

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Barry Simon

Oč vlastně jde v teorii Schrodingerových operátorů?

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 34 (1989), No. 6, 305--312

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/137850>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1989

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

Oč vlastně jde v teorii Schrödingerových operátorů?

Barry Simon, Pasadena, USA

Co je to vlastně teorie Schrödingerových operátorů? Krátce řečeno, je to matematicky přesné studium hamiltoniánů nerelativistické kvantové mechaniky.

Schrödingerovy operátory tvoří část matematické fyziky; jde o oblast, která zakouší obvyklý osud interdisciplinárních partií. Matematici si příliš často myslí, že je to fyzika a fyzici, že je to matematika. (Stejný problém má i chemická fyzika. Před mnoha lety na tom byla stejně i biochemie, ale v určitém smyslu to překonala, když do sebe absorbovala velkou část biologie.) Možná, že čtenář uvítá, že Schrödingerovy operátory mohou nabídnout užitečný pohled na fyziku i na matematiku.

V kvantové teorii hraje základní úlohu energie zapsaná jako funkce hybností a souřadnic, ale s tou zvláštností kvantové mechaniky (vzhledem k Heisenbergovým relacím neurčitosti

$$[p, x] = -i\hbar),$$

že hybnost p_j je nahrazena elementárním diferenciálním operátorem $-i\hbar \partial/\partial x_j$ (\hbar je „přeškrtnutá“ Planckova konstanta: $\hbar = h/2\pi$; zde jsem ještě pečlivě zapsal \hbar , ale kvůli typografické jednoduchosti budu nadále používat jednotky s $\hbar = 1$ a s hmotností elektronu rovnou $1/2$). Tedy pro klasický systém složený z N částic s hybnostmi p_j ($j = 1, \dots, m = 3N$ pro N vektorů hybnosti) a klasickou energií

$$\sum_{j=1}^m p_j^2 + V(x)$$

bude kvantovým hamiltoniánem operátor $H = -\Delta + V$, kde Laplaceův operátor Δ je roven $\sum_{j=1}^m \partial^2/\partial x_j^2$. Pro dynamiku kvantových systémů má hamiltonián H rozhodující význam, neboť vlnová funkce splňuje tzv. časovou Schrödingerovu rovnici

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H_t \psi_t.$$

V učebnicích fyziky se operátoru H říká hamiltonián, neboť představuje kvantovou analogii objektu zavedeného v klasické mechanice Williamem Hamiltonem. Stejný název se používá také pro kvantový operátor energie v relativistické kvantové teorii pole. Aby bylo zdůrazněno, že se zajímáme pouze o nerelativistický případ, budeme hamiltoniánům v nerelativistické kvantové mechanice říkat Schrödingerovy operátory. Jsou

BARRY SIMON: *The Theory of Schrödinger Operators: What's It All About?* Engineering and Science, May 1985, str. 20–25.

Přeložil a seznamem literatury doplnil PETR ŠEBA.

tak nazvány na počest Erwina Schrödingera, jednoho ze zakladatelů kvantové mechaniky*). Tedy teorie Schrödingerových operátorů je jednoduše studium diferenciálního operátoru $-\Delta + V$.

Na první pohled bychom si mohli myslet, že tak nevinně vypadající objekt nemůže mít příliš zajímavou strukturu. Totéž si ovšem můžeme myslet i o jeho klasickém analogu

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -\nabla V,$$

který je ale dostatečně bohatý na to, aby popsal tak rozdílné jevy jako je dynamika dvojhvězd nebo dynamika vody ve vodopádu. Schrödingerův operátor obdobným způsobem popisuje celou bohatost kvantové mechaniky. Třebaže výsledky týkající se obecného potenciálu V existují (možná, že bylo příliš mnoho prací o obecných a nedostatek o specifických třídách potenciálů), většina současného úsilí se zaměřuje na potenciály, které jsou relevantní pro atomovou a molekulární fyziku, pro popis dokonalých pevných látek nebo exotičtějších objektů jako jsou amorfní látky a kvazikrystaly. Zde chci popsat několik výsledků, které se týkají atomové fyziky a mohou dát představu o šíři a významu celé této oblasti.

První otázka, kterou si může matematik položit, se týká existence řešení časové Schrödingerovy rovnice

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H_t \psi_t.$$

Rádi bychom věděli, zda pro určitou rozumnou třídu potenciálů, která obsahuje potenciály popisující N elektronů pohybujících se v coulombickém poli M protonů fixovaných v bodech $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_M$ (protony jsou brány jako nekonečně těžké)

$$(1) \quad V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = - \sum_{\substack{1 \leq i \leq N \\ 1 \leq j \leq M}} |\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_j|^{-1} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^{-1} + \\ + \sum_{1 \leq i < j \leq M} |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|^{-1}$$

má časová Schrödingerova rovnice pro všechny počáteční podmínky (nebo alespoň pro velmi širokou třídu počátečních podmínek) jediné řešení.

Formálně je řešení dáno pomocí výrazu

$$\psi_t = \exp(-itH) \psi_0,$$

ale co znamená $\exp(-itH)$? Tento naivní přístup k řešení se jednoduše projeví jako nedostatečný, jestliže rozložíme exponenciálu a budeme studovat členy typu $\Delta^2 V \psi_0$, v nichž derivace V produkují neintegrabilní singularity. Studenti kvantové mechaniky se na poněkud složitější úrovni učí, že nemohou studovat kvantový pohyb částice v nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě, aniž by specifikovali okrajové podmínky. Ale odkud víme, že v nekonečnu nebo v coulombických singularitách potenciálu 1 nejsou k řešení Schrödingerovy rovnice okrajové podmínky potřeba?

K těmto otázkám existuje jedno stanovisko, o kterém je třeba se zmínit, že totiž ve

*) Odkazujeme na články R. ZAJACE a T. OBERTA: *Sto rokov od narodenia Erwina Schrödingera I, II*, Pokroky matematiky, fyziky a astronomie 32 (1987), 177—190, 241—250. (Pozn. překl.)

fyzikálních teoriích existenční důkazy nepotřebujeme, protože příroda sama je již existenční důkaz. Tento názor na přírodu jako na veliký analogový počítač pomíjí vlastní jádro existenčních důkazů: my přece neprověřujeme přírodu, ale naše teorie, které by mohly být špatné nebo neúplné. Jako vzorový příklad uveďme měnící se názor na kvantovou elektrodynamiku (QED). Když byla ve 40. letech tato teorie zformulována Feynmanem a Schwingerem, všeobecný názor byl, že impozantní souhlas s experimentem dokazuje, že tato teorie musí být konzistentní. Současné mínění teoretiků zabývajících se elementárními částicemi je úplně jiné. Jako abelovská kalibrační teorie je QED nejspíše matematicky nekonzistentní. Fyzici vysokých energií doufají, že konzistentní je neabelovská kalibrační teorie spojená se sjednoceným popisem elektromagnetické a slabé interakce. Souhlas s experimentem je způsoben tím, že formální poruchový rozklad nekonzistentní teorie se téměř neliší od rozkladu teorie, která konzistentní je.

Jako odezvu na vytvoření nové kvantové mechaniky (1925–28) vyvinul John von Neumann teorii neomezených operátorů v Hilbertově prostoru, která umožnila přesně pracovat se základními otázkami kvantové mechaniky. Von Neumann pochopil, že klíčem k řešení časové Schrödingerovy rovnice je důkaz, že hamiltonián H má těžko pochopitelnou matematickou vlastnost, které se říká podstatná samosdruženost*).

Zde se však pokrok v této problematice na 25 let zastavil mimo jiné proto, že von Neumann byl přesvědčen, že dokázat podstatnou samosdruženost operátoru $-\Delta + V$ s potenciálem V typu (1) je velice obtížný problém. Tento svůj názor se nezdráhal sdělit i ostatním. Skutečně, bylo mi řečeno, že ještě v 50. letech trval na tom, že tato úloha není triviální dokonce ani pro vodíkový atom. (Ovšem v tomto případě fyzici vědí, jak zapsat všechny vlastní funkce včetně spojitého spektra. Použijeme-li rotační symetrie vodíkového atomu, můžeme tento případ redukovat na obyčejnou diferenciální rovnici, kde byla samosdruženost úplně prostudována Hermannem Wylem již v roce 1912. Použijeme-li jeho metody, není těžké dokázat i podstatnou samosdruženost vodíkového atomu.) Je to ironické, neboť dvě základní složky, které se ukázaly být pro důkaz této důležité vlastnosti podstatné, jsou: abstraktní výsledek operátorové poruchové teorie dokázaný Franzem Rellichem v Německu v polovině 30. let a určité nerovnosti, známé dnes jako Sobolevovy nerovnosti, vyvinuté mj. Sergejem Sobolevem v Sovětském svazu a Salomonem Bochnerem ve Spojených státech v 30. letech. Obě tyto pomůcky byly k dispozici asi tak roku 1936, ale nikdo je nedal dohromady. Bylo to možná kvůli uvedenému von Neumannovu názoru, že problém je příliš složitý.

Podstatná samosdruženost atomových hamiltoniánů byla dokázána Tosiem Katem. Zde je popis postupu jeho práce převzatý z proslovu, který pronesl při převzetí Wienero-

*) Kvantový hamiltonián (Schrödingerův operátor) není plně určen pouze diferenciálním výrazem. Neméně důležitá je i znalost jeho *d. finičního oboru*. Pro popis dynamiky kvantových systémů jsou obě tyto složky Schrödingerových operátorů — diferenciální výraz a definiční obor — stejně důležité. Podstatná samosdruženost příslušného Schrödingerova operátoru pak znamená, že definiční obor (tj. obor všech „přípustných“ kvantových stavů) je zvolen tak, aby byla dynamika systému jednoznačně určena. Tak například podmínky „sešívání“ vlnové funkce při řešení Schrödingerovy rovnice s pravouhrou potenciálovou jámou (tj. že vlnová funkce a její první derivace musí být spojitě v bodech nespojivosti potenciálu) vyplývají právě z požadavku podstatné samosdruženosti odpovídajícího Schrödingerova operátoru. (Pozn. překl.)

vy ceny (byl publikován v listopadovém čísle „Notices of the American Mathematical Society“, 1980):

„Během druhé světové války jsem na japonském venkově pracoval na poruchové teorii a na spektrální teorii Schrödingerových operátorů. Tyto problémy jsem začal z vlastního popudu studovat již jako student fyziky, neboť, jak se zdálo, si jich nikdo nevšímal přes to, že existovaly základní principy dané von Neumannem. Moje prvořadá snaha byla zaměřena na důkaz podstatné samosdruženosti Schrödingerových operátorů a na položení matematického základu pro poruchovou teorii (v té době jsem Rellichovy práce neznal).

Tyto práce byly na konci války více méně hotové, ale s jejich publikací jsem velké štěstí neměl. O pár let později jsem dvě z nich poslal do Physical Review. Odtud byly brzy poslány do Transactions of the American Mathematical Society, kde rukopisy bezúspěšně putovaly od jednoho recenzenta k druhému a nakonec se ztratily. Musel jsem poslat nové rukopisy. Za tři roky od prvního podání byly tyto práce nakonec posledním recenzentem zachráněny.“

Je zajímavé, že obdoba Katoovy věty pro klasickou mechaniku je zatím otevřenou záležitostí. To znamená, že se můžeme ptát na globální (v čase) řešení Newtonových rovnic pro bodové hmotnosti interagující gravitačně nebo elektrostaticky. Dokonce ani v případě dvou těles nebude existovat takové globální řešení pro všechny počáteční podmínky, neboť v konečném čase může docházet ke srážkám. Ale ve dvoučásticovém případě může ke srážkám docházet pouze při počátečních podmínkách s nulovým momentem hybnosti. Proto pro skoro všechny počáteční podmínky má dvoučásticový problém globální řešení. Obdobné chování dokázal pro tříčásticový problém George Birkhoff (při použití výsledků Painlevého a Sundmana) v roce 1927 a pro čtyřčásticový problém Donald Saari v roce 1977. Pro $N \geq 5$ zůstává problém otevřený. Zde jsou určité náznaky nového jevu: existují počáteční podmínky, při kterých částice uběhne v konečném čase nekonečně dlouhou dráhu (nekonečně veliké rychlosti jsou umožněny dvojicemi částic, které se k sobě přibližují po spirále). Není ale jasné, zda to nastává pouze pro množinu počátečních podmínek míry nula. Na kvantový výsledek je možno pohlížet jako na indikaci toho, že i pro obecné N klasický problém pro většinu počátečních podmínek řešení má. Příčina, proč je kvantová mechanika „hezčí“ než klasická, spočívá v relacích neurčitosti, které jsou v tomto případě vyjádřeny pomocí Sobolevových nerovností.

Katoovu práci lze považovat za zrození moderní teorie Schrödingerových operátorů. Jakmile tento základní výsledek známe, můžeme začít klást celou řadu detailnějších otázek. Jedna z nejsubtilnějších zahrnuje oblast, které já osobně říkám „kvantová potenciálová teorie“, což je vlastně exaktní studium coulombických vazbových energií v kvantové mechanice.

Základním výsledkem kvantové potenciálové teorie je tzv. „stabilita hmoty“. Zde se řeší problém, který v 30. letech poprvé položil Lars Onsager, známý pro své práce o Isingově modelu a nerovnovážné termodynamice odměněné Nobelovou cenou za chemii. Základním astrofyzikálním faktem je, že v nepřítomnosti jaderných efektů proběhne u velkého množství hmoty gravitační kolaps. Onsager se ptal, zda veliké množství

hmoty neprodělá „elektrostatický kolaps“. Víme, že kvantová mechanika vede ke stabilitě systému jednoho elektronu a jednoho protonu. V klasické mechanice by se elektron zřítíl na proton, zatímco v kvantové mechanice k tomu dojít nemůže. Z toho sice vyplývá, že systém 10^{26} protonů a 10^{26} elektronů nezkolabuje do nulové velikosti, ale rozhodně není a priori jasné, že takový soubor se ve skutečnosti nemůže zhroutit do velice malého objemu. Jednotlivé elektrostatické síly jsou ovšem mnohem silnější než gravitační, a proto, pokud by elektrostatický existoval, nastal by u mnohem menšího množství hmoty než gravitační kolaps. Pozorovali bychom ho tedy. Poněvadž ho však nepozorujeme, nedochází k němu. To však nevysvětluje, proč k němu nedochází a zda skutečnost, že k němu nedochází, je dána kvantovou mechanikou nebo elektrostatikou.

Brzy se zjistilo, že neexistence kolapsu je důsledkem toho, že vazbová energie velikých systémů částic je extenzivní veličinou, tj. že systém s potenciálem (1) má celkovou energii zdola omezenou číslem $-c(N + M)$, kde c je nějaká kladná konstanta. Že tomu tak skutečně je, dokázali poprvé Freeman Dyson a Andrew Lenard v roce 1967 [1]. V jejich článku je jeden překvapující aspekt: pro jejich důkaz je rozhodující, že elektrony jsou fermiony, tj. že splňují Pauliho vylučovací princip. Dnes víme, že právě to je podstatné. Kdyby elektrony a protony byly bosony, elektrostatický kolaps by existoval. Ačkoliv přesná velikost kolapsu není známa, je pravděpodobné, že v neutrálním případě $N = M$ by se objem zmenšil nepřímo úměrně páté odmocnině z N . Systém 10^{26} boseovských elektronů a protonů by tedy žil ve zlomku objemu jediného vodíkového atomu.

V kvantové potenciálové teorii se Pauliho princip projevuje důležitým způsobem i v kvalitativních vlastnostech. Na příklad v roce 1984 jsme spolu s Elliottem Liebem, Israelem M. Sigalem a Waltrem Thirringem ukázali, že počet elektronů $N(Z)$, které se mohou vázat na jádro náboje Z , roste se Z tak, že $N(Z)/Z$ konverguje k 1 [2]. Kdyby ale elektrony byly bosony, pak by, jak ukázali Lieb a Raphael Benguria, $N(Z)$ rostlo alespoň jako $1,21 \cdot Z$. V přírodě pozorovaný jev, že se nevyskytují záporné ionty s nábojem větším než 1, souvisí tedy podstatně s Pauliho principem.

Lieb a Lebowitz si uvědomili, že důležitým důsledkem Dysonovy-Lenardovy věty, kombinované navíc se studiem stínění, je existence termodynamiky velikých systémů, tj. že takové základní veličiny jako tlak mají v kvantové statistické mechanice coulombických systémů extenzivní charakter.

Výsledkem Dysona a Lenarda však příběh nekončí, protože konstanta c v jejich odhadu energie byla rovna přibližně 10^{14} rydbergů. *) Z tohoto odhadu plyne, že hmota by se sice nemohla nekonečně smrštit, ale mohla by se smrštit tak, že by vzdálenost mezi částicemi dosáhla velikosti kolem 10^{-14} Bohrova poloměru*), aniž by se přitom platnost Dysonovy-Lenardovy věty narušila. Obrovské číslo 10^{14} se v jejich důkazu vyskytuje částečně pro jeho složitost. Obětujeme-li kvůli humoru něco pravdy, pak můžeme říci, že jejich důkaz měl 14 kroků a v každém z nich se objevila chyba řádu 10: V roce 1975 se Liebovi a Thirringovi podařilo udělat v této věci dramatický obrat, když dostali (započítáme-li i některá pozdější zdokonalení jejich myšlenek) konstantu rovnou přibližně 20 rydbergům [3].

*) 1 rydberg (Ry) = 13,606 eV je přibližně roven vazbové energii 13,595 eV atomu vodíku; Bohrov poloměr $a_0 = 5,29 \cdot 10^{-11}$ m. (Pozn. překl.)

Fyzika, která je v Liebově-Thirringově důkazu obsažena, je docela poučná; snad stojí za to ji částečně popsat. V kvantové mechanice je dobře známa stará kvaziklasická aproximace zvaná Thomasova-Fermiho (TF) aproximace. Spolu s Liebem jsme v roce 1973 dokázali, že tato aproximace je přesná v limitě velikých Z v tom smyslu, že správně popisuje celkovou vazbovou energii a hustotu elektronů poblíž jádra. Nepopisuje však správně elektrony ve vnějších slupkách ani ionizační energie, které jsou důležité pro chemii. Kvantoví chemici se v 50. letech pokoušeli pomocí TF aproximace numericky počítat molekulární vazbové energie, ale žádnou vazbu nezjistili. Na to reagoval Edward Teller a v roce 1960 dokázal, že TF teorie k žádné molekulární vazbě nevede (spolu s Liebem jsme později důkaz ještě trochu doplnili, hlavně jsme dokázali existenci řešení TF rovnice, ale Tellerův důkaz se od přesného příliš nelišil). Se stabilitou hmoty je to tedy v TF teorii jednoduché: podle Tellerova výsledku je energie souboru protonů a elektronů vždy zdola omezena vazbovou energií izolovaných protonů a odpovídajícího počtu elektronů. Protože je možno ukázat, že v TF teorii může proton vázat pouze jeden záporný náboj, je v TF teorii vazebná energie N protonů a M elektronů omezena číslem cN , kde c je vazebná energie vodíku v TF aproximaci.

To dokázali Lieb a Thirring za použití svého zobecnění Sobolevových nerovností (Pauliho princip hrál roli právě v tomto kroku) a pomocí dodatečného triku, totiž že celková vazebná energie systému N protonů a M elektronů je zespodu omezena pomocí $-dM + TF'$, kde d je konstanta související s c a TF' je TF energie, ale v teorii se špatnou hodnotou h . Omezení

$$TF' \geq -c'N$$

vede tedy ke stabilitě hmoty.

Za jejich důkazem stojí v pravém slova smyslu opravdová fyzika. Stabilita je konstatování, že neexistuje kolaps. Tomuto kolapsu je zabráněno interakcí mezi vnitřky atomů a Tellerova věta není nic jiného nežli tvrzení, že se tyto vnitřky (které jsou pro velká Z popsány TF teorií) odpuzují. $Z = 1$ není ale veliké Z a tak není jasné, zda TF teorie je i v tomto případě použitelná. Liebův a Thirringův objev znamená, že budeme-li ochotni trochu obětovat konstanty, pak použitelná je.

Poslední příklad, který bych chtěl probrat, je poněkud techničtější ve svých detailech. Mimo jiné ukazuje, že když se doluje pyrit, může se objevit i zlato.

Naivní dvoučásticová teorie rozptylu selhává právě u coulombických potenciálů. Objeví se zde logaritmické chování v nekonečnu, se kterým je třeba se vypořádat. V časově závislé teorii to provedl John Dollard v roce 1964. Je ale typické, že matematici nejsou uspokojeni řešením jenom fyzikálně zajímavých případů, ale že chtějí vědět, kdy i modifikovaná teorie rozptylu selže. Tak vznikla literatura o rozptylové teorii pro potenciály ubývající v nekonečnu pomaleji nežli coulombický. Musím přiznat, že ačkoliv oprávněnost této oblasti uznávám, nezdá se mi být příliš zajímavá a přitažlivá. Když jsem na začátku 70. let začínal, tak další dva mladí a slibní matematictí fyzikové Rick Lavine a Jean Michael Combes nezávisle na sobě navrhovali studovat dalekodosa-hový rozptyl pomocí matematického aparátu, kterému se říká C^* -algebry. Nejen že tento problém sám o sobě byl málo zajímavý, ale já jsem byl navíc přesvědčen, že se tato metoda k jeho řešení nehodí. Protože jsem v té době byl neomaleným mladým mužem, neváhal jsem oběma, Lavinovi i Combesovi, říci, že maří čas. V určitém smyslu jsem měl pravdu.

Metodou C^* -algeber se v daném problému příliš daleko nepokročilo a dnes existují mnohem lepší způsoby, jak ho analyzovat. Naštěstí Lavine a Combes mne však neposlechli, a protože se oba dostali do technických potíží, byli nuceni vyvinout nové a překvapivé metody. Lavinovy nápady byly hlavním momentem v klíčovém objevu Erica Mourreho v roce 1979. Je zajímavé, že ačkoli se metody Lavina a Combeho zdají být bez vzájemné souvislosti, soudobé práce Petera Perryho a Arne Jensena ukázaly, že mezi Mourreho rozvinutím Lavinových myšlenek a Combesovou myšlenkou existuje vnitřní vazba.

Původně se Combesovy nápady objevily jako appendix k jeho článku o metodě C^* -algeber v dalekodosahovém rozptylu. Po zralé úvaze se však Combes rozhodl provést appendektomii, zahodit pacienta – jeho článek nikdy nevyšel – a věnovat se appendixu. V roce 1977 publikoval Combes dva články, ve kterých tento přístup rozvíjel. Jeden s Jeanem Aguilarem o dvoučásticovém rozptylu [4] a druhý s Ericem Balslevem o složitějším mnohačásticovém rozptylu [5]. Základním výsledkem této analýzy byl důkaz, že v atomech a některých soustavách mnoha částic se neobjevuje matematický patologický jev zvaný singularně spojitě spektrum. Já jsem krátce na to v několika článcích [6, 7] využil této metody ke studiu rezonancí a mechanismu, kterým se vnořená vlastní hodnota změní v rezonanci. Potom se o tuto metodu jako o praktický způsob výpočtu rezonancí začali zajímat kvantoví chemici a výpočtoví atomoví fyzici vedeni Johnem Nuttalem [8]. Významné práce o molekulárních rezonancích napsali také Bill McCurdy a Tom Resignio, kteří se tuto metodu naučili, když pracovali (jeden jako aspirant a druhý již po obhajobě) ve skupině profesora teoretické chemie Vince McKoye v Caltechu.

Jak uvidíme, základní úlohu v Aquilarově-Balslevově-Combesově teorii hraje analytický prodloužená dilatační grupa. Combes, který je Francouz, nazval metodu „dilatačně analytická“, což se později zkrátilo na „dilačně analytická“. Ale atomoví fyzici a kvantoví chemici, kteří nemají krasořečnické rádi, jí začali říkat „metoda komplexního škálování“, což je dnes všeobecně přijatý název.

Začneme s tím, že metodu popíšeme v případě vodíkového hamiltoniánu

$$H = -\Delta - 1/|r|.$$

jehož spektrum má spojitou část $[0, \infty)$ a diskrétní část s vlastními hodnotami $-(1/4)n^{-2}$; $n = 1, 2, \dots$. Po škálovací transformaci $r \rightarrow r e^\theta$ přejde H v

$$H(\theta) = -e^{-2\theta} \Delta - e^{-\theta} \frac{1}{|r|}.$$

Tento operátor má přirozené analytické prodloužení do komplexních θ

$$\theta = \varphi + i\eta; \quad (\varphi, \eta \text{ reálná čísla}).$$

Jaké spektrum má $H(\theta)$? Spojitá část spektra by měla pocházet od stavů lokalizovaných okolo nekonečna, kde $|r|^{-1}$ nehraje roli, tj. spojitě spektrum takového operátoru by mělo být stejné jako spektrum operátoru

$$-\exp(-2(\varphi + i\eta)) \cdot \Delta$$

(přesněji se to dá udělat pomocí Weylovy věty). Poněvadž tento operátor není nic jiného

než násobek Laplaceova operátoru, jeho spektrum je

$$\{e^{-2(\varphi+i\eta)} \cdot \alpha; \alpha \in [0, \infty)\} = \{e^{-2i\eta} \alpha; \alpha \in [0, \infty)\}.$$

Když se tedy mění η , spojité spektrum se odklání od reálné osy. Jiný důkaz ukazuje, že se diskrétní vlastní hodnoty $-\frac{1}{4}n^{-2}$ přitom nemění. Když se spojitá část spektra s rostoucím η otáčí dolů, mohou se sice objevit nové vlastní hodnoty, ale výhradně ze spojitého spektra. Naopak když $\eta \geq 0$ klesá k 0, žádná vlastní hodnota operátoru $H(\Theta)$ se nehýbe až na ty, které jsou zasaženy spojitým spektrem. Ty mohou být pohlceny a zmizet. Tyto nové vlastní hodnoty bychom samozřejmě spojili s rezonancemi. Ve vodíkovém hamiltoniánu se takové nové vlastní hodnoty neobjevují, ale pro mnohačásticový coulombický hamiltonián existuje podobná teorie:

$$H = T + V \quad \text{kinetická plus potenciální energie}$$

$$H(\Theta) = e^{-2\Theta}T + e^{-\Theta}V.$$

Spojité spektrum se nyní skládá z několika paprsků

$$\{t + e^{-2i\eta} \alpha; \alpha \in [0, \infty)\},$$

kde t jsou možné prahové energie systému. V tomto případě se objevují nové vlastní hodnoty operátoru $H(\Theta)$ a mohou být přesně vypočítány pomocí variační metody. Navíc matematicky přesná teorie rezonancí umožňuje rigorózní studium celé řady objektů. Mně se například podařilo dokázat konvergenci časově závislé poruchové teorie pro Augerovy stavy. Pomocí této teorie rozšířené na Starkovy hamiltoniány (Ira Herbst) se nám společně s Evensem Harrellem podařilo vytvořit z Oppenheimerovy-Lanczosovy formule pro hlavní asymptotiku Starkových rezonancí matematickou větu.

Co tedy vlastně teorie Schrödingerových operátorů dokázala? Přispěla příležitostně do jiných částí fyziky, zvláště do takových, jako je teorie rezonancí nebo teorie náhodných příměsí, kde matematické jemnosti dostávají skutečný fyzikální význam. Z vedlejších výsledků důležitých pro matematiku jmenujme alespoň dvě oblasti: teorie operátorů, zvláště spektrální analýza, a teorie dráhového integrálu byly důležitým způsobem osvětleny právě teorií Schrödingerových operátorů. Konečně je zde vnitřní dynamika spojená s intelektuální poctivostí – co všechno může a nemůže být rigorózně vysvětleno z prvních principů, jestliže začneme se základním formalismem nerelativistické kvantové mechaniky. Výsledkem je teorie nečekané krásy s vnitřními vazbami k celé řadě aspektů matematické a teoretické fyziky.

Literatura

- [1] J. DYSON, A. LENARD: *J. Math. Phys.* 8 (1967) 423.
- [2] E. H. LIEB, I. M. SIGAL, B. SIMON, W. THIRRING: *Phys. Rev. Lett.* 52 (1984) 994.
- [3] E. H. LIEB, W. THIRRING: *Phys. Rev. Lett.* 35 (1975) 687.
- [4] J. AGUILAR, J. COMBES: *Comm. Math. Phys.* 22 (1971) 269.
- [5] E. BALSLEV, J. COMBES: *Comm. Math. Phys.* 22 (1971) 280.
- [6] B. SIMON: *Ann. Math.* 97 (1973) 247.
- [7] B. SIMON: *Comm. Math. Phys.* 27 (1972) 1.
- [8] Y. K. HO: *Phys. Rep.* 99 (1983) 1.