Jednočestični Schrödingerovi operatori

Novak, Valentino

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK

Valentino Novak

JEDNOČESTIČNI SCHRÖDINGEROVI OPERATORI

Diplomski rad

Voditelj rada:
doc. dr. sc. Marko Erceg

Zagreb, 2021.

Ovaj diplomski rad obranjen je dana ____________________ pred ispitnim povjerenstvom u sastavu:

1. ____________________________, predsjednik
2. ____________________________, član
3. ____________________________, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom _______________.

Potpisi članova povjerenstva:

1. ____________________________
2. ____________________________
3. ____________________________

Roditeljima, Dei i Franu

Sadržaj

Uvod

Kvantna mehanika je fundamentalna teorija kojom opisujemo ponašanje čestica na atomskoj i subatomskoj razini. Prije pojave kvantne mehanike, matematika koja se koristila u fizici uglavnom se bazirala na matematičkoj analizi, diferencijalnim i parcijalnim diferencijalnim jednadžbama. Prva kompletna matematička formulacija kvantne mehanike, koja se i danas koristi, zasniva se na Dirac-von Neumannovim aksiomima i obično se pripisuje knjizi Johna von Neumanna iz 1932., *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. U von Neumannovoj formulaciji kvantne mehanike, stanja kvantnog sustava reprezentirana su vektorima ψ, koji pripadaju separabilnom kompleksnom Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$. Zbog vjerojatnosne interpretacije, vektor ψ se najčešće normalizira obzirom na skalarni produkt, preciznije $\langle\psi, \psi\rangle = 1$. Točan odabir Hilbertovog prostora ovisi o primjeni. Za opis položaja i količine gibanja obično se uzima Hilbertov prostor kompleksnih kvadratno integrabilnih funkcija L^2. Fizikalne veličine koje možemo mjeriti (položaj, količina gibanja, energija) reprezentiramo samoadjungiranim operatorima koji djeluju na Hilberotovom prostoru $\mathcal{H}$. Ako se kvantni sustav nalazi u stanju ψ, tada su mogući rezultati mjerenja svojstvene vrijednosti operatora A, pa je prirodno zahtijevati da su sve svojstvene vrijednosti realne. Vremenska evolucija kvantnog sustava dana je Schördingerovom jednadžbom

$$i\frac{d}{dt}\psi(t) = H\psi(t).$$

Operator H nazivamo Hamiltonijan i predstavlja ukupnu energiju sustava. Formalno, vremensku evoluciju proučavamo u sklopu teorije polugrupa [4]. Cilj ovog rada jest prezentirati kratak pregled teorije neograničenih samoadjungiranih operatora i primjena rezultata na operator koji modelira atom vodika.

U prvom poglavlju dajemo kratak pregled postulata kvantne mehanike i bavimo se općenitom teorijom samoadjungiranih operatora na beskonačno dimenzionalnom Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$, a detalji se mogu pronaći u knjigama [6, 5]. Kao primjere neograničenih samoadjunigranih operatora dajemo operator položaja i operator količine gibanja.

U drugom poglavlju dajemo kratak pregled spektralne teorije i kao glavni rezultat bez dokaza iznosimo Spektralni teorem za neograničene operatore. Na kraju poglavlja se kratko bavimo vremenskom evolucijom Schrödingerove jednadžbe i iznosimo rezultat poznat kao Stoneov teorem. Dokazi i dodatna pojašnjenja ovog poglavlja mogu se pronaći u knjizi [6].

Posljednje poglavlje počinjemo glavnim rezultatima Fourierove pretvorbe na L^2 i definiramo Soboljevljeve prostore (posebno prostor H^2) koji će nam biti važni za definiranje domene operatora koji modelira atom vodika. Nakon toga dajemo kratak pregled teorije perturbacija za samoadjungirane operatore i kao glavni rezultat dokazujemo Kato-Rellichov teorem. Na samom kraju, koristeći Kato-Rellichov teorem, pokazujemo da je operator koji modelira atom vodika samoadjungiran, te dajemo karakterizaciju spektra.

Poglavlje 1

Neomeđeni operatori u kvantnoj mehanici

1.1 Kvantna mehanika

U kvantnoj mehanici, čestice opisujemo pomoću kompleksne valne funkcije

$$\psi(x,t), \quad (x,t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R},$$

gdje x predstavlja položaj u prostoru, a t predstavlja vrijeme. Funkciju $\rho_t(x) = |\psi(x,t)|^2$ interpretiramo kao vjerojatnosnu gustoću razdiobe pronalaska čestice u trenutku t. Dakle, zahtijevamo da je valna funkcija ψ normalizirana

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x,t)|^2 dx = 1, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Položaj čestice se zbog vjerojatnosne interpretacije može definirati kao slučajna varijabla čije je očekivanje dano s

$$\mathbb{E}_\psi(x) = \int_{\mathbb{R}^3} x|\psi(x,t)|^2 dx.$$

U praksi nije moguće direktno mjeriti x, već se mogu mjeriti određene funkcije od x. Na primjer moguće je provjeriti nalazi li se čestica u području Ω (npr. rezolucija detektora). Tada je očekivanje dano s

$$\mathbb{E}_\psi(\mathbb{1}_\Omega) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbb{1}_\Omega(x)|\psi(x,t)|^2 = \int_\Omega |\psi(x,t)|^2 dx,$$

odnosno gornji izraz odgovara vjerojatnosti da se čestica nađe u skupu $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ u trenutku t. Važno je primijetiti da se za razliku od klasične mehanike čestica ne može lokalizirati u točki, već je varijanca $\Delta_\psi(x)^2 = \mathbb{E}_\psi(x^2) - \mathbb{E}_\psi(x)^2$ uvijek različita od nula.

Konfiguracijski prostor kvantne mehanike je kompleksan separabilan Hilbertov prostor $\mathcal{H}$, te su moguća stanja reprezentirana s elementima ψ norme 1, $\|\psi\| = 1$.

Položaj čestice i količina gibanja (svojstva koja možemo mjeriti) opisuju se linearnim operatorom A definiranim na $\mathcal{H}$. Ako se sustav nalazi u stanju ψ očekivanje od A definirano je s

$$\mathbb{E}_{\psi}(A) = \langle \psi, A\psi \rangle = \langle A\psi, \psi \rangle, \tag{1.1}$$

gdje je $\langle ., . \rangle$ skalarni produkt na $\mathcal{H}$ za koji u ovom radu uvijek uzimamo da je antilinearan po prvom argumentu. Normu induciranu skalarnim produktom označit ćemo s $\| \cdot \|$.

Htjeli bismo moći računati (1.1) za svaki $\psi \in \mathcal{H}$. Međutim, takva definicija nije dobra jer je na neograničenim domenama moguće naći kvadratno integrabilne funkcije ψ takve da $A\psi$ nije kvadratno integrabilna. Zbog toga će operator A biti definiran na nekom podskupu $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H}$, kojeg ćemo zvati domena operatora A. Želimo da je operator A definiran barem za gotovo svako stanje, pa zahtijevamo da je skup $\mathcal{D}(A)$ gust u $\mathcal{H}$.

Promotrimo sada vremensku evoluciju kvantnog sustava. Neka je $\psi(0) = \psi_0$ početno stanje. Tada bi trebao postojati jedinstven $\psi(t)$ koji reprezentira stanje sustava u trenutku $t \in \mathbb{R}$. Pisat ćemo

$$\psi(t) = U(t)\psi(0) = U(t)\psi_0.$$

Iz fizikalnih eksperimenata slijedi superpozicija stanja, preciznije za $\psi_0^1, \psi_0^2 \in \mathcal{H}$ i $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}, |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$, vrijedi

$$U(t)\Big(\alpha_1\psi_0^1 + \alpha_2\psi_0^2\Big) = \alpha_1 U(t)\psi_0^1 + \alpha_2 U(t)\psi_0^2.$$

Dakle, za svaki $t \in \mathbb{R}$, $U(t)$ je linearan operator. Nadalje, zbog $\|\psi(t)\| = 1$

$$\|U(t)\psi\| = \|\psi\|$$

pa je za svaki $t \in \mathbb{R}$ nužno $U(t)$ unitaran operator, to jest $U(t)^{-1} = U(t)^*$. Zbog pretpostavke jedinstvenosti rješenja inicijalnog problema, zahtijevamo da vrijedi

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

Familiju operatora $U(t)$ s prethodnim svojstvom nazivamo jednoparametarskom unitarnom grupom (Više se može pogledati u [4]). Nadalje, prirodno je pretpostaviti da je grupa neprekidna u jakoj operatorskoj topologiji

$$\lim_{t \to t_0} U(t)\psi = U(t_0)\psi, \qquad \psi \in \mathcal{H},$$

pa je dodatno nazivamo jako neprekidnom jednoparametarskom unitarnom grupom (C_0 - grupa), što je poseban slučaj C_0 polugrupe. Svaka C_0 grupa generirana je operatorom

$$H\psi = \lim_{t \to 0} \frac{i}{t}\Big(U(t)\psi - \psi\Big), \quad \mathcal{D}(H) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \,\middle|\, \text{Postoji } \lim_{t \to 0} \frac{i}{t}\Big(U(t)\psi - \psi\Big) \right\}. \tag{1.2}$$

Operator H nazivamo Hamiltonijan i predstavlja ukupnu energiju sustava. Ako je $\psi(0) \in \mathcal{D}(H)$, tada je $\psi(t)$ rješenje Schrödingerove jednadžbe

$$i\frac{d}{dt}\psi(t) = H\psi(t).$$

Spomenimo još Dirac-von Neumannove aksiome kvantne mehanike:

Aksiom 1. Konfiguracijski prostor kvantnog sustava je kompleksan separabilan Hilbertov prostor $\mathcal{H}$. Stanja kvantnog sustava reprezentirana su vektorima iz $\mathcal{H}$ norme 1.

Aksiom 2. Svojstva sustava koja možemo mjeriti (položaj, količina gibanja) dani su linearnim operatorom A definiranim na maksimalnom gustom podskupu $\mathcal{D}(A)$ prostora $\mathcal{H}$.

Aksiom 3. Očekivanje mjerenja svojstva danog operatorom A, kada se sustav nalazi u stanju $\psi \in \mathcal{D}(A)$, dano je s (1.1), koje mora biti realan broj za svaki $\psi \in \mathcal{D}(A)$.

Aksiom 4. Vremenska evolucija je zadana preko C_0 grupe. Generator grupe odgovara ukupnoj energiji sustava.

1.2 Samoadjungirani operatori

Definicija 1.2.1. *Neka je $\mathcal{H}$ separabilan Hilbertov prostor. Linearan (neograničen) operator je linearno preslikavanje*

$$T : \mathcal{D}(T) \to \mathcal{H}$$

gdje je $\mathcal{D}(T)$ vektorski potprostor od $\mathcal{H}$.

Napomena 1.2.2. *Skup $\mathcal{D}(T)$ nazivamo* ***domena*** *operatora T. Ako je $\mathcal{D}(T)$ gust podskup prostora $\mathcal{H}$, kažemo da je gusto definiran. Kako ćemo u nastavku samo ovakve operatore razmatrati, ponekad ovo svojstvo operatora nećemo posebno isticati.*

Napomena 1.2.3. *Neograničene operatore shvaćamo kao „ne nužno ograničene", odnosno svaki ograničen operator je ujedno i neograničen.*

Primjer 1.2.4. *Operator množenja (operator položaja)*

$$\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}) = \left\{ f : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \,\middle|\, f \text{ izmjeriva}, \int |f(t)|^2 dt < \infty \right\},$$

$$(Qf)(t) := tf(t), \quad f \in \mathcal{D}(Q),$$

$$\text{gdje je } \mathcal{D}(Q) := \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}) \,\middle|\, \int t^2 |f(t)|^2 dt < \infty \right\}.$$

Najprije pokažimo da je $\mathcal{D}(Q)$ gust potprostor od $L^2(\mathbb{R})$. Neka je $f \in L^2(\mathbb{R})$ takav da

$$f \perp \mathcal{D}(Q).$$

Očito je
$$g(t) := \frac{1}{1+t^2} f \in \mathcal{D}(Q).$$
Naime,
$$\int_{\mathbb{R}} t^2 |g(t)|^2 dt = \int_{\mathbb{R}} \frac{t^2}{(1+t^2)^2} |f(t)|^2 dt \leq \int_{\mathbb{R}} |f(t)|^2 dt < \infty,$$
jer je $f \in L^2(\mathbb{R})$. Iz toga slijedi
$$f \perp \frac{1}{1+t^2} f,$$
odnosno
$$\frac{1}{1+t^2} |f|^2 = 0 \text{ (g.s.)}.$$
Odavde dobivamo $\mathcal{D}(Q)^\perp = \left\{0\right\}$, čime smo pokazali da je $\mathcal{D}(Q)$ gust potprostor od $L^2(\mathbb{R})$.

Pokažimo da je operator neograničen. Neka je $\epsilon > 0$ proizvoljan. Za neki $n \in \mathbb{N}$ definiramo:
$$f_n(t) := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}, & n - \frac{\epsilon}{2} \leq t \leq n + \frac{\epsilon}{2}, \\ 0, & \text{inače.} \end{cases}$$
Računamo:
$$\|f_n\|^2_{L^2(\mathbb{R})} = \int_{\mathbb{R}} |f_n(t)|^2 dt = \int_{n-\frac{\epsilon}{2}}^{n+\frac{\epsilon}{2}} \frac{1}{\epsilon}\, dt = 1.$$
Pretpostavimo ga je Q ograničen. Tada postoji $c > 0$ takav da:
$$\|Qf_n\| \leq c\, \|f_n\|, \quad n \in \mathbb{N}.$$
Međutim, $\|f_n\| = 1$ za svaki $n \in \mathbb{N}$, dok
$$\|Qf_n\|^2 = \int_{\mathbb{R}} t^2 |f_n(t)|^2 dt = \int_{n-\frac{\epsilon}{2}}^{n+\frac{\epsilon}{2}} \frac{1}{\epsilon} t^2\, dt = \frac{1}{3\epsilon}\left(\left(n+\frac{\epsilon}{2}\right)^3 - \left(n-\frac{\epsilon}{2}\right)^3\right) = n^2 + \frac{1}{12}\epsilon^2.$$
neograničeno raste. Stoga takav c ne može postojati.

Definicija 1.2.5. *Neka je $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor, te neka su $T_1 : \mathcal{D}(T_1) \to \mathcal{H}, T_2 : \mathcal{D}(T_2) \to \mathcal{H}$ neograničeni operatori na $\mathcal{H}$. Ako imamo $\mathcal{D}(T_1) \subseteq \mathcal{D}(T_2)$ i za svaki $x \in \mathcal{D}(T_1)$ vrijedi $T_1 x = T_2 x$, tada T_2 zovemo* ***proširenje*** *od T_1 i pišemo $T_1 \subseteq T_2$.*

Napomena 1.2.6. *Domenu neograničenog operatora T želimo maksimalno proširiti (Aksiom 2), to jest definirati T na najvećem mogućem podskupu od $\mathcal{H}$.*

- Ako je operator T neprekidan na gustoj domeni, možemo ga jedinstveno proširiti do neprekidnog operatora na cijelom Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$. Naime, neka je $x \in \mathcal{H}$ proizvoljan. Tada zbog gustoće skupa $\mathcal{D}(T)$ postoji niz $(x_n)_n$ iz $\mathcal{D}(T)$ takav da $x_n \to x$ u $\mathcal{H}$. Konvergentan niz u Hilbertovom prostoru je Cauchyjev, odnosno za svaki $\epsilon > 0$ postoji $n_0 \in \mathbb{N}$ takav da
$$\left(\forall n, m \in \mathbb{N},\ n, m \geq n_0\right) \quad \|x_n - x_m\| < \epsilon.$$
Sada za $m, n \geq n_0$ imamo
$$\|Tx_n - Tx_m\| = \|T(x_n - x_m)\| \leq \|T\| \|x_n - x_m\| \leq \|T\| \epsilon,$$
pri čemo smo koristili da je T omeđen na $\mathcal{D}(T)$. Ovim vidimo da je $(Tx_n)_n$ Cauchyjev niz u Hilbertovom prostoru pa je i konvergentan. Stavimo $y := \lim_{n\to\infty} Tx_n$. Još je potrebno dokazati da je Tx dobro definiran, to jest da y ne ovisi o izboru niza $(x_n)_n$. Neka su $(x_n)_n, (x'_n)_n$ iz $\mathcal{H}$ takvi da $x_n \to x$ i $x'_n \to x$. $\|Tx_n - Tx'_n\| = \|T(x_n - x'_n)\| \leq \|T\| \|x_n - x'_n\| \to 0$. Dakle T je dobro definiran i $Tx = y$.

- Ako T nije ograničen, uz dodatan zahtjev konvergencije svih nizova $(Tx_n)_n \to y$ k istom $y \in \mathcal{H}$, operator T možemo proširiti.

Definicija 1.2.7. *Neka je $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor i $T : \mathcal{D}(T) \to \mathcal{H}$ neograničen operator. Skup*
$$\Gamma(T) := \left\{(x, Tx) \,\middle|\, x \in \mathcal{D}(T)\right\} \subseteq \mathcal{H} \times \mathcal{H}$$
*nazivamo **graf** operatora T. Ako je $\Gamma(T)$ zatvoren u $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$, tada kažemo da je T zatvoren.*

Definicija 1.2.8. *Operator T_1 je **zatvoriv** ako postoji operator T_2 takav da $T_1 \subseteq T_2$ i T_2 je zatvoren.*

Napomena 1.2.9. *Ako je operator T zatvoriv, njegovo najmanje zatvoreno proširenje u smislu Definicije 1.2.5 zovemo **zatvarač** od T i pišemo $\overline{T}$.*

Napomena 1.2.10. *Ekvivalentno, skup $\Gamma(T) \subseteq \mathcal{H} \times \mathcal{H}$ je zatvoren ako za svaki niz $(x_n, y_n)_n$ iz $\Gamma(T)$, takav da $x_n \to x$ i $y_n \to y$, vrijedi $(x, y) \in \Gamma(T)$. Kako je $x_n \in \mathcal{D}(T)$ i $y_n = Tx_n$, po Napomeni 1.2.6 moći ćemo T dodefinirati u x s $Tx = y$.*

Napomena 1.2.11. *Obično proširujemo operator T tako da pogledamo zatvorenje grafa $\Gamma(T) = \left\{(x, Tx) \in \mathcal{H}^2 \,\middle|\, x \in \mathcal{D}(T)\right\}$. Ako $(x_n, Tx_n) \to (x, y)$, možemo pokušati definirati $Tx := y$. Kako bi to bila dobra definicija, dovoljno je zbog linearnosti provjeriti da $(x_n, Tx_n) \to (0, y)$ povlači $y = 0$. U tom je slučaju operator T zatvoriv i vrijedi $\Gamma(\overline{T}) = \overline{\Gamma(T)}$. Dakle, dovoljan i nužan uvjet da T bude zatvoriv jest da skup $\overline{\Gamma(T)}$ predstavlja graf nekog operatora.*

Napomena 1.2.12. *Ako je $T : \mathcal{D}(T) \to \mathcal{H}$ zatvoren, tada je $\Gamma(T)$ zatvoren u $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$, pa je $\left(\Gamma(T), \langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{H}\times\mathcal{H}}\right)$ Hilbertov prostor. Posebno, tada je i $\left(\mathcal{D}(T), \langle\cdot,\cdot\rangle_{\Gamma(T)}\right)$ Hilbertov prostor, gdje je*

$$\langle x, y\rangle_{\Gamma(T)} = \langle x, y\rangle + \langle Tx, Ty\rangle, \quad x, y \in \mathcal{D}(T).$$

$\langle\cdot,\cdot\rangle_{\Gamma(T)}$ se naziva skalarni produkt grafa.

Definicija 1.2.13. *Neka je $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor, te neka je $T : \mathcal{D}(T) \to \mathcal{H}$ gusto definiran neograničen operator. Definiramo*

$$\mathcal{D}(T^*) = \left\{x \in \mathcal{H} \,\middle|\, \exists y \in \mathcal{H},\ \langle Tz, x\rangle = \langle z, y\rangle,\ z \in \mathcal{D}(T)\right\}.$$

Operator $T^* : \mathcal{D}(T^*) \to \mathcal{H}$, definiran s $T^*x := y$, zovemo ***adjungiranim*** *operatorom operatora T.*

Napomena 1.2.14. *Gustoća skupa $\mathcal{D}(T)$ nužna je kako bi operator T^* bio dobro definiran. Naime, neka su $y_1, y_2 \in \mathcal{H}$ takvi da za svaki $z \in \mathcal{D}(T)$ vrijedi*

$$\langle z, y_1\rangle = \langle Tz, x\rangle = \langle z, y_2\rangle,$$

tada je $\langle z, y_1 - y_2\rangle = 0$ za svaki $z \in \mathcal{D}(T)$, iz čega slijedi $y_1 = y_2$ ako i samo ako je $\mathcal{D}(T)$ gusta u $\mathcal{H}$.

Napomena 1.2.15. *Iz definicije se jednostavno vidi da je $\mathcal{D}(T^*)$ linearan potprostor od $\mathcal{H}$, te da je T^* linearan operator. Neka su $x_1, x_2, y_1, y_2 \in \mathcal{H}$ takvi da*

$$\langle Tz, x_1\rangle = \langle z, y_1\rangle \quad i \quad \langle Tz, x_2\rangle = \langle z, y_2\rangle, \quad z \in \mathcal{D}(T).$$

Tada za svaki α_1, $\alpha_2 \in \mathbb{C}$ vrijedi

$$\begin{aligned}\langle Tz, \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2\rangle &= \alpha_1\langle Tz, x_1\rangle + \alpha_2\langle Tz, x_1\rangle \\ &= \alpha_1\langle z, y_1\rangle + \alpha_2\langle z, y_2\rangle \\ &= \langle z, \alpha_1 y_1 + \alpha_2 y_2\rangle.\end{aligned}$$

Kako je $\alpha_1 y_1 + \alpha_2 y_2 \in \mathcal{H}$, slijedi $(\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2) \in \mathcal{D}(T^*)$, odnosno $\mathcal{D}(T^*)$ je linearan potprostor od $\mathcal{H}$.

Pokažimo da je operator T^* linearan. Uz oznake iz prethodno dokazanog vrijedi

$$\begin{aligned}\langle z, T^*(\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2)\rangle &= \langle Tz, \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2\rangle \\ &= \alpha_1\langle Tz, x_1\rangle + \alpha_2\langle Tz, x_2\rangle \\ &= \alpha_1\langle z, y_1\rangle + \alpha_2\langle z, y_2\rangle \\ &= \langle z, \alpha_1 y_1 + \alpha_2 y_2\rangle \\ &= \langle z, \alpha_1 T^*(x_1) + \alpha_2 T^*(x_2)\rangle.\end{aligned}$$

Zbog gustoće skupa $\mathcal{D}(T)$ i proizvoljnosti $z \in \mathcal{D}(T)$ slijedi $T^*(\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2) = \alpha_1 T^*(x_1) + \alpha_2 T^*(x_2)$.

Napomena 1.2.16. *Za definirani operator T^* očito vrijedi:*

$$(\forall z \in \mathcal{D}(T))\,(\forall x \in \mathcal{D}(T^*)) \quad \langle Tz, x\rangle = \langle z, T^* x\rangle.$$

Napomena 1.2.17. *Prema Rieszovom teoremu o reprezentaciji ekvivalentno smo mogli definirati skup $\mathcal{D}(T^*)$ kao skup svih $x \in \mathcal{H}$ za koje je $z \mapsto \langle Tz, x\rangle$ neprekidan linearan funkcional s $\mathcal{D}(T)$ u $\mathbb{C}$. Naime, tada se taj funkcional može jedinstveno proširiti do neprekidnog funkcionala na $\mathcal{H}$ (Napomena 1.2.6), pa je postojanje vektora $y \in \mathcal{H}$ (u terminima definicije 1.2.13) osigurano po Rieszovom teoremu o reprezentaciji.*

Propozicija 1.2.18. *Ako su T_1 i T_2 neograničeni operatori i T_2 je proširenje od T_1, tada je T_1^* proširenje od T_2^*, to jest $T_1 \subseteq T_2 \Rightarrow T_2^* \subseteq T_1^*$.*

Dokaz. Neka je $x \in \mathcal{D}(T_2^*)$, tada postoji $y \in \mathcal{H}$ takav da

$$\langle T_2 z, x\rangle = \langle z, y\rangle, \quad z \in \mathcal{D}(T_2).$$

Kako je $\mathcal{D}(T_2) \supseteq \mathcal{D}(T_1)$ slijedi

$$\langle T_1 z, x\rangle = \langle z, y\rangle, \quad z \in \mathcal{D}(T_1),$$

odnosno $x \in \mathcal{D}(T_1^*)$. □

Propozicija 1.2.19. *Neka su A i B proizvoljni operatori. Tada vrijedi $(\alpha A)^* = \overline{\alpha} A^*$ i $A^* + B^* \subseteq (A+B)^*$, gdje je $\mathcal{D}(A^* + B^*) = \mathcal{D}(A^*) \cap \mathcal{D}(B^*)$. Ako je barem jedan od operatora ograničen, tada vrijedi $A^* + B^* = (A+B)^*$.*

Dokaz. Dokažimo najprije $\overline{\alpha} A^* \subseteq (\alpha A)^*$. Neka je $x \in \mathcal{D}(\overline{\alpha} A^*) = \mathcal{D}(A^*)$ i neka je $z \in \mathcal{D}(A)$.

$$\Big\langle (\alpha A) z, x \Big\rangle = \overline{\alpha} \Big\langle Az, x \Big\rangle = \overline{\alpha} \Big\langle z, A^* x \Big\rangle = \Big\langle z, \overline{\alpha} A^* x \Big\rangle.$$

Čime smo dobili $x \in \mathcal{D}\Big((\alpha A)^*\Big)$ i $(\alpha A)^* x = \overline{\alpha} A^* x$. Dakle, $\overline{\alpha} A^* \subseteq (\alpha A)^*$. Kako već imamo $\overline{\alpha} A^* \subseteq (\alpha A)^*$, dovoljno je pokazati da vrijedi $\mathcal{D}\Big((\alpha A)^*\Big) \subseteq \mathcal{D}(\overline{\alpha} A^*)$. Neka je $x \in \mathcal{D}\Big((\alpha A)^*\Big)$ i neka je $z \in \mathcal{D}(A)$. Tada je

$$\Big\langle z, (\alpha A)^* x \Big\rangle = \Big\langle (\alpha A) z, x \Big\rangle = \overline{\alpha} \Big\langle Az, x \Big\rangle.$$

Kako jednakost vrijedi za svaki $z \in \mathcal{D}(A)$, zaključujemo $\mathcal{D}\Big((\alpha A)^*\Big) \subseteq \mathcal{D}(\overline{\alpha} A^*)$. Time konačno dobivamo $(\alpha A)^* = \overline{\alpha} A^*$.

Dokažimo $A^* + B^* \subseteq (A+B)^*$. Neka je $x \in \mathcal{D}(A^* + B^*) = \mathcal{D}(A^*) \cap \mathcal{D}(B^*)$ i neka je $z \in \mathcal{D}(A+B) = \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B)$.

$$\begin{aligned}\Big\langle (A+B)z, x\Big\rangle &= \Big\langle Az + Bz, x\Big\rangle \\ &= \Big\langle Az, x\Big\rangle + \Big\langle Bz, x\Big\rangle \\ &= \Big\langle z, A^*x\Big\rangle + \Big\langle z, B^*x\Big\rangle \\ &= \Big\langle z, (A^* + B^*)x\Big\rangle.\end{aligned}$$

Čime smo dobili $x \in \mathcal{D}\Big((A+B)^*\Big)$ i $(A+B)^*x = (A^* + B^*)x$. Dakle, $A^* + B^* \subseteq (A+B)^*$. Za dokaz druge inkluzije, dovoljno je prema prethodno dokazanom pokazati da vrijedi $\mathcal{D}\Big((A+B)^*\Big) \subseteq \mathcal{D}(A^* + B^*)$. Zbog simetričnosti tvrdnje, bez smanjenja općenitosti možemo pretpostaviti da je B ograničen. Neka je $x \in \mathcal{D}\Big((A+B)^*\Big)$ i neka je $z \in \mathcal{D}(A+B)$.

$$\begin{aligned}\Big\langle z, (A+B)^*x\Big\rangle &= \Big\langle (A+B)z, x\Big\rangle \\ &= \Big\langle Az + Bz, x\Big\rangle \\ &= \Big\langle Az, x\Big\rangle + \Big\langle Bz, x\Big\rangle \\ &= \Big\langle Az, x\Big\rangle + \Big\langle z, B^*x\Big\rangle,\end{aligned}$$

pri čemu smo u posljednjoj jednakosti koristili da je B^* također omeđen, pa onda i svugdje definiran. Time dobivamo

$$\Big\langle Az, x\Big\rangle = \Big\langle z, (A+B)^*x\Big\rangle - \Big\langle z, B^*x\Big\rangle = \Big\langle z, \Big((A+B)^* - B^*\Big)x\Big\rangle.$$

Kako jednakost vrijedi za svaki $z \in \mathcal{D}(A+B)$, zaključujemo $\mathcal{D}\Big((A+B)^*\Big) \subseteq \mathcal{D}(A^* + B^*)$. Time konačno dobivamo $A^* + B^* = (A+B)^*$, čime je propozicija dokazana. □

Teorem 1.2.20. *Neka je T gusto definiran operator na Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$. Tada vrijedi*

(a) T^* je zatvoren.

(b) T je zatvoriv ako i samo je $\mathcal{D}(T^*)$ gust u $\mathcal{H}$, i tada vrijedi $\overline{T} = T^{**}$.

(c) Ako je T zatvoriv, tada $(\overline{T})^* = T^*$.

Dokaz. Definiramo unitaran operator V na $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ formulom:

$$V(x, y) = (-y, x).$$

Kako je V unitaran, $V(E^{\perp}) = \big(V(E)\big)^{\perp}$ za svaki potprostor E.

Neka je T linearan operator na $\mathcal{H}$, te neka je $(x, y) \in \mathcal{H} \times \mathcal{H}$. Tada je $(x, y) \in V(\Gamma(T))^{\perp}$ ako i samo ako $\big(\forall z \in \mathcal{D}(T)\big)$ $\big\langle(-Tz, z), (x, y)\big\rangle_{\mathcal{H}\times\mathcal{H}} = 0$. Kako je $\big\langle(u_1, v_1), (u_2, v_2)\big\rangle_{\mathcal{H}\times\mathcal{H}} = \big\langle u_1, u_2\big\rangle_{\mathcal{H}} + \big\langle v_1, v_2\big\rangle_{\mathcal{H}}$, gornje vrijedi ako i samo ako $\big(\forall z \in \mathcal{D}(T)\big)$ $\langle Tz, x\rangle = \langle z, y\rangle$, odnosno ako i samo ako $(x, y) \in \Gamma(T^*)$. Dakle $\Gamma(T^*) = V\big(\Gamma(T)\big)^{\perp}$. Kako je $V\big(\Gamma(T)\big)^{\perp}$ zatvoren potprostor $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$, T^* je zatvoren.

Kako bismo dokazali (b), primijetimo da je $\Gamma(T)$ potprostor od $\mathcal{H}\times\mathcal{H}$, te da je $V^2 = -I$ (pa je za $E \subseteq \mathcal{H} \times \mathcal{H}$, $V^2(E^{\perp}) = E^{\perp}$, jer je $E^{\perp}$ vektorski potprostor). Vrijedi

$$\begin{aligned}\overline{\Gamma(T)} &= \big(\Gamma(T)^{\perp}\big)^{\perp}\\ &= \Big(V^2\big(\Gamma(T)^{\perp}\big)\Big)^{\perp}\\ &= \Big(V\big(V\Gamma(T)\big)^{\perp}\Big)^{\perp}\\ &= \big(V\Gamma(T^*)\big)^{\perp},\end{aligned}$$

pri čemu smo u trećoj jednakosti koristili $V(E^{\perp}) = \big(V(E)\big)^{\perp}$, a u posljednjoj prethodno dokazanu tvrdnju. Prema dokazanom u (a), ako je $\mathcal{D}(T^*)$ gust podskup, operator T^{**} je dobro definiran i vrijedi $\Gamma(T^{**}) = V\big(\Gamma(T^*)\big)^{\perp} = \overline{\Gamma(T)} = \Gamma(\overline{T})$. Dakle T je zatvoriv i vrijedi $\overline{T} = T^{**}$.

Pretpostavimo da $\mathcal{D}(T^*)$ nije gust i da je $\psi \in \mathcal{D}(T^*)^{\perp}$. Tada je uređeni par $(\psi, 0) \in \Gamma(T^*)^{\perp}$, odnosno $V\Gamma(T^*)^{\perp}$ nije graf operatora (kada bi bio, operator bi u točki 0 imao dvije vrijednosti: 0 i ψ). Međutim $\overline{\Gamma(T)} = \big(V\Gamma(T^*)\big)^{\perp}$, pa T nije zatvoriv (vidi Napomenu 1.2.11).

Da bismo dokazali (c), primijetimo ako je T zatvoriv:

$$T^* = \overline{(T^*)} = T^{***} = (\overline{T})^*,$$

čime je dokaz završen. □

Propozicija 1.2.21. *Neka je $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor, te neka je T neograničen operator na $\mathcal{H}$. Tada* $\mathrm{Im}(T)^{\perp} = \mathrm{Ker}(T^*)$.

Iz gornjeg slijedi $\mathcal{H} = \overline{\mathrm{Im}(T)} \oplus \mathrm{Ker}(T^*)$, pri čemu $\oplus$ označava ortogonalnu sumu.

Dokaz. Element $x \in \mathcal{H}$ pripada $\mathrm{Im}(T)^{\perp}$ ako i samo ako $\langle x, Ty\rangle = 0$, $\forall y \in \mathcal{D}(T)$, što vrijedi ako i samo ako $x \in \mathcal{D}(T^*)$ i $T^*x = 0$, odnosno $x \in \mathrm{Ker}(T^*)$. □

Jezgra zatvorenog operatora je uvijek zatvorena u $\mathcal{H}$, međutim to općenito ne vrijedi za sliku, čak i ako je operator ograničen.

Definicija 1.2.22. *Gusto definiran operator T na Hilbertovom prostoru je* ***simetričan*** *ako:*

$$\Big(\forall x, y \in \mathcal{D}(T)\Big) \quad \langle Tx, y\rangle = \langle x, Ty\rangle,$$

odnosno ako je $T \subseteq T^*$.

Napomena 1.2.23. *Očito za simetrične operatore očekivanje (1.1) poprima realne vrijednosti. Štoviše, može se pokazati da vrijedi i obrat, odnosno da je svojstvo simetričnosti nužno ([6, Lemma 2.1]). Time smo već sada po Aksiomu 3 suzili promatranu klasu operatora na simetrične operatore.*

Definicija 1.2.24. *Operator T nazivamo* ***samoadjungiran*** *ako $T = T^*$, to jest ako je T simetričan i $\mathcal{D}(T) = \mathcal{D}(T^*)$.*

Definicija 1.2.25. *Operator T nazivamo* ***esencijalno*** *samoadjungiran, ako je $\overline{T}$ samoadjungiran.*

Napomena 1.2.26. *Neka je T gusto definiran operator na Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$.*

(a) Simetričan operator je zatvoriv prema Teoremu 1.2.20, jer je $\mathcal{D}(T^*) \supseteq \mathcal{D}(T)$, pa je T^* gusto definiran.

(b) Ako je T simetričan, T^* je zatvoreno proširenje od T. Tada najmanje zatvoreno proširenje T^{**} od T mora biti sadržano u T^*. Preciznije,

ako je T simetričan:

$$T \subseteq T^{**} \subseteq T^*,$$

ako je T zatvoren simetričan operator:

$$T = T^{**} \subseteq T^*,$$

ako je T samoadjungiran operator:

$$T = T^{**} = T^*.$$

Vidimo da je zatvoren simetričan operator samoadjungiran ako i samo ako je T^* simetričan.

(c) Skup svih esencijalno samoadjungiranih operatora je pravi podskup skupa svih simetričnih operatora. Preciznije, postoje simetrični operatori koji nisu esencijalno samoadjungirani.

(d) *Samoadjungiran operator ne možemo netrivijalno proširiti do samoadjungiranog operatora. Naime neka su S i T samoadjungirani takvi da $S \subseteq T$. Tada po Propoziciji 1.2.18 $T = T^* \subseteq S^* = S$, odnosno $S = T$. Dakle, uz svojstvo samoadjungiranosti, jasno je kako protumačiti maksimalnu definiranost iz Aksioma 2.*

Teorem 1.2.27 (Osnovni kriterij samoadjungiranosti)**.** *Neka je T simetričan operator na Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$. Ekvivalentno je:*

(a) *T je samoadjungiran.*

(b) *T je zatvoren i $\mathrm{Ker}(T^* \pm iI) = \{0\}$.*

(c) $\mathrm{Im}(T \pm iI) = \mathcal{H}$.

Dokaz. $(a) \implies (b)$:

Pretpostavimo $T = T^*$. Tada je T zatvoren (jer je T^* zatvoren). Neka je $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, te neka je $x \in \mathcal{D}(T^* - \lambda I) = \mathcal{D}(T^*) = \mathcal{D}(T)$ po volji odabran takav da $(T^* - \lambda I)x = 0 = (T - \lambda I)x$. Sada imamo

$$\overline{\lambda}\langle x, x\rangle = \langle \lambda x, x\rangle = \langle Tx, x\rangle = \langle x, Tx\rangle = \lambda\langle x, x\rangle.$$

Prema pretpostavci $\overline{\lambda} - \lambda \neq 0$, pa mora vrijediti $\langle x, x\rangle = 0$, iz čega slijedi $x = 0$. Po proizvoljnosti od x zaključujemo $\mathrm{Ker}(T^* - \lambda I) = \{0\}$.

$(b) \implies (c)$:

Neka je $\mathrm{Ker}(T^* + iI) = \{0\}$ i pokažimo da je $\mathrm{Im}(T - iI) = \mathcal{H}$ (dokaz za $\mathrm{Im}(T + iI)$ ide analogno). Prema Propoziciji 1.2.21 vrijedi

$$\mathrm{Im}(T - iI)^{\perp} = \mathrm{Ker}\Big((T - iI)^*\Big).$$

Kako je I ograničen, prema Propoziciji 1.2.19 ($A = T$, $\alpha = -i$, $B = I$) dobivamo,

$$\mathrm{Ker}\Big((T - iI)^*\Big) = \mathrm{Ker}\Big(T^* - (iI)^*\Big) = \mathrm{Ker}(T^* + iI) = \{0\},$$

što povlači da je $\mathrm{Im}(T - iI)$ gust u $\mathcal{H}$. Preostalo je pokazati da je $\mathrm{Im}(T - iI)$ zatvoren. Neka je $(y_n)_n$ iz $\mathrm{Im}(T - iI)$, te neka $y_n \to y$ u $\mathcal{H}$. Pokažimo da je $y \in \mathrm{Im}(T - iI)$. Neka je $x_n \in \mathcal{D}(T)$ t.d. $(T - iI)x_n = y_n$, $n \in \mathbb{N}$. Primijetimo da za svaki $z \in \mathcal{D}(T - iI) = \mathcal{D}(T)$ vrijedi

$$\begin{aligned}
\|(T - iI)z\|^2 &= \langle (T - iI)z, (T - iI)z\rangle \\
&= \langle Tz, Tz\rangle + i\langle z, Tz\rangle - i\langle Tz, z\rangle + \langle z, z\rangle \\
&= \|Tz\|^2 + \|z\|^2,
\end{aligned}$$

pri čemu smo u posljednjoj jednakosti iskoristili da je T simetričan. Niz $(y_n)_n$ je posebno Cauchyjev, a iz

$$\|y_n - y_m\|^2 = \|(T - i)(x_n - x_m)\|^2 = \|T(x_n - x_m)\|^2 + \|x_n - x_m\|^2$$

vidimo i da su nizovi $(x_n)_n$ i $(Tx_n)_n$ Cauchyjevi. Tada postoje $x \in \mathcal{H}$ i $z \in \mathcal{H}$ takvi da $x_n \to x$ i $Tx_n \to z$ u $\mathcal{H}$. Zbog zatvorenosti operatora T dobivamo $x \in \mathcal{D}(T)$ i $Tx = z$. Konačno:

$$y = \lim_{n\to\infty} y_n = \lim_{n\to\infty}(T - iI)x_n = \lim_{n\to\infty} Tx_n - \lim_{n\to\infty} ix_n = z - ix = Tx - ix = (T - iI)x \in \mathrm{Im}(T - iI).$$

$(c) \implies (a)$: Neka je $x \in \mathcal{D}(T^*)$. Po pretpostavci postoji $y \in \mathcal{D}(T)$ takav da $(T - iI)y = (T^* - iI)x$. Kako je $\mathcal{D}(T) \subseteq \mathcal{D}(T^*)$, slijedi $x - y \in \mathcal{D}(T^*)$ i

$$(T^* - iI)(x - y) = 0.$$

Prema Propoziciji 1.2.21, iz $\mathrm{Im}(T+iI) = \mathcal{H}$ slijedi $\mathrm{Ker}(T^*-iI) = \{0\}$. Dakle, $x = y \in \mathcal{D}(T)$, čime je dokazano $\mathcal{D}(T^*) = \mathcal{D}(T)$, odnosno T je samoadjungiran. □

Korolar 1.2.28. *Neke je T simetričan operator na Hilbertovom prostoru. Ekvivalentno je:*

(a) *T je esencijalno samoadjungiran.*

(b) $\mathrm{Ker}(T^* \pm iI) = \{0\}$.

(c) $\overline{\mathrm{Im}(T \pm iI)} = \mathcal{H}$.

Napomena 1.2.29. *(a)* *Za zatvoren simetričan operator T vrijedi: T je samoadjungiran ako i samo ako* $\dim \mathrm{Ker}(T^* - \lambda I) = 0$*, za $\lambda = \pm i$.*

Preslikavanje $\lambda \mapsto$ $\dim \mathrm{Ker}(T^* - \lambda I)$ *je konstantno na gornjoj ($\mathbb{C}^+$) i donjoj ($\mathbb{C}^-$) kompleksnoj poluravnini.*

(b) *Moguća samoadjungirana proširenja simetričnog operatora T su u potpunosti karakterizirana* ***defektnim indeksima****:*

$$m := dim\,\mathrm{Ker}(T^* - iI) = \dim \mathrm{Im}(T + iI)^\perp$$
$$n := dim\,\mathrm{Ker}(T^* + iI) = \dim \mathrm{Im}(T - iI)^\perp$$

T je esencijalno samoadjungiran ako i samo ako $(m, n) = (0, 0)$. Operator T ima samoadjungirano proširenje ako i samo ako $(m, n) = (k, k)$ za neki $k \in \mathbb{N}$.

Deteljnije o defektnim indeksima može se naći u [6, Poglavlje 2.6].

Primjer 1.2.30. *(Operator položaja)*

Neka je $\mathcal{H} = L^2(I)$, gdje je $I \subseteq \mathbb{R}$. Definiramo operator:

$$T : \mathcal{D}(T) \to \mathcal{H}, \quad (Tf)(t) = tf(t).$$

Tada je $\mathcal{D}(T) := \left\{ f \in L^2(I) \,\middle|\, tf(t) \in L^2(I) \right\}$ domena operatora T. U Primjeru 1.2.4 smo vidjeli da je T gusto definiran i da je neomeđen. Domena adjungiranog operatora je dana s

$$\mathcal{D}(T^*) := \left\{ g \in \mathcal{H} \,\middle|\, \exists h \in \mathcal{H} : \langle Tf, g \rangle = \langle f, h \rangle,\ f \in \mathcal{D}(T) \right\}.$$

Želimo naći $g, h \in \mathcal{H}$ takve da za sve $f \in \mathcal{D}(T)$, $\langle Tf, g \rangle = \langle f, h \rangle$.

$$\int_I \overline{tf(t)}\, g(t)\, dt = \int_I \overline{f(t)}\, h(t)\, dt.$$

Iz prethodnog dobivamo

$$\int_I \overline{f(t)}\, [tg(t) - h(t)]\, dt = 0, \quad f \in \mathcal{D}(T).$$

Kako je $\mathcal{D}(T)$ gusta u $\mathcal{H}$ možemo odabrati $\overline{f(t)} = tg(t) - h(t)$, odnosno $tg(t) - h(t) = 0$ gotovo svuda s obzirom na Lebesgueovu mjeru. Dakle,

$$h(t) = tg(t).$$

Kako želimo da je $h \in \mathcal{H}$, nužno je $g \in \mathcal{D}(T)$. Sada možemo definirati

$$(T^* g)(t) := h(t).$$

Dakle, $\mathcal{D}(T) = \mathcal{D}(T^*)$ i $Tf = T^* f$, za sve $f \in \mathcal{D}(T)$. Konačno dobivamo $T = T^*$.

Primjer 1.2.31. *(Operator količine gibanja)*

Neka je $\mathcal{H} = L^2([0, 1])$. Definiramo operator

$$T : \mathcal{D}(T) \to \mathcal{H}, \quad (Tf)(t) = if'(t).$$

Definirajmo najprije domenu operatora T na „očit” način kako bi slika operatora bila sadržana u $\mathcal{H}$,

$$\mathcal{D}(T) := \left\{ f \in L^2([0, 1]) \,\middle|\, f \in C^1([0, 1]),\ f(0) = f(1) = 0 \right\}.$$

Pokažimo najprije da je za odabrane rubne uvjete operator simetričan. Za svaki $f, g \in \mathcal{D}(T)$

$$
\begin{aligned}
\langle Tf, g\rangle &= \int_0^1 \overline{if'(t)}\, g(t)\, dt \\
&= -i \int_0^1 \overline{f'(t)}\, g(t)\, dt \\
&= i \int_0^1 \overline{f(t)}\, g'(t)\, dt - i\, (\overline{f}\, g)\Big|_0^1 \\
&= \int_0^1 \overline{f(t)}\, ig'(t)\, dt \\
&= \int_0^1 \overline{f(t)}\, Tg(t)\, dt \\
&= \langle f, Tg\rangle.
\end{aligned}
$$

Gdje smo u trećoj jednakosti koristili parcijalnu integraciju, a u četvrtoj rubne uvjete na f *i* g. *Slijedi* $T \subseteq T^*$. *Pogledajmo što je* T^*. *Neka je* $g \in \mathcal{D}(T^*)$*, to jest postoji* h *takav da* $h = T^*g$ *za sve* $f \in \mathcal{D}(T)$ *i vrijedi*

$$
\int_0^1 \overline{g(t)}\, if'(t)\, dt = \langle g, Tf\rangle = \langle h, f\rangle = \int_0^1 \overline{h(t)}\, f(t)\, dt.
$$

A priori ne znamo je li g *diferencijabilna, što nam onemogućuje parcijalnom integracijom doći do zaključka kao u prošlom primjeru. Međutim,* h *je integrabilna čime je dobro definirana funkcija* $H(t) := \int_0^t h(s)\, ds$. *Ovako definirana* H *je apsolutno neprekidna (*$H \in AC([0, 1])$*). Tada,*

$$\begin{aligned}\int_0^1 \overline{h(t)}\, f(t)\, dt &= \int_0^1 \overline{H'(t)}\, f(t)\, dt \\ &= -\int_0^1 \overline{H(t)}\, f'(t)\, dt + \overline{H(1)}\, f(1) - \overline{H(0)}\, f(0) \\ &= -\int_0^1 \overline{H(t)}\, f'(t)\, dt.\end{aligned}$$

Iz čega slijedi

$$\int_0^1 f'(t)\, [i\,\overline{g(t)} + \overline{H(t)}]\, dt = 0, \quad \forall f \in \mathcal{D}(T).$$

Dakle,

$$i\,\overline{g} + \overline{H} \in \left\{f' \,\middle|\, f \in \mathcal{D}(T)\right\}^{\perp}.$$

Potrebno je odrediti prostor $\left\{f' \,\middle|\, f \in \mathcal{D}(T)\right\}^{\perp}$ *da možemo nešto zaključiti o funkciji g. Odredimo najprije prostor* $\left\{f' \,\middle|\, f \in \mathcal{D}(T)\right\}$*. Budući da vrijedi*

$$\int_0^1 f'(t)\, dt = f(1) - f(0) = 0,$$

slijedi

$$\left\{f' \,\middle|\, f \in \mathcal{D}(T)\right\} \subseteq \left\{h \in C([0,1]) \,\middle|\, \int_0^1 h(t)dt = 0\right\}.$$

Pokažimo da vrijedi jednakost. Neka je $h \in C([0,1])$ *po volji odabrana tako da vrijedi*

$$\int_0^1 h(t)dt = 0.$$

Definirajmo

$$f(x) := \int_0^x h(t)dt.$$

Očito je f klase C^1 *(*$f' = h$*), te imamo*

$$f(0) = \int_0^0 h(t)dt = 0$$

i

$$f(1) = \int_0^1 h(t)dt = 0,$$

gdje smo u posljednjoj jednakosti iskoristili pretpostavku na h. Dakle, $f \in \mathcal{D}(T)$*, pa iz* $f' = h$ *konačno slijedi*

$$\left\{f' \,\middle|\, f \in \mathcal{D}(T)\right\} = \left\{h \in C([0,1]) \,\middle|\, \int_0^1 h(t)dt = 0\right\}.$$

Sada se po gustoći može pokazati da vrijedi

$$\begin{aligned}\overline{\left\{f' \,\middle|\, f \in \mathcal{D}(T)\right\}} &= \overline{\left\{h \in C([0,1]) \,\middle|\, \int_0^1 h(t)dt = 0\right\}} \\ &= \overline{\left\{h \in L^2([0,1]) \,\middle|\, \langle 1, h\rangle = 0\right\}} \\ &= \left\{1\right\}^{\perp},\end{aligned}$$

gdje smo s 1 *označili konstantnu funkciju vrijednosti 1. Konačno imamo*

$$\begin{aligned}\left\{f' \,\middle|\, f \in \mathcal{D}(T)\right\}^{\perp} &= \overline{\left\{f' \,\middle|\, f \in \mathcal{D}(T)\right\}}^{\perp} \\ &= \left\{h \in L^2([0,1]) \,\middle|\, \langle 1, h\rangle = 0\right\}^{\perp} \\ &= \left\{1\right\}^{\perp\perp} \\ &= span\left\{1\right\}.\end{aligned}$$

Prethodni račun pokazuje da je $\overline{g}$ *apsolutno neprekidna i* $\overline{g} = i\overline{H} + const$*.*

Primijetimo da račun ne zahtijeva rubne uvjete na funkciju g i da smo pokazali

$$T^*g = h = H' = ig',$$

što je dobro definirano jer su apsolutno neprekidne funkcije derivabilne gotovo svuda. Konačno zaključujemo,

$$\mathcal{D}(T^*) \subseteq \left\{g \in L^2([0,1]) \,\middle|\, g \in AC([0,1]),\ g' \in L^2([0,1])\right\}. \tag{1.3}$$

Druga inkluzija se dobije direktno tako što isti račun provedemo za funkciju g iz skupa definiranog u (1.3)*. Posebno dobivamo da* T^* ***nije*** *samoadjungiran,* $\mathcal{D}(T) \subsetneq \mathcal{D}(T^*)$*.*

Kako je operator T *simetričan pa i zatvoriv, možemo izračunati njegov zatvarač* $\overline{T} = T^{**}$*, gdje je*

$$\mathcal{D}(\overline{T}) = \left\{f \in L^2([0,1]) \,\middle|\, f \in AC([0,1]),\ f' \in L^2([0,1]),\ f(0) = 0 = f(1)\right\}.$$

i $\overline{T}f = if'$. *Međutim operator* T^* *za razliku od* T *nije simetričan, jer* $T^{**} \subsetneq T^*$. *Nadalje niz inkluzija* $\overline{T} = T^{**} \subsetneq T^* = \overline{T}^*$ *pokazuje da* $\overline{T}$ *nije samoadjungiran, odnosno* T *nije esencijalno samoadjungiran.*

Da bismo odgovorili na pitanje postojanja samoadjungiranog proširenja, pogledat ćemo defektne indekse operatora T. *Kao što smo ranije vidjeli proširenjem operatora* T *na* T^* *ne dobivamo simetričan pa ni samoadjungiran operator.*

Pogledajmo defektni indeks $m = dim\,\mathrm{Ker}(T^* - iI)$. *Dobivamo svojstveni problem*

$$f \in \mathrm{Ker}(T^* - iI) \iff T^* f = if.$$

Rješenja svojstvenog problema su funkcije oblika ce^t, *za neku konstantu* c. *Dakle radi se o prostoru dimenzije* 1. *Analogno dobivamo* $n = dim\,\mathrm{Ker}(T^* + iI) = 1$. *Napomena 1.2.29 opravdava postojanje samoadjungiranog proširenja. Ranijim računom smo pokazali da micanjem rubnih uvjeta dobivamo operator čija je domena „prevelika”. Ideja proširenja operatora će biti naći optimalne rubne uvjete.*

Neka je S *samoadjungirano proširenje,*

$$\begin{aligned} i\int_0^1 \overline{f(t)}\, g'(t)\, dt &= \langle f, Sg\rangle \\ &= \langle Sf, g\rangle \\ &= -i\int_0^1 \overline{f'(t)}\, g(t)\, dt \\ &= i\int_0^1 \overline{f(t)}\, g'(t)\, dt - i\Big[\overline{f(1)}\, g(1) - \overline{f(0)}\, g(0)\Big]. \end{aligned}$$

Rubni uvjet $f(1) = 0 = f(0)$ *nije zahtijevao nikakve uvjete na funkciju* g. *Promotrimo rubni uvjet*

$$f(1) = \alpha f(0),\ g(1) = \alpha g(0), \quad \alpha \in S(0,1) = \Big\{z \in \mathbb{C} \,\Big|\, |z| = 1\Big\}.$$

Dobivamo,

$$\overline{f(1)}\, g(1) - \overline{f(0)}\, g(0) = |\alpha|\, \overline{f(0)}\, g(0) - \overline{f(0)}\, g(0) = 0.$$

Za svaki $\alpha \in S(0,1)$ *definiramo operator* T_α *s domenom*

$$\mathcal{D}(T_\alpha) := \Big\{f \in L^2([0,1]) \,\Big|\, f \in AC([0,1]),\ f' \in L^2([0,1]),\ f(1) = \alpha f(0)\Big\}.$$

i $T_\alpha f := if'$. Skup operatora $\left\{T_\alpha\right\}_\alpha$ sastoji se od međusobno različitih samoadjungiranih proširenja operatora T, koja su ujedno i jedina samoadjungirana proširenja. Možemo primijetiti da je skup proširenja jednoparametarski, što odgovara defektnim indeksima.

Poglavlje 2

Spektar i Spektralni teorem

2.1 Spektar

Ovo poglavlje ćemo započeti važnim teoremom o zatvorenom grafu i iznijeti glavne rezultate spektralne teorije. Osnovne informacije o spektru preuzete su iz [1, 6].

Teorem 2.1.1 (Zatvoreni graf)**.** *Neka su $\mathcal{H}_1$ i $\mathcal{H}_2$ Hilbertovi prostori i neka je $A : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ operator definiran na cijelom $\mathcal{H}_1$. Tada je A ograničen ako i samo ako je $\Gamma(A)$ zatvoren u $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$.*

Definicija 2.1.2. *Neka je A gusto definiran zatvoreni operator.* ***Rezolventni skup*** *operatora A je definiran s*

$$\rho(A) = \left\{ z \in \mathbb{C} \,\middle|\, (A - zI)^{-1} \in B(\mathcal{H}) \right\}.$$

Preciznije, $z \in \rho(A)$ ako i samo ako je $(A - zI) : \mathcal{D}(A) \to \mathcal{H}$ bijekcija i ima ograničen inverz.

Napomena 2.1.3. *Ako je operator A zatvoren, injektivan i $\overline{\operatorname{Im} A} = \mathcal{H}$, tada je A^{-1} zatvoren.*

Napomena 2.1.4. *Kako je operator A zatvoren, tada je i $A - zI$ zatvoren. Također, ako pretpostavimo da je $(A - zI) : \mathcal{D}(A) \to \mathcal{H}$ bijekcija, tada je prema prethodnoj napomeni $(A - zI)^{-1}$ zatvoren pa prema Teoremu 2.1.1 ($\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}$, $\mathcal{H}_2 = \mathcal{D}(A)$ uz skalarni produkt grafa), slijedi da je $(A - zI)^{-1}$ ograničen.*

Napomena 2.1.5. *Komplement rezolventnog skupa nazivamo* ***spektar****.*

$$\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A).$$

Definicija 2.1.6. *Neka je $\rho(A)$ rezolventni skup operatora A. Tada funkciju*

$$\begin{aligned} R_A : \rho(A) &\to B(\mathcal{H}) \\ z &\mapsto (A - zI)^{-1} \end{aligned}$$

*zovemo **rezolventa** od A.*

Propozicija 2.1.7. *Neka su $z, z' \in \rho(A)$, tada vrijedi **prva rezolventna formula***

$$R_A(z) - R_A(z') = (z - z')R_A(z)R_A(z') = (z - z')R_A(z')R_A(z).$$

Propozicija 2.1.8. *Neka je A gusto definiran. Ako je A injektivan i $\overline{\operatorname{Im} A} = \mathcal{H}$, tada je $(A^*)^{-1} = (A^{-1})^*$.*

Napomena 2.1.9. *Vrijedi sljedeća formula*

$$R_A(z)^* = \left((A - zI)^{-1}\right)^* = \left((A - zI)^*\right)^{-1} = (A^* - \overline{z}I)^{-1} = R_{A^*}(\overline{z}),$$

gdje smo u drugoj jednakosti koristili prethodnu propoziciju. Posebno,

$$\rho(A^*) = \rho(A)^*.$$

Definicija 2.1.10. *Neka je $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor i neka je $A : \mathcal{D}(A) \to \mathcal{H}$ zatvoren operator.*
***Točkovni spektar** operatora A je skup*

$$\sigma_p(A) := \left\{\lambda \in \mathbb{C} \,\middle|\, \left(\exists x \in \mathcal{H}, x \neq 0\right) Ax = \lambda x\right\}.$$

***Neprekidni spektar** operatora A je skup*

$$\sigma_c(A) := \left\{\lambda \in \mathbb{C} \,\middle|\, \lambda \notin \sigma_p(A),\ \overline{\operatorname{Im}(A - \lambda I)} = \mathcal{H},\ (A-\lambda I)^{-1} : \operatorname{Im}(A-\lambda I) \to \mathcal{D}(A) \text{ nije ograničen}\right\}.$$

***Rezidualni spektar** operatora A je skup*

$$\sigma_r(A) := \left\{\lambda \in \mathbb{C} \,\middle|\, \lambda \notin \sigma_p(A),\ \overline{\operatorname{Im}(A - \lambda I)} \neq \mathcal{H}\right\}.$$

Definicija 2.1.11. *Gusto definiran zatvoren operator $A : \mathcal{D}(A) \to \mathcal{H}$ zovemo **normalan** ako vrijedi $AA^* = A^*A$.*

Napomena 2.1.12. *(a) Navedeni skupovi u prethodnoj definiciji su disjunktni i vrijedi*

$$\sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_c(A) \cup \sigma_r(A).$$

(b) *U definiciji neprekidnog spektra nužno je zahtijevati da operator* $(A - \lambda I)^{-1}$ *nije ograničen. U suprotnom bismo ga mogli proširiti do ograničenog operatora na cijelom prostoru pa bi* λ *pripadala rezolventnom skupu operatora* A.

(c) *Neprekidni spektar se sastoji od kompleksnih brojeva* λ *za koje postoje* ***aproksimativne*** *svojstvene vrijednosti. Kako operator* $(A - \lambda I)^{-1} : \mathrm{Im}(T - \lambda I) \to \mathcal{D}(A)$ *nije ograničen, postoji niz* $(x_n)_n$ *iz* $\mathrm{Im}(A - \lambda I)$ *takav da*

$$\|x_n\| = 1, \quad \|(A - \lambda I)^{-1} x_n\| =: \alpha_n \to \infty.$$

Definiramo $y_n := \dfrac{1}{\alpha_n}(A - \lambda I)^{-1} x_n$. *Tada je* $\|y_n\| = 1$ *i vrijedi*

$$\|(A - \lambda I) y_n\| = \frac{1}{\alpha_n}\|x_n\| \to 0,$$

čime vidimo $Ay_n \approx \lambda y_n$.

(d) *Operatori koje proučavamo u ovom kontekstu obično imaju prazan rezidualni spektar. Preciznije, ako je* A *normalan operator tada je* $\sigma_r = \emptyset$.

(e) *Ako je* A *zatvoren simetričan operator, tada spektar operatora može biti:*

(i) $\sigma(A) = \mathbb{C}_0^+ = \left\{a + bi \,\middle|\, b \geq 0;\ a, b \in \mathbb{R}\right\}$,

(ii) $\sigma(A) = \mathbb{C}_0^- = \left\{a + bi \,\middle|\, b \leq 0;\ a, b \in \mathbb{R}\right\}$,

(iii) $\sigma(A) = \mathbb{C}$,

(iv) $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$,

i vrijedi $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$ *ako i samo ako je* A *samoadjungiran.*

Napomena 2.1.13. *Tvrdnja (e) prethodne Propozicije slijedi iz Teorema 1.2.27. Naime, za* $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$ *dobivamo da je* $\pm i$ *u rezolventnom skupu operatora* $A \pm iI$*, pa je*

$$\mathrm{Im}(A \pm iI) = \mathcal{H}.$$

Iz čega slijedi da je A *samoadjungiran. S druge strane, ako je* A *samoadjungiran za* $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$

$$\mathrm{Ker}(A^* - zI) = \{0\}, \quad \mathrm{Im}(A - zI) = \mathcal{H}.$$

Dakle, za $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ *slijedi* $z \in \rho(A)$*, pa je* $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$.

Napomena 2.1.14. *Iako već za simetričan operator* A *imamo* $\langle Ax, x\rangle \in \mathbb{R}$, $x \in \mathcal{D}(A)$ *(Aksiom 3), po Napomeni 2.1.12 (e) vidimo da nije nužno* $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$. *Dakle, ako* A *nije samoadjungiran, postoji* $y_n \in \mathcal{H}$, $\|y_n\| = 1$, *t.d.*

$$\langle Ay_n, y_n\rangle \approx \lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}.$$

Da izbjegnemo takvu nestabilnost, prirodno je dodatno tražiti da su promatrani operatori samoadjungirani. Ovaj izbor je dodatno opravdan Aksiomom 4 jer se može pokazati da je za njega nužno da je pripadni operator (generator C_0 *grupe) samoadjungiran.*

Definicija 2.1.15. ***Diskretan spektar*** $\sigma_d(A)$ *je skup svih izoliranih svojstvenih vrijednosti čiji je pripadajući svojstveni potprostor konačnodimenzionalan.*

Komplement diskretnog spektra zovemo ***esencijalni spektar*** $\sigma_{ess}(A) = \sigma(A) \setminus \sigma_d(A)$.

Napomena 2.1.16. *Svaka točka diskretnog spektra nalazi se i u točkovnom spektru, međutim obrat ne vrijedi.*

Neka je $\mathcal{H}$ *separabilan Hilbertov prostor s ONB* $(e_i)_{i\in\mathbb{N}}$. *Definiramo operator* $S : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ *(lijevi unilateralni šift).* S *na ONB djeluje s*

$$Se_0 = 0, \quad Se_i = e_{i-1}, \quad \forall i \in \mathbb{N}.$$

$\sigma_p(S) = K(0, 1)$, *pa je* $\sigma_d(S) = \emptyset \subsetneq \sigma_p(S)$, *jer* $K(0, 1)$ *nema izoliranih točaka.*

Izračun spektra unilateralnog šifta može se pogledati u [2, Zadatak 2.41.].

2.2 Spektralni teorem

Vremenska evolucija kvantnog sustava dana je Schrödingerovom jednadžbom

$$i\frac{d}{dt}\psi(t) = H\psi(t).$$

Ako je $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, odnosno ako je H matrica, ovakav sustav običnih diferencijalnih jednadžbi rješavamo eksponencijalnom funkcijom matrice

$$\psi(t) = e^{-itH}\psi(0).$$

Matrična funkcija se može definirati konvergentnim redom potencija

$$e^{-itH} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it)^n}{n!} H^n.$$

Za ovakav pristup bitno je da je H ograničen, što općenito nije slučaj. Pokazalo se da je najefektivniji način računanja eksponencijalne funkcije matrice i proučavanja dinamike sustava dijagonaliziranje operatora H. U ovom poglavlju promatramo kako dijagonalizirati samoadjungirani operator. Odgovor ćemo dati na kraju poglavlja takozvanim *Spektralnim teoremom*.

Najprije bismo željeli definirati kako računati funkcije samoadjungiranog operatora A tako da vrijede uobičajena pravila računanja s funkcijama. Preciznije, želimo da vrijedi

$$(f+g)(A) = f(A) + g(A), \quad (fg)(A) = f(A)g(A), \quad (f^*)(A) = f(A)^*.$$

Ovakva konstrukcija je jednostavna ako su f i g polinomi. Cilj će nam biti proširiti definiciju na funkcije koje su izmjerive s obzirom na Borelovu sigma algebru (Borelove funkcije). Da bismo definiciju od $f(A)$ proširili na širu klasu funkcija, koristit ćemo karakteristične funkcije $\mathbb{1}_\Omega(A)$ umjesto potencija operatora A. Kako je $\mathbb{1}_\Omega(\lambda)^2 = \mathbb{1}_\Omega(\lambda)$, operatori bi trebali biti ortogonalne projekcije. Također ćemo zahtijevati da vrijedi $\mathbb{1}_\mathbb{R}(A) = I$ i $\mathbb{1}_\Omega(A) = \sum_{j=1}^{n} \mathbb{1}_{\Omega_j}(A)$, gdje je $\Omega = \bigcup_{j=1}^{n} \Omega_j$ konačna unija disjunktnih skupova Ω_j. Prije nego što damo preciznu definiciju operatora $\mathbb{1}(A)$, promotrit ćemo operacije na familiji karakterističnih funkcija $\mathbb{1}_\Omega(A)$.

Definicija 2.2.1. *Neka je $\mathcal{B}$ Borelova sigma algebra nad $\mathbb{R}$. **Projektivna mjera** je preslikavanje*

$$P : \mathcal{B} \to B(\mathcal{H}), \qquad \Omega \mapsto P(\Omega)$$

s Borelovih skupova u skup ortogonalnih projekcija takvo da:

(i) $P(\mathbb{R}) = I$.

(ii) Ako je $\Omega = \bigcup_{n=1}^{\infty} \Omega_n$ *i* $\Omega_n \bigcap \Omega_m = \emptyset$ *za* $n \neq m$, *tada je* $\sum_{n=1}^{\infty} P(\Omega_n)\psi = P(\Omega)\psi$ *za svaki* $\psi \in \mathcal{H}$.

Napomena 2.2.2. *Omeđen operator $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ je ortogonalna projekcija ako vrijedi $A^* = A = A^2$.*

Primjer 2.2.3. *Neka je $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ i neka je $A \in Gl(n)$ simetrična regularna matrica. Neka su $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ međusobno različite svojstvene vrijednost i neka je P_j projekcija na odgovarajuće svojstvene potprostore. Tada je*

$$P_A(\Omega) = \sum_{\{j \mid \lambda_j \in \Omega\}} P_j$$

projektivna mjera. Naime, tvrdnja direktno slijedi iz činjenice da se za $A \in Gl(n)$ prostor $\mathbb{C}^n$ može napisati kao direktna (ortogonalna) suma svojstvenih potprostora.

Primjer 2.2.4. *Neka je $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ i neka je f realna izmjeriva funkcija. Tada je*

$$P_A(\Omega) = \mathbb{1}_{f^{-1}(\Omega)}$$

projektivna mjera. U ovom primjeru operator A odgovara množenju s karakterističnom funkcijom na skupu Ω.

$$P_A(\Omega) : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R}), \quad f \mapsto \mathbb{1}_\Omega f.$$

U ovom trenutku nije jasno kako općenitom operatoru A pridružiti projektivnu mjeru P_A, te je li to pridruživanje jednoznačno određeno. Konačan odgovor na ovo pitanje bit će dan Spektralnim teoremom, a prije toga promatramo još neka svojstva (općenitih) projektivnih mjera.

Propozicija 2.2.5. *Projektivna mjera P zadovoljava sljedeća svojstva:*

(a) $P(\emptyset) = 0$.

(b) $P(\mathbb{R} \setminus \Omega) = I - P(\Omega)$.

(c) $P(\Omega_1 \cup \Omega_2) + P(\Omega_1 \cap \Omega_2) = P(\Omega_1) + P(\Omega_2)$.

(d) $P(\Omega_1)P(\Omega_2) = P(\Omega_1 \cap \Omega_2)$.

(e) $\Omega_1 \subseteq \Omega_2 \implies P(\Omega_1) \leq P(\Omega_2)$.

Dokaz. Pokažimo tvrdnje (a) i (b). Prazan skup $\emptyset$ možemo napisati kao $\emptyset = \emptyset \cup \emptyset$. Koristeći svojstvo 2 iz Definicije 2.2.1 dobivamo

$$P(\emptyset) = P(\emptyset \cup \emptyset) = P(\emptyset) + P(\emptyset),$$

iz čega zaključujemo $P(\emptyset) = 0$, čime je dokazana tvrdnja (a). Za dokaz tvrdnje (b) korištenjem svojstva 1 i 2 iz Definicije 2.2.1 dobivamo

$$I = P(\mathbb{R}) = P\Big(\Omega \cup (\mathbb{R} \setminus \Omega)\Big) = P(\Omega) + P(\mathbb{R} \setminus \Omega),$$

odnosno, $P(\mathbb{R} \setminus \Omega) = I - P(\Omega)$ čime je dokazana tvrdnja (b). □

Napomena 2.2.6. *Tvrdnja (e) u prethodnoj propoziciji zapravo govori da je operator $P(\Omega_1) - P(\Omega_2)$ pozitivan, odnosno za svaki $\psi \in \mathcal{H}$*

$$\langle \psi, \Big(P(\Omega_2) - P(\Omega_1)\Big)\psi \rangle \geq 0.$$

Svakoj projektivnoj mjeri možemo pridružiti funkciju

$$E(\lambda) = P\Big((-\infty, \lambda]\Big)$$

sa svojstvima:

(a) $E(\lambda)$ je ortogonalna projekcija.

(b) $E(\lambda_1) \leq E(\lambda_2)$, za $\lambda_1 \leq \lambda_2$.

(c) $\lim\limits_{\lambda_n \downarrow \lambda} E(\lambda_n)\psi = E(\lambda)\psi$.

(d) $\lim\limits_{\lambda \to -\infty} E(\lambda)\psi = 0$ i $\lim\limits_{\lambda \to +\infty} E(\lambda)\psi = \psi$.

Za fiksni $\psi \in \mathcal{H}$ dobivamo konačnu Borelovu mjeru s

$$\begin{aligned}
\mu_\psi(\Omega) &= \langle \psi, P(\Omega)\psi \rangle \\
&= \langle \psi, P(\Omega)^2\psi \rangle \\
&= \langle P(\Omega)^*\psi, P(\Omega)\psi \rangle \\
&= \langle P(\Omega)\psi, P(\Omega)\psi \rangle \\
&= ||P(\Omega)\psi||^2,
\end{aligned}$$

gdje je $\mu_\psi(\mathbb{R}) = ||\psi||^2 < \infty$.

Koristeći polarizacijsku formulu možemo definirati kompleksnu Borelovu mjeru

$$\mu_{\phi,\psi}(\Omega) = \langle \phi, P(\Omega)\psi \rangle = \frac{1}{4}\Big(\mu_{\phi+\psi}(\Omega) - \mu_{\phi-\psi}(\Omega) + i\mu_{\phi-i\psi}(\Omega) - i\mu_{\phi+i\psi}(\Omega)\Big).$$

Prema Cauchy-Schwarz-Bunjakovski nejednakosti vrijedi $|\mu_{\phi,\psi}(\Omega)| \leq ||\phi||\ ||\psi||$.

Sada bismo htjeli definirati integral s obzirom na promatranu projektivnu mjeru P. Motivirani konstrukcijom Lebesgeovog integrala na $\mathbb{R}$, za jednostavnu funkciju $f = \sum\limits_{j=1}^{n} \alpha_j \mathbb{1}_{\Omega_j}$ (gdje su Ω_j izmjerivi disjunktni skupovi) definiramo

$$\mathcal{P}(f) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dP(\lambda) = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j P(\Omega_j).$$

Dakle, integral poprima vrijednosti u skupu $B(\mathcal{H})$. Posebno, $\mathcal{P}(\mathbb{1}_\Omega) = P(\Omega)$. Tada je

$$\Big\langle \phi, \mathcal{P}(f)\psi \Big\rangle = \Big\langle \phi, \Big(\sum_{j=1}^{n} \alpha_j P(\Omega_j)\Big)\psi \Big\rangle = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \Big\langle \phi, P(\Omega_j)\psi \Big\rangle = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \mu_{\phi,\psi}(\Omega_j),$$

čime dobivamo

$$\left\langle \phi, \mathcal{P}(f)\psi \right\rangle = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\mu_{\phi,\psi}(\lambda).$$

Zbog linearnosti integrala prethodna jednakost nam pokazuje da je operator $\mathcal{P}$ linearno preslikavanje iz skupa jednostavnih funkcija u skup ograničenih operatora na $\mathcal{H}$. Nadalje,

$$\begin{aligned}
\|\mathcal{P}(f)\psi\|^2 &= \left\langle \mathcal{P}(f)\psi, \mathcal{P}(f)\psi \right\rangle \\
&= \Big\langle \sum_{j=1}^{n} \alpha_j P(\Omega_j)\psi, \sum_{i=1}^{n} \alpha_i P(\Omega_i)\psi \Big\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \overline{\alpha_j}\alpha_i \left\langle P(\Omega_j)\psi, P(\Omega_i)\psi \right\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \overline{\alpha_j}\alpha_i \left\langle P(\Omega_j)^*\psi, P(\Omega_i)\psi \right\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \overline{\alpha_j}\alpha_i \left\langle \psi, P(\Omega_j)P(\Omega_i)\psi \right\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \overline{\alpha_j}\alpha_i \left\langle \psi, P(\Omega_j \cap \Omega_i)\psi \right\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{n} |\alpha_j|^2 \left\langle \psi, P(\Omega_j)\psi \right\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{n} |\alpha_j|^2 \mu_\psi(\Omega_j),
\end{aligned}$$

pokazuje

$$\|\mathcal{P}(f)\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d\mu_\psi(\lambda), \tag{2.1}$$

čime dobivamo vezu sa standardnim Lebesgueovim integralom. Primjetimo da smo u šestoj jednakosti koristili tvrdnju (d) Propozicije 2.2.5, a u sedmoj disjunktnost skupova Ω_j i tvrdnju (a) navedene propozicije.

Ako prostor jednostavnih funkcija snabdijemo sa supremum normom ($\|\cdot\|_\infty$) dobivamo iz (2.1)

$$\|\mathcal{P}(f)\psi\| \leq \|f\|_\infty \|\psi\|,$$

čime vidimo da je $\mathcal{P}$ norme 1. Kako su jednostavne funkcije guste u Banachovom prostoru ograničenih Borelovih funkcija $\mathcal{B}(\mathbb{R})$, postoji jedinstveno proširenje operatora $\mathcal{P}$ do ograničenog linearnog operatora $\mathcal{P} : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \to B(\mathcal{H})$.

Teorem 2.2.7. *Neka je $P(\Omega)$ projektivna mjera na $\mathcal{H}$. Tada za operator*

$$\mathcal{P} : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \to B(\mathcal{H}), \quad \mathcal{P}(f) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dP(\lambda)$$

vrijedi:

(a) $\mathcal{P}(1) = I$.

(b) $\mathcal{P}(\overline{f}) = \mathcal{P}(f)^*$.

(c) $\mathcal{P}(fg) = \mathcal{P}(f)\mathcal{P}(g)$.

(d) $\|\mathcal{P}\| = 1$.

(e) $\left\langle P(g)\phi, P(f)\psi \right\rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{g(\lambda)} f(\lambda) d\mu_{\phi,\psi}(\lambda)$.

Dodatno, ako niz $f_n(x) \to f(x)$ konvergira po točkama i ako je niz $\sup_{\lambda\in\mathbb{R}} |f_n(\lambda)|$ ograničen, tada niz $P(f_n) \xrightarrow{s} P(f)$ jako konvergira.

Dokaz. Tvrdnje $(a) - (d)$ za jednostavne funkcije slijede direktno iz definicije i jednakosti (2.1). Za općenitu funkciju tvrdnja slijedi po neprekidnosti od $\mathcal{P}$. Tvrdnju (e) dobivamo primjenom jednakosti

$$\left\langle \mathcal{P}(g)\phi, \mathcal{P}(f)\psi \right\rangle = \left\langle \phi, \mathcal{P}(\overline{g} f)\psi \right\rangle.$$

Kako niz $(f_n)_n$ točkovno konvergira i $(|f_n|)_n$ je ograničen postoji pozitivna dominantna funkcija g koja je integrabilna s obzirom na mjeru μ_ψ, pa posljednja tvrdnja teorema slijedi prema Lebesgueovom teoremu o dominiranoj konvergenciji i jednakosti (2.1). □

Napomena 2.2.8. *Primjetimo da smo u prethodnom teoremu dokazali da je $\mathcal{P}$ homomorfizam C^* algebre.*

Sada bismo htjeli proširiti definiciju operatora $\mathcal{P}$ na neograničene Borelove funkcije. Pošto će operator za neograničene Borelove funkcije općenito biti neograničen, potrebno je definirati domenu operatora. Ako promotrimo jednadžbu (2.1), možemo staviti

$$\mathcal{D}_f = \left\{ \phi \in \mathcal{H} \,\middle|\, \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d\mu_\phi(\lambda) < \infty \right\}.$$

Teorem 2.2.9. *Za svaku Borelovu funkciju f, operator*

$$\mathcal{P}(f) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dP(\lambda), \quad \mathcal{D}\Big(\mathcal{P}(f)\Big) = \mathcal{D}_f$$

je normalan i vrijedi

$$\mathcal{P}(f)^* = \mathcal{P}(\overline{f}).$$

Dakle, ako nam je dana projektivna mjera P pridružena operatoru A, za svaku Borelovu funkciju f možemo definirati operator $\mathcal{P}_A(f)$. Kako nam je cilj definirati $f(A)$ s $\mathcal{P}_A(f)$, pripadni operator možemo dobiti uvrštavanjem $f(\lambda) = \lambda$, to jest

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, dP(\lambda).$$

Obratna tvrdnja je zanimljivija i dana je Spektralnim teoremom.

Definicija 2.2.10. *Za omeđen operator U kažemo da je* ***unitaran*** *ako je bijektivan i*

$$U^{-1} = U^*.$$

Definicija 2.2.11. *Kažemo da su operatori A i $\tilde{A}$* ***unitarno ekvivalentni*** *ako postoji unitaran operator $U : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ takav da*

(a) $U\Big(\mathcal{D}(A)\Big) = \mathcal{D}(\tilde{A})$.

(b) $\tilde{A} = UAU^*$.

Propozicija 2.2.12. *Neka su operatori A i $\tilde{A}$ unitarno ekvivalentni. Operator A je samoadjungiran ako i samo ako je $\tilde{A}$ samoadjungiran. Dodatno, $\sigma(A) = \sigma(\tilde{A})$.*

Dokaz. Zbog simetričnosti gornje definicije, dovoljno je pokazati $A = A^*$ povlači $\tilde{A} = \tilde{A}^*$ (za drugi smjer U zamijenimo s U^*, čime mijenjamo uloge od A i $\tilde{A}$).

Dokažimo $\tilde{A} \subseteq \tilde{A}^*$. Neka su $\tilde{x}, \tilde{y} \in \mathcal{D}(\tilde{A})$. Tada postoje $x, y \in \mathcal{D}(A)$ takvi da $Ux = \tilde{x}$ i $Uy = \tilde{y}$. Sada imamo

$$\begin{aligned}
\left\langle \tilde{A}\tilde{x}, \tilde{y} \right\rangle &= \left\langle \tilde{A}Ux, \tilde{y} \right\rangle \\
&= \left\langle UAx, Uy \right\rangle \\
&= \left\langle Ax, U^*Uy \right\rangle \\
&= \left\langle Ax, y \right\rangle \\
(A \text{ samoadjungiran}) &= \left\langle x, Ay \right\rangle \\
&= \left\langle U^*\tilde{x}, AU^*\tilde{y} \right\rangle \\
&= \left\langle \tilde{x}, UAU^*\tilde{y} \right\rangle \\
&= \left\langle \tilde{x}, \tilde{A}\tilde{y} \right\rangle.
\end{aligned}$$

Čime smo dobili $\tilde{y} \in \mathcal{D}(\tilde{A}^*)$ i $\tilde{A}^*\tilde{y} = \tilde{A}\tilde{y}$. Dakle $\tilde{A} \subseteq \tilde{A}^*$.

Dokažimo drugu inkluziju $\tilde{A}^* \subseteq \tilde{A}$. Preciznije, kako već imamo $\tilde{A} \subseteq \tilde{A}^*$, dovoljno je pokazati da vrijedi $\mathcal{D}(\tilde{A}^*) \subseteq \mathcal{D}(\tilde{A})$. Neka su $\tilde{x} \in \mathcal{D}(\tilde{A})$ i $\tilde{y} \in \mathcal{D}(\tilde{A}^*)$. Tada postoji $x \in \mathcal{D}(A)$ takav da $Ux = \tilde{x}$.

$$\begin{aligned}
\left\langle \tilde{x}, \tilde{A}^*\tilde{y} \right\rangle &= \left\langle \tilde{A}\tilde{x}, \tilde{y} \right\rangle \\
&= \left\langle \tilde{A}Ux, \tilde{y} \right\rangle \\
&= \left\langle UAx, \tilde{y} \right\rangle \\
&= \left\langle Ax, U^*\tilde{y} \right\rangle.
\end{aligned}$$

Kako gornje vrijedi za svaki $x \in \mathcal{D}(A)$, zaključujemo $U^*\tilde{y} \in \mathcal{D}(A^*) = \mathcal{D}(A)$, odnosno $\tilde{y} \in U\big(\mathcal{D}(A)\big) = \mathcal{D}(\tilde{A})$. Time konačno dobivamo $\tilde{A}^* = \tilde{A}$.

Dokažimo $\sigma(\tilde{A}) = \sigma(A)$.

$$\begin{aligned}
\tilde{A} - \lambda I &= UAU^* - \lambda UU^* \\
&= U(A - \lambda I)U^*.
\end{aligned}$$

Iz čega slijedi $A - \lambda I$ bijekcija ako i samo ako je $\tilde{A} - \lambda I$ bijekcija. Također,

$$\begin{aligned}(\tilde{A} - \lambda I)^{-1} &= (U^*)^{-1}(A - \lambda I)^{-1}U^{-1} \\ &= U^{**}(A - \lambda I)^{-1}U^* \\ &= U(A - \lambda I)^{-1}U^*.\end{aligned}$$

Iz čega slijedi $(\tilde{A} - \lambda I)^{-1}$ omeđen ako i samo ako je $(A - \lambda I)^{-1}$ omeđen. Čime smo dokazali da su rezolventni skupovi operatora A i $\tilde{A}$ jednaki, odnosno da je $\sigma(\tilde{A}) = \sigma(A)$. □

Napomena 2.2.13. *Za dokaz jednakosti spektra u prethodnoj propoziciji nije bilo nužno zahtijevati da je operator A samoadjungiran.*

Promotrimo potprostor

$$\mathcal{H}_\psi = \left\{\mathcal{P}(g)\psi \,\middle|\, g \in L^2(\mathbb{R}, d\mu_\psi)\right\} \subseteq \mathcal{H}.$$

Primijetimo da je $\mathcal{H}_\psi$ zatvoren jer je L^2 zatvoren i $\psi_n = \mathcal{P}(g_n)\psi$ konvergira u $\mathcal{H}$ ako i samo ako g_n konvergira u L^2.

Lema 2.2.14. *Neka je P_ψ projekcija na potprostor $\mathcal{H}_\psi$. Tada $\mathcal{H}_\psi$ reducira operator $\mathcal{P}(f)$, $P_\psi \mathcal{P}(f) \subseteq \mathcal{P}(f)P_\psi$.*

Posebno, imamo sljedeću dekompoziciju

$$\mathcal{P}(f) = \mathcal{P}(f)\Big|_{\mathcal{H}_\psi} \oplus \mathcal{P}(f)\Big|_{\mathcal{H}_\psi^\perp}.$$

Primijetimo da vrijedi

$$P_\psi \mathcal{D}_f = \mathcal{D}_f \cap \mathcal{H}_\psi = \left\{\mathcal{P}(g)\psi \,\middle|\, g, fg \in L^2(\mathbb{R}, d\mu_\psi)\right\}$$

i $\mathcal{P}(f)\mathcal{P}(g)\psi = \mathcal{P}(fg)\psi \in \mathcal{H}_\psi$.

Koristeći jednadžbu (2.1), relacija

$$U_\psi\Big(\mathcal{P}(f)\psi\Big) = f$$

definira jedinstven unitaran operator $U_\psi : \mathcal{H}_\psi \to L^2(\mathbb{R}, d\mu_\psi)$ takav da

$$U_\psi \mathcal{P}(f)\Big|_{\mathcal{H}_\psi} = fU_\psi,$$

gdje f identificiramo s odgovarajućim operatorom množenja. Ako je f neograničena Borelova funkcija, kako bi gornja jednakost i dalje vrijedila, potrebno je odabrati odgovarajuću domenu operatora U_ψ. Također motivirani jednadžbom (2.1) stavimo $U_\psi(\mathcal{D}_f \cap \mathcal{H}_\psi) = \mathcal{D}(f) = \left\{g \in L^2(\mathbb{R}, d\mu_\psi) \,\middle|\, fg \in L^2(\mathbb{R}, d\mu_\psi)\right\}$.

Definicija 2.2.15. *Vektor ψ zovemo* ***ciklički*** *ako je $\mathcal{H}_\psi = \mathcal{H}$.*

Ako vektor ψ nije ciklički opisanu konstrukciju operatora U_ψ potrebno je proširiti.

Definicija 2.2.16. *Skup $\left\{\psi_j\right\}_{j\in J}$ gdje je J indeksni skup zovemo skup* ***spektralnih vektora****, ako vrijedi*

$$\|\psi_j\| = 1 \quad i \quad \mathcal{H}_{\psi_i} \perp \mathcal{H}_{\psi_j} \quad i \neq j.$$

Skup spektralnih vektora zovemo ***spektralna baza*** *ako $\bigoplus_j \mathcal{H}_{\psi_j} = \mathcal{H}$.*

Lema 2.2.17. *Za svaku projektivnu mjeru P, postoji (najviše prebrojiva) spektralna baza $\left\{\psi_n\right\}$ takva da*

$$\mathcal{H} = \bigoplus_n \mathcal{H}_{\psi_n}$$

i pripadni unitaran operator

$$U = \bigoplus_n U_{\psi_n} : \mathcal{H} \to \bigoplus_n L^2(\mathbb{R}, d\mu_{\psi_n})$$

takav da za svaku Borelovu funkciju f,

$$U\mathcal{P}(f) = fU, \quad U\mathcal{D}_f = \mathcal{D}(f).$$

Napomena 2.2.18. *Minimalna kardinalnost spektralne baze zovemo spektralni multiplicitet operatora P. Ako je spektralni multiplicitet jednak jedan, tada kažemo da je spektar jednostavan.*

Primjer 2.2.19. *Neka je $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ i neka je $P_A(\Omega)$ kao u Primjeru 2.2.3. Tada spektralnu bazu čine vektori $\psi_1 = (1,0)$ i $\psi_2 = (0,1)$. Međutim vektor $\psi = (1,1)$ je ciklički, pa je spektar operatora A jednostavan.*

Lema 2.2.20. *Neka su f, g Borelove funkcije i neka su $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Tada vrijedi*

$$\alpha\mathcal{P}(f) + \beta\mathcal{P}(g) \subseteq \mathcal{P}(\alpha f + \beta g), \quad \mathcal{D}(\alpha\mathcal{P}(f) + \beta\mathcal{P}(g)) = \mathcal{D}_{|f|+|g|}$$

i

$$\mathcal{P}(f)\mathcal{P}(g) \subseteq \mathcal{P}(fg), \quad \mathcal{D}(\mathcal{P}(f)\mathcal{P}(g)) = \mathcal{D}_g \cap \mathcal{D}_{fg}.$$

Sada svakoj projektivnoj mjeri možemo pridružiti samoadjungirani operator

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dP(\lambda).$$

Teorem 2.2.21 (Spektralni teorem)**.** *Svakom samoadjungiranom operatoru A pridružena je jedinstvena projektivna mjera P_A takva da*

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, dP_A(\lambda).$$

Napomena 2.2.22. *Prethodni teorem nam za proizvoljnu Borelovu funkciju f i samoadjungirani operator A omogućava definiranje izraza $f(A) := \mathcal{P}(f)$.*

Napomena 2.2.23. *Po Teoremu 2.2.21 za svaki samoadjungirani operator postoji projektivna mjera, pa onda po Lemi 2.2.17 svaki samoadjungirani operator (lokalno) možemo shvatiti kao operator množenja.*

Napomena 2.2.24. *U Propoziciji 2.2.12 smo pokazali da unitarno ekvivalentni operatori imaju jednak spektar $\sigma(A) = \sigma(\tilde{A})$, međutim vrijedi i više, to jest $P_{\tilde{A}}(f) = UP_A(f)U^*$ pa je i vrsta spektra ista (točkovni, diskretni, neprekidni...).*

Primjer 2.2.25. *Neka je $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ i neka je A Hermitska matrica. Za fiksnu svojstvenu vrijednost λ, s V_λ označimo odgovarajući svojstveni potprostor. Prostor $\mathcal{H}$ možemo zapisati kao $\mathcal{H} = \bigoplus_{j=1}^{m} V_{\lambda_j}$, gdje su $\lambda_1, \lambda_2, \dots \lambda_m$ različite svojstvene vrijednosti. Ako s P_{λ_j} označimo ortogonalnu projekciju na potprostor V_{λ_j} Spektralni teorem nam daje dekompoziciju operatora $A = \lambda_1 P_{\lambda_1} + \lambda_2 P_{\lambda_2} + \cdots + \lambda_m P_{\lambda_m} = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \lambda P_\lambda$.*

Teorem 2.2.26. *Spektar operatora A je dan s*

$$\sigma(A) = \Big\{\lambda \in \mathbb{R} \,\Big|\, (\forall \epsilon > 0)\ P_A\big((\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)\big) \neq 0\Big\}.$$

Posebno, $P_A\big((\lambda_1, \lambda_2)\big) = 0$ ako i samo ako $(\lambda_1, \lambda_2) \subseteq \rho(A)$.

Korolar 2.2.27. *Vrijedi*

$$P_A\big(\sigma(A)\big) = I \quad i \quad P_A\big(\mathbb{R} \cap \rho(A)\big) = 0.$$

Napomena 2.2.28. *Neka je A samoadjungirani operator. Ako s $r(A)$ označimo rang operatora A, tada su diskretan i esencijalni spektar dani s*

$$\sigma_d(A) = \Big\{\lambda \in \sigma_p(A) \,\Big|\, (\exists \epsilon > 0)\ r\big(P_A(\langle \lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon \rangle)\big) < \infty\Big\},$$

$$\sigma_{ess}(A) = \Big\{\lambda \in \mathbb{R} \,\Big|\, (\forall \epsilon > 0)\ r\big(P_A(\langle \lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon \rangle)\big) = \infty\Big\}.$$

2.3 Vremenska evolucija i Stoneov Teorem

U ovom poglavlju nas zanima inicijalna zadaća pridružena Schrödingerovoj jednadžbi $i\frac{d}{dt}\psi(t) = H\psi(t)$ u Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$. U slučaju kada je $\mathcal{H}$ jednodimenzionalan, odnosno kada je A realan broj, rješenje je dano s

$$\psi(t) = e^{-itA}\psi(0). \tag{2.2}$$

Htjeli bismo generalizirati problem na slučaj kada je A samoadjungirani operator, a da oblik rješenja ostane nepromijenjen. Također bismo htjeli da jednoparametarsku unitarnu grupu $U(t)$ možemo rekonstruirati iz njezinog generatora A relacijom $U(t) = e^{-itA}$ pomoću Spektralnog teorema.

Teorem 2.3.1. *Neka je A samoadjungirani operator i neka je $U(t) = e^{-itA}$. Tada vrijedi*

(a) $U(t)$ je jako neprekidna jednoparametarska unitarna grupa.

(b) $\lim_{t\to 0} \frac{1}{t}\Big(U(t)\psi - \psi\Big)$ postoji ako i samo ako je $\psi \in \mathcal{D}(A)$. U tom slučaju vrijedi $\lim_{t\to 0} \frac{1}{t}\Big(U(t)\psi - \psi\Big) = -iA\psi$.

(c) $U(t)\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A)$ i $AU(t) = U(t)A$.

Dokaz. Kao što smo prethodno napomenuli Teorem 2.2.21 nam omogućava definiranje izraza $f(A)$ za proizvoljnu Borelovu funkciju f. Definirajmo $f(x) := e^{-itx}$. Tada za svaki $x, y \in \mathbb{R}$ vrijedi

$$|f(x)| \leq 1, \quad f(0) = 1, \quad f(x+y) = f(x)f(y).$$

Koristeći Teorem 2.2.21 i definiranjem $U(t) = f(A)$ dobivamo da je $U(t)$ jednoparametarska unitarna grupa. Da bismo dokazali neprekidnost u jakoj operatorskoj topologiji promotrimo izraz

$$\lim_{t\to t_0} \left\| e^{-itA}\psi - e^{-it_0 A}\psi \right\|^2 = \lim_{t\to t_0} \int_{\mathbb{R}} \left| e^{-it\lambda} - e^{-it_0\lambda} \right|^2 d\mu_\psi(\lambda).$$

Kako bismo dokazali da je prethodni limes jednak nula i time dokazali tvrdnju (a), potrebno je opravdati ulazak limesa pod integral. Primijetimo da vrijedi $|e^{-it_0\lambda}| \leq 1$. Također $\int_{\mathbb{R}} c\,d\mu_\psi(\lambda) < \infty$ za svaki $c \in \mathbb{R}$, jer je μ_ψ konačna mjera. Korištenjem Lebesgueovog Teorema o dominiranoj konvergenciji i odabirom proizvoljne konstantne veće ili jednake 1 kao dominantne funkcije dobivamo

$$\int_{\mathbb{R}} \lim_{t\to t_0} \left| e^{-it\lambda} - e^{-it_0\lambda} \right|^2 d\mu_\psi(\lambda) = 0.$$

Za dokaz tvrdnje (b) uzmimo proizvoljan $\psi \in \mathcal{D}(A)$, slično kao u dokazu tvrdnje (a)

$$\lim_{t\to 0}\left\|\frac{1}{t}(e^{-itA}\psi-\psi)+iA\psi\right\|^2=\int_{\mathbb{R}}\lim_{t\to 0}\left|\frac{1}{t}(e^{-it\lambda}-1)+i\lambda\right|^2 d\mu_\psi(\lambda)=0.$$

Naime, za $f(t) := (e^{-it\lambda}-1)$ i $g(t) := t$, vrijedi $\lim_{t\to 0} f(t) = \lim_{t\to 0} g(t) = 0$ pa prema l'Hôpitalovom pravilu dobivamo

$$\lim_{t\to 0}\frac{f(t)}{g(t)}=\lim_{t\to 0}\frac{f'(t)}{g'(t)}=\lim_{t\to 0}\frac{-i\lambda e^{-it\lambda}}{1}=-i\lambda.$$

Neka je B operator definiran s (1.2). Tada je B simetrično proširenje operatora A jer vrijedi

$$\left\langle\phi, B\psi\right\rangle=\lim_{t\to 0}\left\langle\phi,\frac{i}{t}\Big(U(t)-I\Big)\psi\right\rangle=\lim_{t\to 0}\left\langle\frac{i}{-t}\Big(U(-t)-I\Big)\phi,\psi\right\rangle=\left\langle B\phi,\psi\right\rangle.$$

Koristeći tvrdnju (d) Napomene 1.2.26 zaključujemo $A = B$, čime je tvrdnja (b) dokazana.

Za dokaz tvrdnje (c), fiksirajmo $s \in \mathbb{R}$ i promotrimo limes

$$\lim_{t\to 0}\frac{1}{t}\Big(U(t)U(s)\psi-U(s)\psi\Big).$$

Tvrdnja $U(t)\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A)$ slijedi direktno iz (b) zamjenom $\psi \to U(s)\psi$. Za dokaz posljednje jednakosti, ponovno koristeći tvrdnju (b) dobivamo

$$\begin{aligned}-iAU(s)&=\lim_{t\to 0}\frac{1}{t}\Big(U(t)U(s)\psi-U(s)\psi\Big)\\&=U(s)\left(\lim_{t\to 0}\frac{1}{t}\Big(U(t)\psi-\psi\Big)\right)\\&=U(s)(-iA)\\&=-iU(s)A,\end{aligned}$$

dakle, slijedi $AU(s) = U(s)A$, čime je dokaz gotov. □

Dokazom prethodnog teorema vidimo da je formula (2.2) uistinu rješenje inicijalnog problema Schrödingerove jednadžbe. Štoviše,

$$\left\langle U(t)\psi, AU(t)\psi\right\rangle=\left\langle U(t)\psi, U(t)A\psi\right\rangle=\left\langle\psi, A\psi\right\rangle$$

pokazuje da očekivanje operatora A ne ovisi o vremenu, što fizikalno interpretiramo kao očuvanje energije.

Generator vremenske evolucije kvantnog sustava nužno je samoadjungirani operator jer odgovara ukupnoj energiji sustava koja je realan broj. Naime, u von Neumannovoj aksiomatizaciji kvantne mehanike, svojstvene vrijednosti operatora odgovaraju rezultatima mjerenja fizikalnih veličina (položaj, brzina, energija ...). U tom kontekstu prirodno je promatrati samoadjungirane operatore jer za njih znamo da imaju realan spektar. Dokazom prethodnog teorema vidimo da svakom samoadjungiranom operatoru možemo pridružiti jednoparametarsku unitarnu grupu. Međutim, vrijedi i obrat koji je jedan od glavnih rezultata funkcionalne analize.

Teorem 2.3.2 (Stoneov teorem)**.** *Neka je $U(t)$ slabo neprekidna jednoparametarska unitarna grupa. Tada je njezin generator A samoadjungirani operator i vrijedi $U(t) = e^{-itA}$.*

Dokaz teorema se može pogledati u [6, Poglavlje 5.1].

Napomena 2.3.3. *Izvorni dokaz Marshalla Stonea zahtijevao je jaku neprekidnost jednoparametarske unitarne grupe. Par godina kasnije von Neumann je dokazao teorem i za slabo neprekidne jednoparametarske unitarne grupe u slučaju kada je Hilbertov prostor separabilan. Iz toga razloga teorem se ponekad naziva Stone-von Neumannov teorem.*

Napomena 2.3.4. *Kao što smo spomenuli u uvodnom poglavlju (Aksiom 4) za kvantni sustav želimo unitarnu grupu evolucije. Stoneov Teorem je od velike važnosti jer nam dokazuje da su baš samoadjungirani operatori nužno potrebni za takvu formulaciju.*

Poglavlje 3

Jednočestični Schrödingerovi operatori

3.1 Fourierova pretvorba

Poglavlje započinjemo kratkim pregledom teorije Fourierove pretvorbe. Dokazi svih tvrdnja mogu se pronaći u [6, Poglavlje 7.1].

Vidjeli smo da je $L^2(\mathbb{R}^3)$ Hilbertov prostor koji odgovara čestici u $\mathbb{R}^3$. Općenitije, Hilbertov prostor sustava od N čestica u $\mathbb{R}^d$ je $L^2(\mathbb{R}^n)$, gdje je $n = Nd$. Nerelativistički Hamiltonijan koji odgovara sustava čestica, ako zanemarimo njihovo međudjelovanje dan je s

$$H_0 = -\Delta,$$

gdje je Δ Laplaceov operator

$$\Delta = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}.$$

Radi jednostavnosti pretpostavljamo da su relevantne fizikalne veličine $\hbar = 1$ i $m = \frac{1}{2}$.

Želimo pronaći spektar, te odrediti domenu s obzirom na koju je operator H_0 samoadjungiran. Za analizu će nam biti potrebni neki osnovni rezultati **Fourierove analize**.

Neka je $C^\infty(\mathbb{R}^n)$ skup svih kompleksnih funkcija za koje postoje parcijalne derivacije proizvoljnog reda. Za $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ i $\alpha \in \mathbb{N}_0^n$ definiramo

$$\partial_\alpha f = \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}, \quad x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \dots x_n^{\alpha_n}, \quad |\alpha| = \alpha_1 + \dots \alpha_n.$$

Element $\alpha \in \mathbb{N}_0^n$ zovemo **multi-indeks** i $|\alpha|$ **red** multi-indeksa. Schwartzov prostor

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) = \left\{ f \in C^\infty(\mathbb{R}^n) \,\middle|\, \sup_x |x^\alpha (\partial_\beta f)(x)| < \infty,\ \alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^n \right\}$$

je gust u $L^2(\mathbb{R}^n)$ (jer je $C_c^\infty \subsetneq \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ gust u $L^2(\mathbb{R}^n)$). Ako je $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, tada je $x^\alpha f(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ i $(\partial_\alpha f)(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ za svaki multi-indeks α.

Za $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ definiramo **Fourierovu pretvorbu**

$$\mathcal{F}(f)(p) \equiv \hat{f}(p) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-2\pi i p\cdot x} f(x)\, dx.$$

Lema 3.1.1. *Fourierova pretvorba je preslikavanje $\mathcal{F} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \to \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Za svaki $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ vrijedi*

$$\partial_j \hat{f} = (-2\pi i x_j f)^\wedge, \qquad \widehat{\partial_j f} = 2\pi i p_j \hat{f}.$$

Teorem 3.1.2. *Fourierova pretvorba na $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ je bijekcija. Inverz je dan s*

$$\mathcal{F}^{-1}(g)(x) \equiv \check{g}(x) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{2\pi i p\cdot x} g(p)\, dp.$$

Dodatno vrijedi $\mathcal{F}^2(f)(x) = f(-x)$, odnosno $\mathcal{F}^4 = I$.

Teorem 3.1.3. *Fourierovu pretvorbu $\mathcal{F}$ možemo proširiti do unitarnog operatora $\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}^n) \to L^2(\mathbb{R}^n)$. Spektar je dan s*

$$\sigma(\mathcal{F}) = \left\{ z \in \mathbb{C} \,\middle|\, z^4 = 1 \right\} = \left\{ 1, -1, i, -i \right\}.$$

Definiramo **Soboljevljev prostor** s

$$H^r(\mathbb{R}^n) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^n) \,\middle|\, |p|^r \hat{f}(p) \in L^2(\mathbb{R}^n) \right\}.$$

Svaka funkcija iz $H^r(\mathbb{R}^n)$ ima slabe parcijalne derivacije reda uključivo r koje su definirane s

$$\partial_j f = \left((2\pi i p_j)^\alpha \hat{f} \right)^\vee.$$

Prema Lemi 3.1.1 definicija derivacije se podudara s klasičnom definicijom za svaki $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$.

Sada premi Lemi 3.1.1 imamo

$$-\Delta\psi(x) = \left(4\pi^2 |p|^2 \hat{\psi}(p) \right)^\vee (x), \qquad \psi \in H^2(\mathbb{R}^n),$$

i operator

$$H_0\psi = -\Delta\psi, \qquad \mathcal{D}(H_0) = H^2(\mathbb{R}^n)$$

je unitarno ekvivalentan s maksimalno definiranim operatorom množenja

$$(\mathcal{F} H_0 \mathcal{F}^{-1})\phi(p) = 4\pi^2 |p|^2 \phi(p), \qquad \mathcal{D}(p^2) = \left\{ \phi \in L^2(\mathbb{R}^n) \,\middle|\, |p|^2 \phi(p) \in L^2(\mathbb{R}^n) \right\}.$$

Propozicija 3.1.4. *Operator H_0 definiran na skupu $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ je esencijalno samoadjungiran.*

Dokaz. Prema Korolaru 1.2.28 dovoljno je dokazati da je $\mathrm{Im}(H_0 + zI)$ gusta u $L^2(\mathbb{R}^n)$, gdje je $z = \pm i$. Da bismo dokazali da je slika gusta, pokazat ćemo

$$\mathrm{Im}(H_0 + zI)^\perp = \{0\}.$$

Neka je $\phi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ takav da

$$\left\langle \phi, (H_0 + zI)\psi \right\rangle = 0, \quad \psi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n).$$

Zbog unitarnosti Fourierove pretvorbe,

$$\begin{aligned} 0 &= \left\langle \phi, (H_0 + zI)\psi \right\rangle \\ &= \left\langle \mathcal{F}\phi, \mathcal{F}(H_0 + zI)\psi \right\rangle \\ &= \left\langle \mathcal{F}\phi, (4\pi^2|p|^2 + zI)\mathcal{F}\psi \right\rangle \\ &= \left\langle (4\pi^2|p|^2 + \bar{z})\mathcal{F}\phi, \mathcal{F}\psi \right\rangle. \end{aligned}$$

Kako je $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ gust u $L^2(\mathbb{R}^n)$, jednako vrijedi i za $\mathcal{F}C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$. Konačno dobivamo,

$$(4\pi^2|p|^2 + \bar{z})\mathcal{F}\phi = 0,$$

iz čega slijedi $\mathcal{F}\phi = 0$, odnosno $\phi = 0$. Dakle, H_0 definiran na $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ je esencijalno samoadjungiran. □

Teorem 3.1.5. *Slobodni Schrödingerov operator H_0 je samoadjungiran i spektar mu je dan s*

$$\sigma(H_0) = [0, \infty).$$

Dokaz. Samoadjungiranost slijedi direktno iz Spektralnog teorema, jer je H_0 unitarno ekvivalentan s prethodno definiranim operatorom množenja, koji je samoadjungiran prema prethodnoj propoziciji.

Spektar operatora množenja jednak je esencijalnoj slici pripadne funkcije (vidjeti u [7, Uvod]), to jest skupu

$$ess\,\mathrm{Im}|p|^2 = \left\{ z \in \mathbb{C} \,\middle|\, (\forall \epsilon > 0)\ \mu(\{p : \left||p|^2 - z\right| < \epsilon\}) > 0 \right\} = [0, \infty),$$

gdje je μ standardna Lebesgueova mjera na $\mathbb{C}$. Kako je H_0 unitarno ekvivalentan s prethodno definiranim operatorom množenja, prema Propoziciji 2.2.12 dobivamo

$$\sigma(H_0) = [0, \infty).$$

□

Napomena 3.1.6. *Primjetimo da vrijedi $\sigma(H_0) = \sigma_{ess}(H_0)$, jer $\sigma(H_0)$ nema izoliranih točaka.*

Napomena 3.1.7. *Prethodnom propozicijom smo pokazali da je operator $\overline{H_0\big|_{C_c^\infty(\mathbb{R}^n)}}$ samoadjungirano proširenje operatora $H_0\big|_{C_c^\infty(\mathbb{R}^n)}$. Međutim, operator H_0 je također samoadjunirano proširenje operatora $H_0\big|_{C_c^\infty(\mathbb{R}^n)}$, pa prema Napomeni 1.2.26 dobivamo*

$$\overline{H_0\big|_{C_c^\infty(\mathbb{R}^n)}} = H_0.$$

3.2 Kato-Rellichov teorem

Definicija 3.2.1. *Za operator B kažemo da je relativno ograničen s obzirom na operator A ako $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{D}(B)$ i postoje konstante $a, b \geq 0$ takve da*

$$||Bx|| \leq a\,||Ax|| + b\,||x||, \quad x \in \mathcal{D}(A).$$

Infimum svih konstanti a za koje postoji b i vrijedi prethodna nejednakost zovemo A-ograda operatora B.

Lema 3.2.2. *Neka su B_1 i B_2 relativno ograničeni s obzirom na operator A, s A-ogradama a_1 i a_2. Tada je operator $\alpha_1 B_1 + \alpha_2 B_2$ također relativno ograničen s obzirom na operator A, s A-ogradom manjom od $|\alpha_1|a_1 + |\alpha_2|a_2$. Dakle, skup svih operatora relativno ograničenih obzirom na operator A čine vektorski prostor.*

Dokaz. Dokaz slijedi direktno primjenom nejednakosti trokuta na izraz $||(\alpha_1 B_1 + \alpha_2 B_2)\psi||$. □

Lema 3.2.3. *Neka je B zatvoren i A ograničen operator. Tada je BA zatvoren.*

Dokaz. Neka je $(x_n)_n$ konvgentan niz u $\mathcal{D}(BA)$, takav da $x_n \to x$ u $\mathcal{H}$ i $BAx_n \to y$ u $\mathcal{H}$. Želimo pokazati da vrijedi

$$x \in \mathcal{D}(BA), \quad y = BAx.$$

Kako je A ograničen, $Ax_n \to Ax$. Zbog zatvorenosti operatora B vrijedi

$$Ax \in \mathcal{D}(B), \quad y = BAx.$$

Međutim, $Ax \in \mathcal{D}(B)$ je ekvivalentno s $x \in \mathcal{D}(BA)$, čime je tvrdnja dokazana. □

Lema 3.2.4. *Neka je A zatvoren, te neka je B zatvoriv. Ekvivalentno je:*

(a) B je relativno ograničen s obzirom na A.

(b) $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{D}(B)$.

(c) $BR_A(z)$ *je ograničen za barem jedan* $z \in \rho(A)$.

Štoviše, A-ograda operatora B nije veća od $\inf\limits_{z\in\rho(A)} \|BR_A(z)\|$.

Dokaz. (a) povlači (b) direktno po definiciji relativne ograničenosti.

Za dokaz (b) povlači (c), primijetimo da je prema prethodnoj lemi operator $BR_A(z)$ zatvoren i definiran na cijelom $\mathcal{H}$ jer je $\operatorname{Im} R_A(z) = \mathcal{D}(A)$, a to je sadržano u $\mathcal{D}(B)$ po pretpostavci. Tada prema Teoremu 2.1.1 (Teorem o zatvorenom grafu) slijedi da je $BR_A(z)$ ograničen.

Za dokaz (c) povlači (a), uzmimo $\psi \in \mathcal{D}(A)$. Tada,

$$\|B\psi\| = \|BR_A(z)(A - zI)\psi\| \leq a\,\|(A - zI)\psi\| \leq a\,\|A\psi\| + a\,|z|\,\|\psi\|,$$

gdje je $a = \|BR_A(z)\|$. □

Napomena 3.2.5. *Prema prvoj rezolventnoj formuli* (2.1.7)*, tvrdnja* (c) *prethodne leme vrijedi za svaki* $z \in \rho(A)$.

Primjer 3.2.6. *Neka je A samoadjungiran operator definiran na Hilbertovom prostoru* $L^2(0,1)$*,* $A = \frac{-d^2}{dx^2}$*,* $\mathcal{D}(A) = \left\{f \in H^2\big([0,1]\big) \,\middle|\, f(0) = f(1) = 0\right\}$*. Označimo s B operator množenja s funkcijom* $q \in L^2(0,1)$*. Pošto su sve funkcije iz* $\mathcal{D}(A)$ *neprekidne na* $[0,1]$*, slijedi* $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{D}(B)$*. Prema prethodnoj Lemi operator B je relativno ograničen s obzirom na operator A.*

Obično nas u primjeni zanima slučaj kada je A samoadjungiran, a B simetričan.

Definicija 3.2.7. *Za gusto definiran operator A kažemo da je* ***ograničen odozdo****, ako je* $A - \gamma$ *pozitivan operator za neki realan broj* γ*, odnosno ako vrijedi*

$$\langle \psi, A\psi \rangle \geq \gamma \|\psi\|^2, \quad \gamma \in \mathbb{R}.$$

U dokazu iduće leme pomoći će nam sljedeći rezultat.

Propozicija 3.2.8. *Neka je A samoadjungirani operator. Ako s* $im(z)$ *označimo imaginarni dio kompleksnog broja z, tada vrijedi*

(a) $\|AR_A(z)\| \leq \frac{|z|}{im(z)}$.

(b) $\|R_A(z)\| \leq \frac{1}{im(z)}$.

Lema 3.2.9. *Neka je A samoadjungiran i B relativno ograničen. A-ograda operatora B dana je s*

$$\lim_{\lambda\to\infty}\left\|BR_A(\pm i\lambda)\right\|.$$

Ako je A ograničen odozdo, $\pm i\lambda$ možemo zamijeniti s $-\lambda$.

Dokaz. Neka je $\lambda > 0$ i neka je a_∞, A-ograda operatora B. Kako je B relativno ograničen dobivamo

$$\begin{aligned}\left\|BR_A(\pm i\lambda)\psi\right\| &\leq a\left\|AR_A(\pm i\lambda)\psi\right\| + b\left\|R_A(\pm i\lambda)\psi\right\|.\\ &\leq a\left\|AR_A(\pm i\lambda)\right\|\left\|\psi\right\| + b\left\|R_A(\pm i\lambda)\right\|\left\|\psi\right\|.\end{aligned}$$

Prema prethodnoj propoziciji

$$\left\|AR_A(\pm i\lambda)\right\| \leq \frac{|\lambda|}{\lambda} = 1.$$

Analogno,

$$\left\|R_A(\pm i\lambda)\right\| \leq \frac{1}{\lambda}.$$

Konačno dobivamo,

$$\left\|BR_A(\pm i\lambda)\psi\right\| \leq \left(a + \frac{b}{\lambda}\right)\left\|\psi\right\|.$$

Iz prethodnog računa slijedi $\limsup_{\lambda} \|BR_A(\pm i\lambda)\| \leq a_\infty$. Međutim, prema Lemi 3.2.4, $a_\infty \leq \inf_{\lambda} \|BR_A(\pm i\lambda)\|$. Čime je prva tvrdnja dokazana. Ako je A odozdo ograničen dokaz ide analogno koristeći

$$\left\|BR_A(-\lambda)\psi\right\| \leq \left(a\max\left(1, \frac{|\gamma|}{\lambda+\gamma}\right) + \frac{b}{\lambda+\gamma}\right)\|\psi\|, \quad -\lambda < \gamma.$$

□

Teorem 3.2.10 (Kato-Rellich)**.** *Neka je A (esencijalno) samoadjungiran i neka je B simetričan s A-ogradom manjom od jedan. Tada je $A + B$, $\mathfrak{D}(A + B) = \mathfrak{D}(A)$ (esencijalno) samoadjungiran. Ako je A esencijalno samoadjungiran, vrijedi*

$$\mathfrak{D}(\overline{A}) \subseteq \mathfrak{D}(\overline{B}), \quad \overline{A} + \overline{B} = \overline{A + B}.$$

Dodatno ako je A ograničen odozdo s γ, tada je $A + B$ ograničen odozdo s

$$\gamma - \max\left(a|\gamma| + b, \frac{b}{a-1}\right).$$

Dokaz. Prema Teoremu 1.2.27, ako je A samoadjungiran dovoljno je dokazati $\mathrm{Im}(A + B \pm i\lambda) = \mathcal{H}$. Prema prethodnoj lemi postoji $\lambda > 0$ takav da $\|BR_A(\pm i\lambda)\| < 1$. Kako spektar omeđenog operatora leži u zatvorenoj kugli oko ishodišta s radijusom jednakim normi operatora, vrijedi $-1 \in \rho(BR_A(\pm i\lambda))$ pa je $I + BR_A(\pm i\lambda)$ surjekcija. Tada je

$$A + B \pm i\lambda = (I + BR_A(\pm i\lambda))(A \pm i\lambda) \tag{3.1}$$

surjektivan, čime je prvi dio dokaza gotov.

Neka je A esencijalno samoadjungiran. Operator $\overline{B}$ je ograničen s obzirom na operator $\overline{A}$. Neka je $f \in \mathcal{D}(\overline{A})$. Tada postoji niz $(f_n)_n$ u $\mathcal{D}(A)$ takav da $f_n \to f$ i $Af_n \to \overline{A}f$. Također,

$$\left\|B(f_n - f_m)\right\| \leq a\left\|A(f_n - f_m)\right\| + b\left\|f_n - f_m\right\|$$

pokazuje da je $(Bf_n)_n$ Cauchyjev niz u $\mathcal{H}$, pa $Bf_n \to g$. Kako je B simetričan, pa time i zatvoriv, dobivamo $g = \overline{B}f$. Čime smo dokazali $\mathcal{D}(\overline{A}) \subseteq \mathcal{D}(\overline{B})$. Za $f \in \mathcal{D}(\overline{A})$

$$\left\|\overline{B}f\right\| = \lim_{n\to\infty}\left\|Bf_n\right\| \leq a \lim_{n\to\infty}\left\|Af_n\right\| + b \lim_{n\to\infty}\left\|f_n\right\| = a\left\|\overline{A}f\right\| + b\left\|f\right\|.$$

Čime smo pokazali da je $\overline{B}$ ograničen obzirom na $\overline{A}$, s $\overline{A}$-ogradom manjom od jedan. Prethodni argument pokazuje

$$(A + B)f_n \to \overline{A}f + \overline{B}f$$

pa je

$$\overline{A + B}f = \overline{A}f + \overline{B}f.$$

Iz čega slijedi

$$\overline{A} + \overline{B} \subseteq \overline{A + B}.$$

Iz prvog dijela teorema dobivamo da je operator $\overline{A} + \overline{B}$ samoadjungiran i $\mathcal{D}(\overline{A} + \overline{B}) = \mathcal{D}(\overline{A})$ pa je

$$A + B \subseteq \overline{A} + \overline{B}.$$

Time smo pokazali da je $\overline{A} + \overline{B}$ zatvoreno proširenje operatora $A + B$, što pokazuje

$$\overline{A + B} \subseteq \overline{A} + \overline{B},$$

jer je $\overline{A + B}$ najmanje proširenje. Time smo dokazali tvrdnju $\overline{A + B} = \overline{A} + \overline{B}$.

Ako je A ograničen odozdo, $\pm i\lambda$ možemo zamijeniti s $-\lambda$ i jednakost (3.1) pokazuje da R_{A+B} postoji za dovoljno velike λ. Prema dokazu prethodne leme možemo odabrati $-\lambda > \min\left(\gamma, \frac{b}{a-1}\right)$. □

Primjer 3.2.11. *U prethodnom primjeru vidjeli smo da je operator B množenja s funkcijom $q \in L^2(0,1)$ relativno ograničen tako što smo provjerili $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{D}(B)$. Može se pokazati da operator B ima A-ogradu jednaku 0, pa prema Teoremu 3.2.10 dobivamo da je $A + B$ samoadjungiran.*

Spomenimo još drugu rezolventnu formulu.

Lema 3.2.12. *Neka su A i B zatvoreni i neka je $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{D}(B)$. Tada za $z \in \rho(A) \cap \rho(A+B)$ vrijedi* ***druga rezolventna formula***

$$R_{A+B}(z) - R_A(z) = -R_A(z)BR_{A+B}(z) = -R_{A+B}(z)BR_A(z)$$

Dokaz. Računamo

$$\begin{aligned} R_{A+B}(z) + R_A(z)BR_{A+B}(z) &= R_A(z)(A - zI)R_{A+B}(z) + R_A(z)BR_{A+B}(z) \\ &= R_A(z)(A + B - zI)R_{A+B}(z) \\ &= R_A(z). \end{aligned}$$

Analogno,

$$\begin{aligned} R_{A+B}(z) + R_{A+B}(z)BR_A(z) &= R_{A+B}(z)(A - zI)R_A(z) + R_{A+B}(z)BR_A(z) \\ &= R_{A+B}(z)(A + B - zI)R_A(z) \\ &= R_A(z). \end{aligned}$$

□

3.3 Jednočestični Schrödingerovi operatori

U prethodnom poglavlju smo vidjeli da je suma samoadjungiranog i simetričnog operatora ponovno samoadjungiran operator ako je operator perturbacije „mali". Teorem 3.2.10 nam daje i ocjenu odozdo, ali nemamo precizniju informaciju o spektru. Standardno iduće pitanje o spektru je dobiti odnos između $\sigma(A)$ i $\sigma(A + B)$. Htjeli bismo vidjeti postoji li neki dio spektra koji je invarijantan na perturbacije. Neka je A proizvoljan samoadjungirani operator. Ako operatoru A dodamo operator identitete, pomaknuli smo cijeli spektar. Time vidimo da ne postoji dio spekta koji je invarijantan na proizvoljne relativno ograničene perturbacije. Međutim, svojstvenu vrijednost $\lambda_0 \in \sigma_d(A)$ (ako takva postoji) možemo izbaciti perturbacijom konačnog ranga proizvoljno male norme promatranjem operatora

$$A + \epsilon P_A(\{\lambda_0\}).$$

Time vidimo da jedino preostaje mogućnost da je esencijalni spektar stabilan s obzirom na perturbacije konačnog ranga.

Definicija 3.3.1. *Za operator K kažemo da je relativno kompaktan s obzirom na operator A, ako postoji $z \in \rho(A)$ takav da*

$$KR_A(z) \in \mathcal{K}(\mathcal{H}),$$

gdje je $K(\mathcal{H})$ skup svih kompaktnih operatora na $\mathcal{H}$.

Napomena 3.3.2. *Operator $R_{A+K}(z) - R_A(z)$ je kompaktan ako je K relativno kompaktan. Naime, prema Lemi 3.2.12 dobivamo*

$$R_{A+K}(z) - R_A(z) = -R_{A+K}(z)KR_A(z),$$

što je kompaktan operator kao kompozicija ograničenog i kompaktnog operatora.

Propozicija 3.3.3. *Neka je A samoadjungiran i K relativno kompaktan s obzirom na operator A. Tada je A-ograda operatora K jednaka nula.*

Teorem 3.3.4 (Weylov teorem)**.** *Neka su A i B samoadjungirani operatori. Ako za neki $z \in \rho(A) \cap \rho(B)$ vrijedi*

$$R_A(z) - R_B(z) \in \mathcal{K}(\mathcal{H}),$$

tada je $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B)$.

Dokaz prethodne propozicije i teorema može se pogledati u [6, Poglavlje 6.4].

Napomena 3.3.5. *Prethodni teorem i Napomena 3.3.2 nam daju*

$$\sigma_{ess}(A + K) = \sigma_{ess}(A)$$

za K relativno kompaktan. Dakle, esencijalni spektar je stabilan s obzirom na relativno kompaktne perturbacije.

Promotrimo sada operator

$$-\Delta + V(x)$$

definiran na $C_c^\infty(\mathbb{R}^n) \subseteq L^2(\mathbb{R}^n)$. Željeli bismo proširiti operator do samoadjungiranog operatora. Vidjeli smo da je operator $-\Delta$ definiran na domeni $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ esencijalno samoadjungiran, to jest njegov zatvarač je samoadjungiran. Taj operator smo nazvali H_0 i predstavljao je kinetičku energiju kvantnog sustava. Dodavanjem potencijala $V(x)$, nije a priori jasno da li novo definirani operator ima samoadjungirana proširenja, odnosno je li esencijalno samoadjungiran.

Primjetimo da nam Teorem 3.2.10 (Kato-Rellich) daje nužne i dovoljne uvjet da bi operator $-\Delta + V(x)$ bio samoadjungiran. U tu svrhu potrebno je provjeriti za kakve potencijale V nejedakost

$$\|Vf\| \leq a\|H_0 f\| + b\|f\|,$$

vrijedi za sve $f \in \mathcal{D}(H_0) = H^2(\mathbb{R}^n)$.

Spomenimo nejednakost koja će nam pomoći u dokazu sljedeće leme.

Propozicija 3.3.6. *Ako je $f \in \mathcal{D}(H_0)$, tada je f ograničena i postoji $C > 0$ t.d.*

$$\|f\|^2_{L^\infty(\mathbb{R}^n)} \leq C\|H_0 f\|^{\frac{3}{4}}_{L^2(\mathbb{R}^n)}\|f\|^{\frac{1}{4}}_{L^2(\mathbb{R}^n)}.$$

U nastavku će nam cilj biti primijeniti teoriju na utvrđivanje samoadjungiranosti i karakterizaciju spektra operatora koji modelira atom vodika. Iz toga razloga posebno će nas zanimati slučaj kada je prostor na kojem definiramo operatore trodimenzionalan. Svi navedeni rezultati mogu se generalizirati na više dimenzija.

Lema 3.3.7. *Neka je $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, to jest neka je $V = v + w$, gdje je $v \in L^2(\mathbb{R}^3)$ i $w \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Tada je $\mathcal{D}(H_0) \subseteq \mathcal{D}(V)$ i za svaki $a > 0$ postoji $b \geq 0$ takav da*

$$\|Vf\| \leq a\|H_0 f\| + b\|f\|.$$

Dokaz. Fiksirajmo pozitivan broj N i podijelimo funkciju v na funkcije v_1 i v_2 tako da je $v_1 = v$ na skupu gdje je $v > N$ i $v_2 = v$ na skupu gdje je $v \leq N$. Prema teoremu o monotonoj konvergenciji za proizvoljan $\epsilon > 0$, možemo odabrati $N(\epsilon)$ tako da

$$\|v_1\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \epsilon.$$

Ovime dobivamo

$$V = v_1 + v_2 + w,$$

gdje je $\|v_1\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \epsilon$ i

$$\|v_2 + w\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \leq N(\epsilon) + \|w\|_{L^\infty(\mathbb{R}^n)} =: B(\epsilon).$$

Za svaki $f \in \mathcal{D}(H_0)$ dobivamo

$$\|Vf\| \leq \|v_1\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}\|f\|_{L^\infty(\mathbb{R}^n)} + B(\epsilon)\|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

Prethodna propozicija također pokazuje

$$\|Vf\| \leq C\|v_1\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}\|H_0 f\|^{\frac{3}{4}}_{L^2(\mathbb{R}^n)}\|f\|^{\frac{1}{4}}_{L^2(\mathbb{R}^n)} + B(\epsilon)\|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

Primjenom Youngove nejednakosti (dokaz nejednakosti [3, Poglavlje 7]) dobivamo

$$\|H_0 f\|^{\frac{3}{4}}_{L^2(\mathbb{R}^3)}\|f\|^{\frac{1}{4}}_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \frac{3}{4}\|H_0 f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \frac{1}{4}\|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)},$$

iz čega slijedi

$$\|Vf\| \leq C\epsilon\|H_0 f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \Big(B(\epsilon) + C\Big)\|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

Tvrdnja Leme slijedi po proizvoljnosti od ϵ. □

Teorem 3.3.8. *Neka je V realna i $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Tada je operator*

$$H := H_0 + V$$

s domenom $\mathcal{D}(H) = \mathcal{D}(H_0)$ samoadjungiran i H definiran na $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ je esencijalno samoadjungiran.

Dokaz. Prethodnom lemom smo pokazali da je V ograničen s obzirom na operator H_0 s H_0-ogradom manjom od jedan. Prema Napomeni 1.2.23 operator V je simetričan. Sada primjenom Teorema 3.2.10 (Kato-Rellich) dobivamo da je H samoadjungiran i $\mathcal{D}(H) = \mathcal{D}(H_0)$. Ako promotrimo operator $H = H_0 + V$ definiran na $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$. U Propoziciji 3.1.4 smo pokazali da je H_0 esencijalno samoadjungiran na $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$. Kako je V relativno ograničen s H_0-ogradom manjom od 1, ponovnom primjenom Teorema 3.2.10 dobivamo da je H esencijalno samoadjungiran na $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$, odnosno da je $\overline{H}$ samoadjungiran. □

Sada bismo htjeli nešto više reći o spektru operatora H. U Napomeni 3.3.5 smo vidjeli da je esencijalni spektar stabilan s obzirom na relativno kompaktne perturbacije. Htjeli bismo vidjeti kakva dodatna ograničenja moramo postaviti na potencijal V da bi bio relativno kompaktan. Odgovor nam daje iduća lema.

Lema 3.3.9. *Neka je $g(x)$ operator množenja s funkcijom g i neka je $f(p)$ operator definiran s*

$$f(p)\psi(x) = \mathcal{F}^{-1}\Big(f(p)\hat{\psi}(p)\Big)(x).$$

Ako za funkcije f i g vrijedi

$$\lim_{|x|\to\infty} f(x) = \lim_{|x|\to\infty} g(x) = 0,$$

tada su operatori $f(p)g(x)$ i $g(x)f(p)$ kompaktni.

Dokaz leme može se pogledati u [6, Poglavlje 7.3]. Koristeći Spektralni teorem možemo definirati $f(p) = (p^2 - z)^{-1}$ i $g(x) = V(x)$. Kako je $f \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ i $\lim_{|x|\to\infty} f(x) = 0$, da bi operator V bio relativno kompaktan prema prethodnoj lemi dovoljno je pretpostaviti da vrijedi

$$\lim_{|x|\to\infty} V(x) = 0.$$

Dodajmo da je prema Teoremu 3.2.10 operator H ograničen odozdo, jer je H_0 ograničen odozdo. Naime, za proizvoljni $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ (što je gusto u $\mathcal{D}(H_0) = H^2(\mathbb{R}^n)$) vrijedi

$$\langle \varphi, H_0\varphi \rangle = -\langle \varphi, \Delta\varphi \rangle = \langle \nabla\varphi, \nabla\varphi \rangle = \|\nabla\varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} \geq 0.$$

Čime dobivamo da je H_0 ograničen odozdo.

Napomena 3.3.10. *Primjetimo da za V relativno kompaktan vrijedi*

$$\sigma_{ess}(A + V) \cap (-\infty, 0) = \emptyset,$$

ali općenito

$$\sigma(A + V) \cap (-\infty, 0) \neq \emptyset.$$

Atom vodika

Promotrimo jednostavan model elektrona koji se giba pod utjecajem vanjskog potencijala V u $\mathbb{R}^3$ nastao djelovanjem jezgre za koju pretpostavljamo da je fiksirana u ishodištu koordinatnog sustava. Pretpostavimo da je elektrostatska sila jedina sila koja djeluje na elektron, tada je V dan s Coulombovim potencijalom

$$V = -\frac{\gamma}{|x|},$$

gdje za $\gamma > 0$ dobivamo model vodikovog atoma, koji je jedan od najvažnijih i najpoznatijih modela u kvantnoj mehanici. Prema prethodnom teoremu da bismo definirali Hamiltonijan sustava H koji je samoadjungiran, potrebno je provjeriti je li $V \in L^2(\mathbb{R}^3)+L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Međutim to se lako vidi ako potencijal podijelimo na $\overline{K}(0,1)$ i $\mathbb{R}^3 \setminus \overline{K}(0,1)$, gdje je $\overline{K}(0,1) = \left\{x \in \mathbb{R}^3 \,\middle|\, \|x\| \leq 1\right\}$. Naime, $\frac{\gamma}{|x|}$ je ograničen s γ na $\mathbb{R}^3 \setminus \overline{K}(0,1)$ i

$$\int\limits_{\overline{K}(0,1)} \frac{\gamma}{|x|^2} dx = \int\limits_{\phi=0}^{2\pi}\int\limits_{\theta=0}^{\pi}\int\limits_{r=0}^{1} \frac{\gamma}{r^2} r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi = 2\pi\gamma \int\limits_{\theta=0}^{\pi} sin\theta\, d\theta = 4\pi\gamma.$$

Sada možemo definirati

$$H = -\Delta - \frac{\gamma}{|x|}, \quad \mathcal{D}(H) = H^2(\mathbb{R}^3).$$

Kako očito vrijedi

$$\lim_{|x|\to\infty} V(x) = 0,$$

Coulombov potencijal je relativno ograničen i primjenom prethodnih rezultata dobivamo

$$\sigma_{ess}(H) = \sigma_{ess}(H_0) = \sigma(H_0) = [0,\infty).$$

Za kraj ćemo još komentirati ponašanje diskretnog spektra s obzirom na konstantu γ.

Napomena 3.3.11. *(a) Za $\gamma \leq 0$ je $H \geq 0$ (H_0 je pozitivan, a za $\gamma \leq 0$ je V nenegativna funkcija). Neka je $\lambda \in \sigma_d(H)$. Tada postoji $x \in \mathcal{H}$ ($x \neq 0$) takav da $Hx = \lambda x$. Kako je operator H pozitivan, dobivamo*

$$0 \leq \langle x, Hx\rangle = \lambda\langle x, x\rangle.$$

Ovim smo pokazali $\lambda \geq 0$, jer je prema pretpostavci $\langle x, x\rangle > 0$. Slijedi,

$$\sigma_d(H) \cap (-\infty, 0) = \emptyset.$$

Sada konačno dobivamo $\sigma_d(H) = \emptyset$ i $\sigma(H) = \sigma_{ess}(H) = [0,\infty)$.

(b) Za $\gamma > 0$ je moguće imati negativne izolirane svojstvene vrijednosti konačne kratnosti. Za svaki $n \in N$, svojstvene vrijednosti λ_n dane su s $\lambda_n = -\left(\frac{\gamma}{2(n+1)}\right)^2$. Detalji se mogu pogledati u [6, Poglavlje 10.4].

Bibliografija

[1] D. Bakić, *Normirani prostori*, PMF-MO, Sveučilište u Zagrebu, 2014.

[2] T. Berić, *Operatori na normiranim prostorima*, PMF-MO, Sveučilište u Zagrebu, 2018.

[3] R. Mrazović, *Mjera i integral*, PMF-MO, Sveučilište u Zagrebu, 2021.

[4] A. Pazy, *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations, Volume 44 of Applied mathematical sciences*, Springer, 1983.

[5] M. Reed, B. Simon, *Functional Analysis, Volume 1 of Methods of Modern Mathematical Physics*, Academic Press, 1981.

[6] G. Teschl, *Mathematical Methods in Quantum Mechanics*, American Mathematical Society, 2009.

[7] T. Berić, M. Tomašević, *Zbirka riješenih zadataka iz Operatora na normiranim prostorima*, PMF-MO, Sveučilište u Zagrebu, 2021.

Sažetak

U ovom radu dajemo pregled teorije neograničenih samoadjungiranih operatora na Hilbertovom prostoru i njihovu primjenu na modeliranje atoma vodika. Pokazujemo da glavni rezultati teorije, Spektralni teorem i Stoneov teorem vrijede isključivo za samoadjungirane operatore, pa su nam baš takvi operatori od glavnog interesa. Kako su u primjenama operatori koji obično susrećemo simetrični, pokazujemo nužne i dovoljne uvjete da bi simetričan operator bio samoadjungiran i promatramo mogućnosti proširenja simetričnih operatora do samoadjungiranih operatora. Kao glavne primjere promatramo operatore položaja i količine gibanja. U nastavku spominjemo Spektralni teorem kao jedan od glavnih rezultata funkcionalne analize, koji nam za proizvoljnu Borelovu funkciju f omogućava definiranje izraza $f(A)$, gdje je A samoadjungirani operator. Koristeći Spektralni teorem može se pokazati Stoneov teorem koji nam dokazuje da je generator jednoparametarske unitarne grupe koja opisuje vremensku evoluciju Schrödingerove jednadžbe upravo samoadjungiran operator. U konačnici postavljamo model atoma vodika i dokazom Kato-Relichovog teorema pokazujemo da se upravo radi o samoadjungiranom operatoru, te dajemo karakterizaciju spektra.

Summary

In this thesis, we present an outline of the theory of unbounded self-adjoint operators acting on Hilbert space and their application to the hydrogen atom. We show that the main results of operator theory, including Spectral theorem and Stone's theorem, apply exclusively to self-adjoint operators. In practical application, operators we come across are often symmetric. We show necessary conditions for symmetric operators to be self-adjoint and we explore the possibilities of extending symmetric operators to self-adjoint operators. Our main examples include position and momentum operators. Afterward, we briefly talk about the Spectral theorem as one of the most important results in functional analysis, which for arbitrary self-adjoint operator A allows us to define $f(A)$ for any Borel function f. Using Spectral theorem we can prove Stone's theorem, which shows that generator of a one-parameter unitary group that characterizes the time evolution of Schrödinger equation is self-adjoint. Lastly, we describe the simple model of the hydrogen atom, characterize its spectrum, and using Kato-Rellich's theorem show that the governing operator is self-adjoint.

Životopis

Rođen sam 3. veljače 1992. u Zagrebu, gdje završavam osnovnu i srednju školu. Tijekom srednjoškolskog obrazovanja aktivno se bavim tenisom i nastupam na mnogobrojnim europskim natjecanjima.
2013. godine upisujem integrirani studij Matematika i fizika; smjer: nastavnički pri Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Zagrebu, a 2017. diplomski studij Primijenjena matematika na istom fakultetu. Tijekom studija aktivno učim kineski jezik i 2018. godine zajedno s kolegicom zastupam Hrvatsku u međunarodnom studentskom natjecanju u kineskom jeziku. Zadnjih nekoliko godina studija pomažem kao koordinator i tehnička podrška u snimanju i prijenosu predavanja doktorskog studija na Matematičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu.
Od 2020. godine aktivno radim kao programer i administrator baza podataka u privatnom poduzeću.