell - 1)^2 + \sin^2 k\ell = 0.$$

Odsud

$$\begin{aligned} \cos^2 k\ell + \sin^2 k\ell - 2 \cos k\ell + 1 &= 0, \\ 2 - 2 \cos k\ell &= 0, \\ \cos k\ell = 1 &\Rightarrow k\ell = 2n\pi, \quad n \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

Odsud máme pro vlastní energie

$$E_n = \left(\frac{2n\pi}{\ell} \right)^2.$$

Tyto vlastní hodnoty mají násobnost 2. Pro každé n je matice před vektorem $(A, B)^T$ identicky nulová, proto existují vždy dvě lineárně nezávislé vlastní funkce

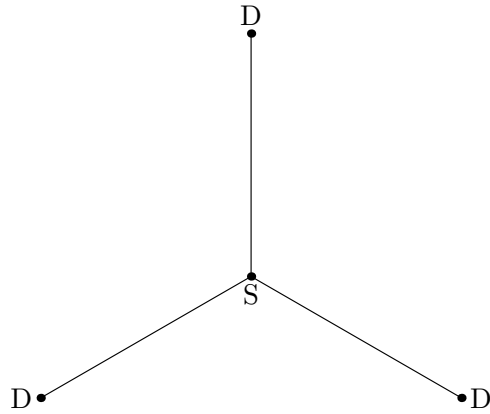
$$f_{1n}(x) = A_n \cos \frac{2n\pi x}{\ell}, \quad f_{2n}(x) = B_n \sin \frac{2n\pi x}{\ell}.$$

Dále musíme zahrnout vlastní energii $E_0 = 0$ odpovídající $k = 0$ s konstantní vlastní funkcí

$$f_0(x) = C_n.$$

4.4 Stromový graf se třemi hranami

Uvažujme stromový graf se třemi hranami (viz obr. 5); všechny hrany jsou spojeny v jednom vrcholu, ve kterém je standardní podmínka. Na zbylých třech vrcholech uvažujeme Dirichletovu podmínku. Hrany jsou parametrizovány intervaly $(0, \ell_j)$ s $x = 0$ ve vrcholech s Dirichletovou podmínkou a $x = \ell_j$ ve středním vrcholu.



Obrázek 5: Stromový graf se standardní podmínkou a Dirichletovými podmínkami.

Dostáváme stejnou nečasovou Schrödingerovu rovnici jako v předchozích dvou případech. Její obecné řešení je ve tvaru

$$f_j(x) = A_j \cos kx + B_j \sin kx .$$

Z Dirichletovy podmínky máme

$$f_j(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad A_j = 0 .$$

Proto

$$\begin{aligned} f_j(x) &= B_j \sin kx , \\ f'_j(x) &= B_j k \cos kx . \end{aligned}$$

Standardní podmínka ve středním vrcholu dává

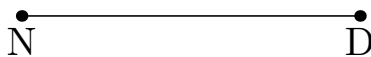
$$\begin{aligned} f_1(\ell_1) &= f_2(\ell_2) = f_3(\ell_3) , \\ -f'_1(\ell_1) - f'_2(\ell_2) - f'_3(\ell_3) &= 0 . \end{aligned}$$

Po dosazení výrazů pro funkční hodnotu a derivaci a po vydělení druhé rovnice $-k$ dostáváme

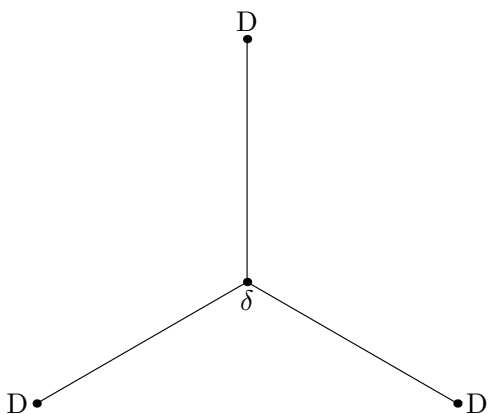
$$\begin{aligned} B_1 \sin k\ell_1 &= B_2 \sin k\ell_2 = B_3 \sin k\ell_3 , \\ B_1 \cos k\ell_1 + B_2 \cos k\ell_2 + B_3 \cos k\ell_3 &= 0 . \end{aligned}$$

Tuto soustavu rovnic lze zapsat jako

$$\begin{pmatrix} \sin k\ell_1 & -\sin k\ell_2 & 0 \\ \sin k\ell_1 & 0 & -\sin k\ell_3 \\ \cos k\ell_1 & \cos k\ell_2 & \cos k\ell_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix} = 0 .$$



Obrázek 6: Úsečka s Neumannovou a Dirichletovou podmínkou.



Obrázek 7: Stromový graf s δ -podmínkou a Dirichletovou podmínkou.

Determinant předchozí matice dává podmínku

$$\sin kl_1 \sin kl_2 \cos kl_3 + \sin kl_1 \sin kl_3 \cos kl_2 + \sin kl_2 \sin kl_3 \cos kl_1 = 0.$$

To je podmínka, ze které můžeme (například numericky) najít k a poté určit vlastní energie.

Pokud budou délky všech hran stejné $\ell_1 = \ell_2 = \ell_3 \equiv \ell$, můžeme vlastní energie určit analyticky. Podmínka bude

$$\sin^2 kl \cos kl = 0.$$

Tomu odpovídá $kl = n\pi$, tedy $E_n = \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2$ s násobností 2 a $kl = \frac{\pi}{2} + n\pi$, tedy $E_n = \left[\frac{\pi}{\ell} \left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^2$ s násobností 1. Vlastní energie $E = 0$ s konstantní vlastní funkcí na grafu zde v tomto případě není, protože by tato konstanta musela být kvůli Dirichletovým podmínkám nulová, tudíž by vlastní funkce byla identicky nulová.

4.5 Příklady k samostatnému procvičování

Příklad 4.1. Určete vlastní energie pro případ úsečky délky ℓ s Neumannovou podmínkou na jednom konci a Dirichletovou na druhém (viz obr. 6).

Příklad 4.2. Určete podmínku na vlastní energie (energie nemusíte dopočítávat) pro případ stromového grafu se třemi hranami spojenými v jednom bodě,

δ -podmínkou v tomto bodě a Dirichletovými podmínkami v ostatních vrcholech (viz obr. 7).

4.6 Výsledky příkladů k samostatnému procvičování

4.1 $E_n = \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{\ell} \right]^2, n \in \mathbb{N}.$

4.2

$$k \sin k\ell_1 \sin k\ell_2 \cos k\ell_3 + k \sin k\ell_1 \sin k\ell_3 \cos k\ell_2 + \\ + k \sin k\ell_2 \sin k\ell_3 \cos k\ell_1 + \alpha \sin k\ell_1 \sin k\ell_2 \sin k\ell_3 = 0.$$

5 Rezonance v kvantových grafech

Rezonance se vyskytují v mnoha oblastech fyziky – akustice, mechanice, elektrických obvodech či částicové fyzice. V kvantové fyzice se na ně můžeme dívat jako na určité zobecnění pojmu vlastní hodnota; odpovídající zobecněné vlastní funkce již nemusí být kvadraticky integrabilní. Rezonancí budeme rozumět bod v komplexní rovině. Jak jsme uvedli dříve, pokud nejsou vázané stavy hamiltoniánu nijak porušeny, existují neustále. Naproti tomu stavy dané zobecněnými vlastními funkcemi, které odpovídají rezonancím, existují pouze po určité dobu. Pravděpodobnost, že v čase t nalezneme rezonanční stav odpovídající rezonanci $E = E_R + iE_I$, je $p(t) = e^{-2|E_I|t}$. Tedy čím blíže je rezonance reálné ose, tím déle „žije“.

Existují dva hlavní způsoby, jak exaktně rezonance definovat, oba si zde ukážeme. První z nich, *rezolventní rezonance*, jsou většinou definovány jako póly operátoru, který se nazývá rezolventa a působí jako $(H - \lambda \text{id})^{-1}$, kde exponent -1 značí inverzi. Toto není ale úplně přesná definice; ve skutečnosti se uvažují póly analytického (meromorfního) prodloužení tohoto operátoru z fyzikálního listu Riemannovy plochy do nefyzikálního listu. Pro účely tohoto textu ale zvolíme jinou, jednodušší definici rezolventní rezonance, která je vhodná pro kvantové grafy a vyplývá z užívané definice. Druhou možností jak nahlížet na pojem rezonance jsou tzv. *rozptylové rezonance*. Jsou to póly determinantu matice rozptylu, která zobrazuje vektor amplitud vcházejících vln na vektor amplitud vycházejících vln a bude definována níže. Dá se ukázat, že obě definice jsou (téměř) totožné.

5.1 Rezolventní rezonance

Začneme definicí rezolventní rezonance pro kvantové grafy.

Definice 5.1. Řekneme, že v bodě k^2 komplexní roviny je rezolventní rezonance, právě tehdy když existuje řešení Schrödingerovy rovnice na grafu Γ , které splňuje vazebné podmínky ve vrcholech a na všech polopřímkách (parametrizovaných intervaly $x \in (0, \infty)$) se chová jako $d_j e^{ikx}$.

Jak už jsme si ukázali při hledání vlastních čísel hamiltoniánu, pro případ, kdy neuvažujeme potenciál, lze řešení Schrödingerovy rovnice na každé z hran vyjádřit jako kombinaci vln e^{-ikx} a e^{ikx} . V případě polopřímek první z vln říkáme vcházející a druhé vycházející (více o tomto názvosloví v podsekcí 5.4). Rozdíl oproti hledání vlastních čísel je v tom, že na polopřímkách uvažujeme pouze vycházející vlnu a také že nepožadujeme, aby výsledná vlnová funkce byla kvadraticky integrabilní.

Většinou je výhodné zkoumat rezonance v tzv. k -rovině; tedy vynásíme reálnou a imaginární část k , tj. odmocniny z energie. Nyní si ukážeme jednu z vlastností rezolventních rezonancí: v k -rovině se nemohou vyskytovat v horní polovině kromě imaginární osy (viz obr. 8).

Věta 5.2. *Rezolventní rezonance mohou mít pouze k , pro které platí $\text{Im } k \leq 0$ nebo $\text{Re } k = 0$.*

Důkaz. Z definice rezolventní rezonance plyne, že komponenty funkce na polopřímkách jsou $g_j(x) = d_j e^{ikx}$. Nechť existuje rezolventní rezonance $k = k_R + ik_I$ s $k_I > 0$. Potom

$$g_j(x) = d_j e^{ix(k_R + ik_I)} = d_j e^{ik_R x} e^{-k_I x}.$$

Pro integrál z druhé mocniny absolutní hodnoty této komponenty dostáváme

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |g_j(x)|^2 dx &= \int_0^\infty |d_j|^2 e^{-2k_I x} dx = |t = -2k_I x, \quad dt = -2k_I dx| = \\ &= |d_j|^2 \int_0^{-\infty} \frac{1}{-2k_I} e^t dt = |d_j|^2 \frac{1}{-2k_I} [e^t]_0^{-\infty} = \frac{|d_j|^2}{2k_I} < \infty. \end{aligned}$$

Príslušné komponenty vlnové funkce na polopřímkách by byly tedy kvadraticky integrabilní. Komponenty vlnové funkce uvnitř grafu zjevně jsou také kvadraticky integrabilní (integruje se přes konečný interval a funkce nediverguje). Protože funkce musí splňovat vazebné podmínky a řeší Schrödingerovu rovnici, dostáváme, že k^2 je vlastní číslo hamiltoniánu. To je však v rozporu s tím, že k^2 leží mimo reálnou osu (kromě případu, kdy $\text{Re } k = 0$). Samosdružený (hermitovský) hamiltonián, kterým náš operátor pro kvantový graf je, nemůže mít komplexní vlastní čísla. Dostáváme tedy spor a tím je důkaz hotov. \square

5.2 Polopřímka s úsečkou – rezolventní rezonance

Budeme uvažovat graf na obr. 9, který se skládá z úsečky o délce ℓ a k ní připojené polopřímky. Uvažujeme Dirichletovu podmínku na volném konci úsečky a δ -podmínku o síle α na spojnici úsečky a polopřímky. Situace odpovídá tomu, že ve vzdálenosti ℓ od konce předepíšeme částici určitou bariéru, částice tedy po určité době „zůstane žít na úsečce“. Úsečku parametrizujeme intervalem $(0, \ell)$ s $x = 0$ na volném konci a $x = \ell$ na spojnici s polopřímkou, zatímco polopřímku parametrizujeme intervalem $(0, \infty)$ s $x = 0$ odpovídajícím spojnici s úsečkou. Komponenty vlnové funkce popíšeme $f(x)$ (úsečka) a $g(x)$ (polopřímka), viz obr. 9.

Vazebné podmínky popíšeme rovnicemi

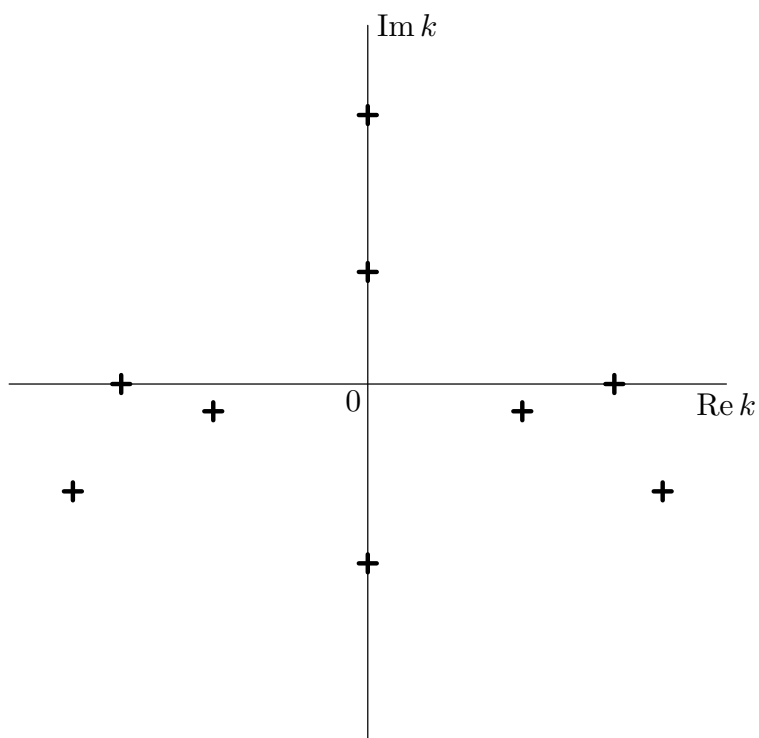
$$f(0) = 0, \quad f(\ell) = g(0), \quad -f'(\ell) + g'(0) = \alpha g(0). \quad (1)$$

Řešeními Schrödingerovy rovnice na úsečce a polopřímce jsou funkce e^{ikx} a e^{-ikx} , jak jsme již popsali v předchozí sekci. Řešení na úsečce tedy zvolíme jako jejich lineární kombinaci, jako komponentu vlnové funkce na polopřímce zvolíme v souladu s naší definicí rezolventní rezonance pouze vycházející vlnu e^{ikx} . Řešení tedy uvažujeme ve tvaru

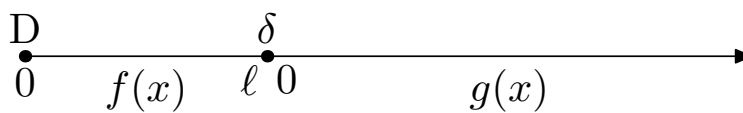
$$f(x) = ae^{-ikx} + be^{ikx}, \quad g(x) = de^{ikx}.$$

Spočteme první derivace těchto funkcí

$$f'(x) = -ika e^{-ikx} + ikb e^{ikx}, \quad g'(x) = ikd e^{ikx}.$$



Obrázek 8: Rezolventní rezonance nejsou v horní polorovině s výjimkou imaginární osy.



Obrázek 9: Polopřímka s úsečkou, převzato z [9].

Tyto výrazy v jednotlivých vrcholech grafu dosadíme do vazebných podmínek (1). Dostáváme

$$\begin{aligned} a + b &= 0, & ae^{-ik\ell} + be^{ik\ell} &= d, \\ ik(ae^{-ik\ell} - be^{ik\ell}) &= (\alpha - ik)d. \end{aligned}$$

Z první rovnice dostaneme $b = -a$. Dosazením tohoto výrazu do zbylých rovnic máme

$$\begin{aligned} a(e^{-ik\ell} - e^{ik\ell}) &= d, \\ ika(e^{-ik\ell} + e^{ik\ell}) &= (\alpha - ik)d. \end{aligned}$$

Nyní dosazením za d z první rovnice do druhé dostaneme

$$ika(e^{-ik\ell} + e^{ik\ell}) = (\alpha - ik)a(e^{-ik\ell} - e^{ik\ell}).$$

Nyní tuto rovnici vydělíme $(-2i)$ a použijeme vztahy pro sinus a kosinus:

$$\sin k\ell = \frac{e^{ik\ell} - e^{-ik\ell}}{2i}, \quad \cos k\ell = \frac{e^{ik\ell} + e^{-ik\ell}}{2}$$

a obdržíme

$$-ak \frac{e^{ik\ell} + e^{-ik\ell}}{2} = (\alpha - ik)a \frac{e^{ik\ell} - e^{-ik\ell}}{2i},$$

z čehož plyne rezonanční podmínka

$$(\alpha - ik) \sin k\ell + k \cos k\ell = 0.$$

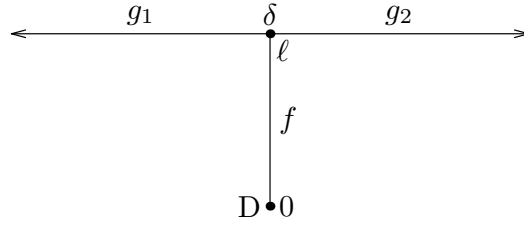
5.3 Příмка a appendix – rezolventní rezonance

Uvažujme graf skládající se ze dvou polopřímek a jedné úsečky, všechny hrany jsou spojeny v jednom bodě (viz obr. 10). Graf vypadá jako příмка s přívěskem. V bodě, ve kterém jsou všechny hrany spojeny, uvažujeme δ -podmínku o síle α , na volném konci úsečky uvažujeme Dirichletovu podmínku. Úsečku parametrizujeme intervalem $(0, \ell)$ s $x = 0$ na volném konci a $x = \ell$ na spojnici s polopřímkami. Obě polopřímky parametrizujeme intervaly $(0, \infty)$ s $x = 0$ ve spojnici s úsečkou. Komponenty vlnové funkce označíme: $f(x)$ pro úsečku a $g_1(x)$ a $g_2(x)$ pro polopřímky. Pokusíme se opět najít rezonanční podmínku pro rezolventní rezonance.

Vazebné podmínky lze zapsat jako

$$\begin{aligned} f(0) &= 0, & f(\ell) &= g_1(0) = g_2(0), \\ -f'(\ell) + g_1'(0) + g_2'(0) &= \alpha g_1(0). \end{aligned}$$

Na polopřímkách zvolíme opět řešení ve tvaru vycházející vlny, jak plyne z definice rezolventní rezonance $g_j(x) = d_j e^{ikx}$, $j = 1, 2$. Řešení na úsečce bude



Obrázek 10: Polopřímka s appendixem.

kombinací obou vln, tedy e^{ikx} a e^{-ikx} . Jak jsme si ukázali u bodového spektra kvantových grafů, lze tuto kombinaci zapsat také jako kombinaci sinu a kosinu.

$$f(x) = a \sin kx + b \cos kx.$$

Z Dirichletovy vazebné podmínky ve volném vrcholu úsečky $f(0) = 0$ dostáváme $b = 0$. Dále proto budeme uvažovat $f(x) = a \sin kx$. Spočteme derivace funkcí f , g_1 a g_2 a dosadíme funkce a jejich derivace do vazebných podmínek ve vrcholech.

$$f'(x) = ak \cos kx, \quad g'_j(x) = ikd_j e^{ikx}, \quad j = 1, 2.$$

Dostáváme

$$\begin{aligned} d_1 &= d_2 = a \sin k\ell, \\ -ak \cos k\ell + ik(d_1 + d_2) &= \alpha d_1. \end{aligned}$$

Dosadíme za d_1 a d_2 z první rovnice do druhé.

$$-ak \cos k\ell + 2ika \sin k\ell = \alpha a \sin k\ell.$$

Protože a není rovno nule (v tom případě by totiž byly nulové i koeficienty d_1 a d_2 a celá funkce by byla triviálně nulová), dostáváme rezonanční podmínku

$$(\alpha - 2ik) \sin k\ell + k \cos k\ell = 0.$$

Z ní můžeme (např. numericky) najít polohy rezonancí jako komplexní čísla k , která řeší tuto rovnici s daným α .

5.4 Rozptylové rezonance

Nyní se zaměříme na druhý způsob definice rezonancí. Opět budeme hledat řešení Schrödingerovy rovnice na každé hraně jako lineární kombinaci funkcí e^{-ikx} a e^{ikx} . Narozdíl od rezolventních rezonancí tentokrát uvažujeme i vcházející vlny na polopřímkách.

Definice 5.3. *Uvažujeme graf Γ s polopřímkami. Nechť existuje (ne nutně kvadraticky integrabilní) řešení Schrödingerovy rovnice na hranách grafu, které splňuje vazebné podmínky ve vrcholech. Matici, která zobrazuje vektor amplitud*

vcházejících vln e^{-ikx} na polopřímkách na vektor amplitud vycházejících vln e^{ikx} , nazveme maticí rozptylu (*S-maticí*). Komplexní energie, ve kterých determinant této matice diverguje, nazveme rozptylovými rezonancemi.

Nyní si zdůvodníme, proč vlnu e^{-ikx} nazýváme vcházející a e^{ikx} vycházející. Budeme uvažovat časovou Schrödingerovu rovnici na polopřímce pro $\hbar = 2m = 1$, tedy ve tvaru $(-\partial_x^2 - i\partial_t)u_j(x, t) = 0$. Její řešení budeme hledat ve tvaru separovaných proměnných $u_j(x, t) = v_j(t)g_j(x)$. Rovnice přejde na

$$-v_j(t) \frac{\partial^2 g_j(x)}{\partial x^2} - i g_j(x) \frac{\partial v_j(t)}{\partial t} = 0,$$

což lze zapsat i ve tvaru

$$-i \frac{1}{v_j(t)} \frac{\partial v_j(t)}{\partial t} = \frac{1}{g_j(x)} \frac{\partial^2 g_j(x)}{\partial x^2} = -k^2.$$

Můžeme si všimnout, že výraz vlevo závisí jen na čase zatímco další výraz závisí pouze na souřadnici. Protože se rovnají, celý výraz nezávisí ani na souřadnici, ani na čase, je tedy konstantou. Tu můžeme libovolně označit; na pravou stranu rovnice jsme napsali $-k^2$. Dostaneme tedy dvě obyčejné diferenciální rovnice

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_j(t)}{\partial t} &= -ik^2 v_j(t), \\ \frac{\partial^2 g_j(x)}{\partial x^2} + k^2 g_j(x) &= 0. \end{aligned}$$

Obě rovnice jsou homogenní lineární diferenciální rovnice s konstantními koeficienty; standardním postupem je tedy vyřešíme a dostáváme

$$v_j(t) = c_{1j} e^{-ik^2 t}, \quad g_j(x) = c_{2j} e^{-ikx} + c_{3j} e^{ikx},$$

kde c_{1j} , c_{2j} a c_{3j} jsou konstanty. Tedy s použitím jiných konstant, které jsou jejich kombinací, dostáváme

$$u_j(x, t) = c_{4j} e^{-ik(x+kt)} + c_{5j} e^{ik(x-kt)}.$$

Abychom dostali stejnou fázi (stejnou hodnotu výrazu $x + kt$) u první z vln, musíme při zvyšujícím se čase snižovat souřadnici, vlna tedy „cestuje“ proti směru souřadnice, tedy dovnitř grafu. U druhé vlny je to opačně.

Dále lze dokázat, že množina všech rezolventních rezonancí je rovna množině rozptylových rezonancí sjednocené s množinou vlastních hodnot s vlastními funkcemi s nosičem na vnitřku grafu. Nosičem funkce je množina, na které je tato funkce nenulová.

5.5 Polopřímka s úsečkou – rozptylové rezonance

Budeme uvažovat stejný příklad jako v podsekcí 5.2 (viz obr. 9), nyní nalezneme maticí rozptylu a rozptylové rezonance. Parametrizace hran a volba značení

je stejná jako v příkladě v podsekcí 5.2. Připomeneme vazebné podmínky (δ -podmínka na spojnici úsečky a polopřímky, Dirichletova podmínka na volném konci úsečky).

$$f(0) = 0, \quad f(\ell) = g(0), \quad -f'(\ell) + g'(0) = \alpha g(0).$$

Na úsečce uvažujeme opět řešení $f(x) = ae^{-ikx} + be^{ikx}$, zatímco na polopřímce uvažujeme nyní obě vlny, vcházející e^{-ikx} s amplitudou c a vycházející e^{ikx} s amplitudou d , tedy komponenta funkce na polopřímce je $g(x) = ce^{-ikx} + de^{ikx}$. Vypočteme si derivace

$$f'(x) = ik(-ae^{-ikx} + be^{ikx}), \quad g'(x) = ik(-ce^{-ikx} + de^{ikx}).$$

Dosazením do vazebných podmínek dostaneme

$$\begin{aligned} a + b &= 0, & ae^{-ik\ell} + be^{ik\ell} &= c + d, \\ ik(d - c) + ik(ae^{-ik\ell} - be^{ik\ell}) &= \alpha(c + d). \end{aligned}$$

Z první z rovnic máme $b = -a$. Dosazením tohoto výrazu do ostatních rovnic máme

$$\begin{aligned} a(e^{-ik\ell} - e^{ik\ell}) &= c + d, \\ ik(d - c) + ika(e^{-ik\ell} + e^{ik\ell}) &= \alpha(c + d). \end{aligned}$$

Opět využijeme definice sinu a kosinu jako v příkladu 5.2 a po vydělení rovnic $(-2i)$ či 2 dostáváme

$$\begin{aligned} a \sin k\ell &= \frac{i}{2}(c + d), \\ \frac{ik}{2}(d - c) + ika \cos k\ell &= \frac{\alpha}{2}(c + d). \end{aligned}$$

Nyní vynásobením druhé rovnice 2 $\sin k\ell$ a dosazením za $a \sin k\ell$ máme

$$\begin{aligned} ik(d - c) \sin k\ell - k \cos k\ell(c + d) &= \alpha(c + d) \sin k\ell, \\ [(\alpha - ik) \sin k\ell + k \cos k\ell] d &= -[(\alpha + ik) \sin k\ell + k \cos k\ell] c. \end{aligned}$$

Matici rozptylu dostaneme jako operátor, který zobrazuje vektor amplitud vcházejících vln (v našem případě c) na vektor amplitud vycházejících vln (d). Tedy

$$S(k) = \frac{d}{c} = -\frac{(\alpha + ik) \sin k\ell + k \cos k\ell}{(\alpha - ik) \sin k\ell + k \cos k\ell}.$$

V tomto případě je matice rozptylu pouze číslo (matice 1×1), protože máme jen jednu polopřímku. Póly této matice (podmínka, kdy je jmenovatel rovný nule) jsou stejné jako rezolventní rezonance.

5.6 Příímka a apendix – rozptylové rezonance

Budeme uvažovat stejný příklad jako v podsekcí 5.3 (viz obr. 10), tedy příímku s příívěskem. Budou nás tentokrát zajíímat rozptylové rezonance a matice rozptylu. Hrany parametrizujeme stejně jako v podsekcí 5.3, vazebné podmínky jsou stejné. Komponenta funkce na úsečce bude stejně jako ve zmíněném příkladě $f(x) = a \sin kx$ (opět jsme využili Dirichletovy podmínky, abychom vyloučili kosinus). Na polopříímkách budeme uvažovat kombinaci vcházejících a vycházejících vln:

$$g_j(x) = c_j e^{-ikx} + d_j e^{ikx}.$$

Dosažením do vazebných podmínek

$$\begin{aligned} f(0) = 0, \quad f(\ell) = g_1(0) = g_2(0), \\ -f'(\ell) + g_1'(\ell) + g_2'(\ell) = \alpha g_1(\ell). \end{aligned}$$

dostáváme

$$\begin{aligned} c_1 + d_1 = c_2 + d_2 = a \sin k\ell, \\ -ak \cos k\ell + ik(d_1 + d_2 - c_1 - c_2) = \alpha(c_1 + d_1). \end{aligned}$$

Druhou rovnici vynásobíme $\sin k\ell$, abychom mohli dosadit z první rovnice za $a \sin k\ell$ a tím dostali soustavu dvou rovnic o čtyřech neznámých c_1, c_2, d_1 a d_2 .

$$\begin{aligned} c_1 + d_1 = c_2 + d_2, \\ -k \cos k\ell(c_1 + d_1) + [ik(d_1 + d_2 - c_1 - c_2) - \alpha(c_1 + d_1)] \sin k\ell = 0. \end{aligned}$$

Maticově se dá tato soustava zapsat jako

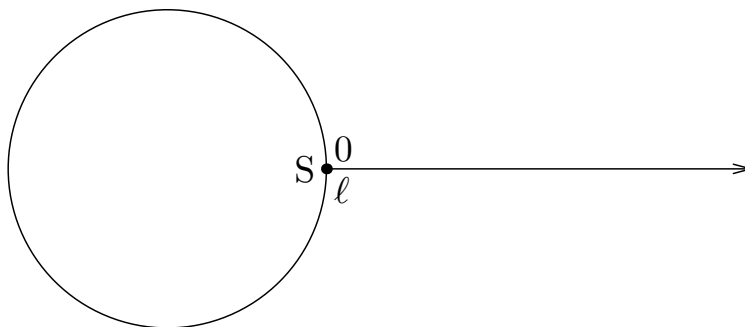
$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ (\alpha + ik) \sin k\ell + k \cos k\ell & ik \sin k\ell \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ (-\alpha + ik) \sin k\ell - k \cos k\ell & ik \sin k\ell \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Protože matice rozptylu je definována jako matice zobrazující vektor amplitud vcházejících vln na vektor amplitud vycházejících vln

$$S(k) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix},$$

máme $S(k) = D^{-1}C$, kde

$$\begin{aligned} C &= \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ (\alpha + ik) \sin k\ell + k \cos k\ell & ik \sin k\ell \end{pmatrix}, \\ D &= \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ (-\alpha + ik) \sin k\ell - k \cos k\ell & ik \sin k\ell \end{pmatrix}. \end{aligned}$$



Obrázek 11: Obrázek grafu k příkladu 5.4 – laso graf.

Použijeme známého vztahu pro inverzi matice 2×2 .

$$D^{-1} = \frac{1}{\det D} \begin{pmatrix} ik \sin k\ell & -1 \\ (\alpha - ik) \sin k\ell + k \cos k\ell & -1 \end{pmatrix}.$$

Tedy

$$\begin{aligned} S(k) &= \frac{1}{(\alpha - 2ik) \sin k\ell + k \cos k\ell} \begin{pmatrix} ik \sin k\ell & -1 \\ (\alpha - ik) \sin k\ell + k \cos k\ell & -1 \end{pmatrix} \\ &\quad \cdot \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ (\alpha + ik) \sin k\ell + k \cos k\ell & ik \sin k\ell \end{pmatrix} = \\ &= -\frac{1}{(\alpha - 2ik) \sin k\ell + k \cos k\ell} \begin{pmatrix} \alpha \sin k\ell + k \cos k\ell & 2ik \sin k\ell \\ 2ik \sin k\ell & \alpha \sin k\ell + k \cos k\ell \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

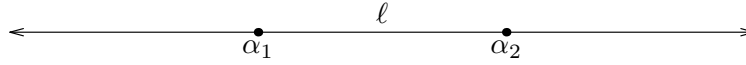
Determinant matice rozptylu je

$$\begin{aligned} \det S &= \frac{(\alpha \sin k\ell + k \cos k\ell)^2 + (2k \sin k\ell)^2}{[(\alpha - 2ik) \sin k\ell + k \cos k\ell]^2} = \\ &= \frac{[(\alpha - 2ik) \sin k\ell + k \cos k\ell][(\alpha + 2ik) \sin k\ell + k \cos k\ell]}{[(\alpha - 2ik) \sin k\ell + k \cos k\ell]^2} = \\ &= \frac{(\alpha + 2ik) \sin k\ell + k \cos k\ell}{(\alpha - 2ik) \sin k\ell + k \cos k\ell} \end{aligned}$$

Vidíme, že opět jmenovatel determinantu dává stejnou rezonanční podmínku jako výpočet pro rezolventní rezonance v případě podsekcce 5.3.

5.7 Příklady k samostatnému procvičování

Příklad 5.4. *Uvažujme kvantový graf skládající se z kružnice o délce ℓ a k ní připojené polopřímky (viz obr. 11). V jediném jeho vrcholu uvažujme standardní vazebné podmínky. Určete rezonanční podmínku pro nalezení rezolventních rezonancí a najděte matici rozptylu (což je v tomto případě matice 1×1).*



Obrázek 12: Obrázek grafu k příkladu 5.5 – přímka se dvěma interakcemi.

Příklad 5.5. *Uvažujme kvantový graf – přímku se dvěma δ -interakcemi s rozdílnou silou (viz obr. 12). Jinak na něj lze pohlížet jako na graf skládající se z jedné úsečky o délce ℓ a dvou polopřímek. Máte-li zadané síly δ -podmínek α_1 a α_2 , určete rezonanční podmínku.*

5.8 Výsledky příkladů k samostatnému procvičování

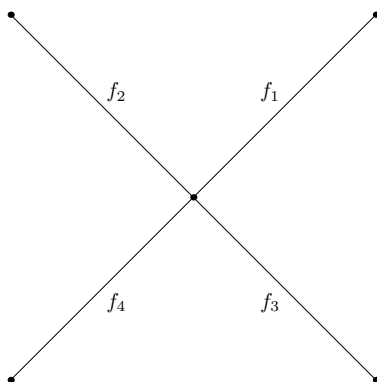
5.4 Rezonanční podmínka:

$$0 = k(-4 + e^{ik\ell} + 3e^{-ik\ell}) = 2ik \sin \frac{k\ell}{2} (e^{ik\ell/2} - 3e^{-ik\ell/2}).$$

S-matice:

$$S(k) = \frac{3e^{ik\ell} - 1}{3 - e^{ik\ell}}.$$

5.5 Rezonanční podmínka: $0 = \alpha_1 \alpha_2 e^{ik\ell} - (\alpha_1 - 2ik)(\alpha_2 - 2ik)e^{-ik\ell}$.



Obrázek 13: Obrázek grafu k příkladu v podsekcí 6.1 – hvězdicovitý graf se čtyřmi hranami.

6 Transformace grafů

V této sekci si probereme unitární transformace hamiltoniánů na grafech. Pomocí těchto transformací můžeme ukázat, že spektrum některých grafů je stejné pro dva různé grafy. Obdobně to platí pro množinu rezolventních rezonancí na dvou grafech s polopřímkami. Výhodu této metody si nejdříve ukážeme na jednoduchém příkladu.

6.1 Hvězdicovitý graf se čtyřmi stejnými hranami

Uvažujme graf tvaru hvězdy se čtyřmi hranami délky ℓ spojenými v jednom bodě (viz obr. 13). Uvažujme Dirichletovy podmínky na volných koncích hran a standardní podmínku v centrálním vrcholu spojujícím hrany. Označme si funkce na hranách jako f_1 , f_2 , f_3 a f_4 . Zvolme $x = 0$ ve středovém vrcholu a $x = \ell$ v krajních bodech. Vazebné podmínky lze zapsat jako

$$\begin{aligned} f_1(0) = f_2(0) = f_3(0) = f_4(0), & \quad f_1'(0) + f_2'(0) + f_3'(0) + f_4'(0) = 0. \\ f_1(\ell) = f_2(\ell) = f_3(\ell) = f_4(\ell) = 0. & \end{aligned}$$

Nyní provedeme následující trik. Budeme uvažovat symetrickou část a antisymetrickou část funkce na grafu vzhledem k vodorovné ose. Zadefinujeme

$$\begin{aligned} g_{1s}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_1(x) + f_3(x)), & g_{1a}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_1(x) - f_3(x)), \\ g_{2s}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_2(x) + f_4(x)), & g_{2a}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_2(x) - f_4(x)). \end{aligned}$$

Funkce g_{1s} je symetrizací funkcí f_1 a f_3 a funkce g_{1a} jejich antisymetrizací. Konstantu $1/\sqrt{2}$ jsme zvolili proto, aby součet druhým mocnin L^2 norem obou

funkcí se nezměnil, tedy

$$\int_0^\ell (|g_{1s}(x)|^2 + |g_{1a}(x)|^2) dx = \int_0^\ell (|f_1(x)|^2 + |f_3(x)|^2) dx.$$

Toto normování ale není příliš důležité a hlavní výsledek dostaneme i bez něj. Obdobně g_{2s} je symetrizací a g_{2a} antisymetrizací funkcí f_2 a f_4 .

Přepíšeme si vazebné podmínky do funkcí g_{1s} , g_{1a} , g_{2s} a g_{2a} .

$$\begin{aligned} g_{1a}(0) = f_1(0) - f_3(0) = 0, \quad g_{2a}(0) = f_2(0) - f_4(0) = 0, \\ g'_{1s}(0) + g'_{2s}(0) = f'_1(0) + f'_3(0) + f'_2(0) + f'_4(0) = 0, \\ g_{1s}(0) - g_{2s}(0) = f_1(0) + f_3(0) - f_2(0) - f_4(0) = 0, \\ g_{1a}(\ell) = f_1(\ell) - f_3(\ell) = 0, \quad g_{2a}(\ell) = f_2(\ell) - f_4(\ell) = 0, \\ g_{1s}(\ell) = f_1(\ell) + f_3(\ell) = 0, \quad g_{2s}(\ell) = f_2(\ell) + f_4(\ell) = 0. \end{aligned}$$

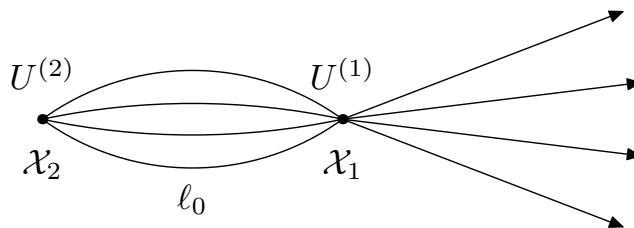
Antisymetrické funkce g_{1a} a g_{2a} tedy odpovídají každá funkci na jedné úsečce o délce ℓ s Dirichletovými podmínkami na okrajích, protože jsme dostali vazebné podmínky $g_{ja}(0) = 0$, $g_{ja}(\ell) = 0$, $j = 1, 2$. Funkce g_{1s} a g_{2s} odpovídají dvěma úsečkám s Dirichletovou podmínkou ($g_{js}(\ell) = 0$, $j = 1, 2$) na jednom konci, přičemž zbylé konce úseček jsou spojené standardní podmínkou $g_{1s}(0) = g_{2s}(0)$, $g'_{1s}(0) + g'_{2s}(0) = 0$. Protože spojení dvou úseček standardní podmínkou je ekvivalentní jedné dlouhé úsečce (není zde interakce, podmínka pouze předepisuje spojitost funkce a derivace), máme úsečku o délce 2ℓ s Dirichletovou podmínkou na obou koncích. Hamiltonián původního grafu se tedy pro antisymetrické funkce chová jako hamiltonián na dvou úsečkách délek ℓ s Dirichletovou podmínkou na okrajích a pro symetrické funkce jako hamiltonián na úsečce délky 2ℓ s Dirichletovou podmínkou na okrajích.

Z podprostoru antisymetrických funkcí tedy dostaneme vlastní čísla $(n\pi/\ell)^2$ s dvojnásobnou násobností a z podprostoru symetrických funkcí jednoduchá vlastní čísla $(n\pi/2\ell)^2$, $n \in \mathbb{N}$. Celý původní graf tedy má vlastní čísla $((2n-1)\pi/2\ell)^2$ s násobností 1 a $(n\pi/\ell)^2$, $n \in \mathbb{N}$ s násobností 3.

Obdobnou konstrukci bychom mohli provést ještě jednou pro úsečku o délce 2ℓ s Dirichletovou podmínkou na okrajích. S využitím symetrických a antisymetrických funkcí vzhledem k jejímu středu bychom dokázali, že hamiltonián na této úsečce je unitárně ekvivalentní hamiltoniánům na dvou úsečkách délky ℓ , jedna má Dirichletovy podmínky na obou okrajích a druhá Dirichletovu a Neumannovu podmínku.

6.2 Obecný postup při transformaci grafů

V této podsekcí si ukážeme obecný postup, jak transformovat definiční obor hamiltoniánu na grafu tak, abychom dostali jiný graf. Tato metoda vychází z [5], v tomto textu ji provedeme pro grafy se všemi hranami o délce $2\ell_0$. Budeme uvažovat takovýto graf se stejnými délkami hran. Nejdříve spojíme formálně všechny jeho vrcholy do jednoho vrcholu \mathcal{X}_1 a vazebné podmínky v tomto vrcholu popíšeme maticí $U^{(1)}$. Tato matice je zvolená tak, aby popisovala původní



Obrázek 14: Obrázek grafu k příkladu v podsekcí 6.2 – obecný postup při transformaci grafů.

vazebné podmínky ve vrcholech a zároveň topologii grafu. Matici $U^{(1)}$ vytvoříme tak, že sestavíme blokově diagonální matici s bloky tvořenými vazebnými maticemi ve vrcholech a poté „přeházíme“ řádky a sloupce této matice tak, aby prvním dvěma řádkům a prvním dvěma sloupcům odpovídaly konce první konečné hrany, poté následují oba konce druhé konečné hrany, atd., nakonec následují polopřímky. Dále zavedeme další vrcholy vždy uprostřed každé konečné hrany a spojíme je do vrcholu \mathcal{X}_2 . Vazbu v tomto vrcholu popíšeme unitární maticí $U^{(2)}$. Tato matice se obdrží podobně jako matice $U^{(1)}$. Dostaneme tak graf na obrázku 14, na který budeme aplikovat transformaci.

Transformace, která dává unitárně ekvivalentní hamiltonián se stejným spektrem a stejnou množinou rezolventních rezonancí je daná následující větou.

Věta 6.1. *Budeme uvažovat graf Γ se dvěma vrcholy, $2N$ hranami o délce ℓ_0 a M polopřímkami (viz obr. 14) s vazebnými podmínkami danými unitárními maticemi $U^{(1)}$ a $U^{(2)}$. Potom hamiltonián H na grafu Γ je unitárně ekvivalentní hamiltoniánu $H_{V,W}$ na topologicky stejném grafu s vazebnými podmínkami danými maticemi $U_{V,W}^{(1)} = \text{diag}(V^{-1}, W^{-1})U^{(1)}\text{diag}(V, W)$ a $U_V^{(2)} = V^{-1}U^{(2)}V$, kde V je libovolná $2N \times 2N$ unitární matice, W je libovolná $M \times M$ unitární matice a $\text{diag}(V, W)$ je blokově diagonální matice s bloky V a W .*

Důkaz. Označme komponenty vlnové funkce na vnitřních hranách grafu Γ v_j , $j = 1, \dots, 2N$ a na polopřímkách w_j , $j = 1, \dots, M$. Zobrazení

$$\begin{aligned} (p_1, \dots, p_{2N})^T &= V^{-1}(v_1, \dots, v_{2N})^T, \\ (q_1, \dots, q_M)^T &= W^{-1}(w_1, \dots, w_M)^T \end{aligned}$$

je bijekcí definičního oboru hamiltoniánu H na definiční obor hamiltoniánu $H_{V,W}$ (p_j jsou komponenty vlnové funkce na vnitřních hranách a q_j na polopřímkách). Lze jednoduše ověřit, že vazebné podmínky dané maticemi $U_{V,W}^{(1)}$ a $U_V^{(2)}$ přejdou v původní vazebné podmínky. \square

6.3 Příklady k samostatnému procvičování

Příklad 6.2. *Dokažte*

$$\int_0^\ell (|g_{1s}(x)|^2 + |g_{1a}(x)|^2) dx = \int_0^\ell (|f_1(x)|^2 + |f_3(x)|^2) dx.$$

Příklad 6.3. *Pomocí symetrizace a antisymetrizace najděte spektrum grafu z příkladu v podsekcí 4.3 (kružnice o délce ℓ).*

Návod: Zaveďte si dva vrcholy na opačných stranách kružnice a symetrizujte a antisymetrizujte podle osy dané jejich spojnicí.

6.4 Výsledky příkladů k samostatnému procvičování

6.2 Lze jednoduše dokázat dosazením definice g_{1s} a g_{1a} a následnou úpravou.

6.3 Vlastní čísla $\left(\frac{2\pi n}{\ell}\right)^2$ s násobností 2.

Použitá a doporučená literatura

- [1] BERKOLAIKO, G. An elementary introduction to quantum graphs *arXiv preprint*: math-ph:1603.07356, dostupné z www: <https://arxiv.org/abs/1603.07356>
- [2] BERKOLAIKO, G. AND KUCHMENT, P. *Introduction to Quantum Graphs* Mathematical Surveys and Monographs 186 AMS, 2013, 270 pp. ISBN 9780821892114
- [3] BRUN, T. A. The Stern-Gerlach experiment and spin. dostupné z www: <http://www-bcf.usc.edu/~tbrun/Course/lecture02.pdf>
- [4] CRESSER, J. D. Particle Spin and the Stern-Gerlach Experiment. dostupné z www: <http://physics.mq.edu.au/~jcresser/Phys301/Chapters/Chapter6.pdf>
- [5] DAVIES, E.B., EXNER, P., AND LIPOVSKÝ, J. Non-Weyl asymptotics for quantum graphs with general coupling conditions *J. Phys. A* **43** (2010), 474013
- [6] KUCHMENT, P. Quantum graphs I. Some basic structures *Waves in Random media* **14** (2004), S107–S128
- [7] KUCHMENT, P. Quantum graphs II. Some spectral properties of quantum and combinatorial graphs *J. Phys. A* **38** (2005), 4887–4900
- [8] LIPOVSKÝ, J. Rezonance v kvantových grafech *Čs. čas. fyz.* **64** (2014), no. 6., p. 353 – 356, dostupné z www: http://lide.uhk.cz/prf/ucitel/lipovji1/papers/rezonance_v_kvantovych_grafech-cs_cas_fyz14-preprint.pdf
- [9] LIPOVSKÝ, J. Quantum graphs and their resonance properties *Acta Physica Slovaca* **66** (2016), no. 4, p. 265 — 363
- [10] SAKURAI, J.J. AND NAPOLITANO, J. J. *Modern Quantum Mechanics* Addison-Wesley, 2011, 2nd edition, 550 pp. ISBN 978-0805382914
- [11] SKÁLA, L. *Úvod do kvantové mechaniky* Karolinum, 2012, 297 pp. ISBN 9788024620220
- [12] Stern–Gerlach experiment na anglické Wikipedii, dostupné z www: https://en.wikipedia.org/wiki/Stern%E2%80%93Gerlach_experiment.