



УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
ДЕПАРТМАН ЗА МАТЕМАТИКУ
И ИНФОРМАТИКУ



Сара Бачевић

Математичке методе у квантној механици
и анализа слободног Шредингеровог оператора

Мастер рад

Ментор:

др Ивана Војновић

Нови Сад, 2026.

Садржај

Увод	1
1 Основни појмови и ознаке	3
1.1 Мулти-индекси, парцијални изводи, градијент и Лапласијан	3
1.2 Лебегова мера, интеграл и простори функција	3
1.3 Хилбертови простори и простор $L^2(\mathbb{R}^n)$	4
1.4 Простор Шварцових брзопадајућих функција $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$	6
1.5 Простори Собољева $H^s(\mathbb{R}^n)$	6
2 Математичке методе: неограничени оператори и Фуријеова транс- формација	7
2.1 Математички оквир квантне механике	7
2.2 Неограничени оператори у Хилбертовим просторима	8
2.2.1 Домен и густо дефинисани оператори	8
2.2.2 Затворени и затвориви оператори	9
2.2.3 Адјунговани оператор	9
2.3 Симетрични и самоадјунговани оператори	10
2.3.1 Дефиниције и основна својства	10
2.3.2 Есенцијална самоадјунгованост и језгро оператора	13
2.3.3 Значај самоадјунгованости у квантној механици	14
2.4 Квадратне форме	15
2.5 Фуријеова трансформација	15
2.5.1 Фуријеова трансформација на $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$	15
2.5.2 Превођење парцијалних извода у операторе множења	15
2.5.3 Инверзна Фуријеова трансформација	15
2.5.4 Планшерелова теорема и проширење на $L^2(\mathbb{R}^n)$	16
2.5.5 Опис простора Собољева преко Фуријеове трансформације	17
3 Спектрална теорија неограничених оператора	18
3.1 Резолвентни скуп и резолвента	18
3.2 Спектар оператора	19

3.3	Класификација спектра	20
3.4	Спектар самоадјунгованих оператора	20
3.5	Оператори множења и њихов спектар	22
3.6	Спектрална теорема и спектрални типови	23
3.7	Једнопараметарске унитарне групе и Стоунова теорема	24
4	Слободни Шредингеров оператор	25
4.1	Дефиниција и самоадјунгованост оператора $H_0 = -\Delta$	25
4.2	Квадратна форма и језгро $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$	26
4.3	Спектар слободног Шредингеровог оператора	27
4.4	Временска еволуција и унитарна група e^{-itH_0}	27
4.5	Интегрална репрезентација решења	28
4.6	Дисперзија и асимптотско понашање: Долардова теорема	28
4.7	RAGE теорема и бекство честице у бесконачност	29
	Закључак	31
	Литература	32
	Биографија	33

Увод

Квантна механика је једна од фундаменталних теорија савремене физике. Она пружа оквир за разумевање микроскопских појава које класична механика не може адекватно да опише. Са математичког становишта, њена формализација почива на функционалној анализи, теорији оператора и Хилбертовим (Hilbert) просторима.

Математичка формулација квантне механике настала је у кратком периоду крајем двадесетих и почетком тридесетих година XX века. Хајзенберг (Heisenberg) је 1925. године формулисао матричну механику, а Шредингер (Schrödinger) је 1926. године увео таласну једначину која данас носи његово име и показао да она даје исте резултате. Јединствен математички оквир за обе формулације дао је фон Нойман (von Neumann) у монографији *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* (1932), где су стања описана векторима апстрактног Хилбертовог простора, а опсервабле самоадјунгованим операторима. Он је развио теорију неограничених самоадјунгованих оператора и указао на разлику између симетричних и самоадјунгованих оператора, која је централна и у овом раду. Исте године Стоун (Stone) је доказао да самоадјунговани оператори тачно одговарају јако непрекидним једнопараметарским унитарним групама, чиме је временска еволуција квантног система добила строго заснивање.

Стање квантног система описује се вектором јединичне норме у Хилбертовом простору, а мерљиве величине (опсервабле) самоадјунгованим операторима. Централни објект теорије је Шредингеров оператор (Хамилтонијан), који описује укупну енергију система и одређује његову временску еволуцију и спектрална својства.

Слободни Шредингеров оператор описује честицу која се креће без утицаја спољашњих сила и потенцијала. Иако је то најједноставнији модел, његова анализа је полазна основа за проучавање сложенијих система, спектралне теорије, теорије расејања и парцијалних диференцијалних једначина.

Циљ рада је да се изложи математичке методе квантне механике и примене на слободни Шредингеров оператор $H_0 = -\Delta$ у простору $L^2(\mathbb{R}^n)$. Излагање углавном прати монографију [7].

Рад је подељен на четири главе. У првој глави уводе се ознаке и функцио-

нални простори $L^2(\mathbb{R}^n)$, $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ и $H^s(\mathbb{R}^n)$. Друга глава излаже теорију неограничених оператора и Фуријеову (Fourier) трансформацију. У трећој глави развија се спектрална теорија неограничених оператора, као и једнопараметарске унитарне групе. Четврта глава посвећена је слободном Шредингеровом оператору: његовој самоадјунгованости, спектру и временској еволуцији.

Глава 1

Основни појмови и ознаке

У овој глави уводимо ознаке и функционалне просторе на којима почива цео рад (видети [7, §0.3, §0.6, §1.1 и §7.1] и [3, §9.1]).

1.1 Мулти-индекси, парцијални изводи, градијент и Лапласијан

Мулти-индекс је n -торка $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}_0^n$, а број $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_n$ је његов ред. За $x \in \mathbb{R}^n$ и довољно глатку функцију f уводимо ознаке

$$x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}, \quad \partial^\alpha f = \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x_1^{\alpha_1} \cdots \partial x_n^{\alpha_n}}. \quad (1.1)$$

Градијент функције f је вектор $\nabla f = (\partial_1 f, \dots, \partial_n f)$, а Лапласов (Laplace) оператор је

$$\Delta f = \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_j^2}. \quad (1.2)$$

1.2 Лебегова мера, интеграл и простори функција

Дефиниција 1.1. Борелова σ -алгебра на $\mathbb{R}^n$ је најмања σ -алгебра подскупова од $\mathbb{R}^n$ која садржи све отворене скупове; њени елементи су *Борелови скупови* (Borel). *Лебегова мера* (Lebesgue) је потпуна мера $|\cdot|$ на $\mathbb{R}^n$ која сваком правоугаонику $[a_1, b_1] \times \cdots \times [a_n, b_n]$ додељује запремину $\prod_{j=1}^n (b_j - a_j)$; скупове на којима је дефинисана зовемо *мерљивим*. Својство важи *скоро свуда* ако важи ван неког скупа Лебегове мере нула.

Дефиниција 1.2. Функција $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ је *мерљива* ако је $f^{-1}(U)$ мерљив скуп за сваки отворен скуп $U \subseteq \mathbb{C}$, а *Борелова* ако је $f^{-1}(U)$ Борелов скуп за сваки отворен $U \subseteq \mathbb{C}$. Интеграл $\int_{\mathbb{R}^n} f(x) dx$ схватамо у Лебеговом смислу; f је *интеграбилна* ако

је $\int_{\mathbb{R}^n} |f(x)| dx < \infty$. Иста терминологија важи за функције на $\mathbb{R}$ и на мерљивим подскуповима од $\mathbb{R}^n$.

Теорема 1.3 (Тонели и Фубини (Tonelli, Fubini), [7, Теорема A.27]). *Нека је $f: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{C}$ мерљива функција.*

(i) (Тонели) *Ако је $f \geq 0$, онда је*

$$\int_{\mathbb{R}^{n+m}} f(x, y) d(x, y) = \int_{\mathbb{R}^n} \left(\int_{\mathbb{R}^m} f(x, y) dy \right) dx = \int_{\mathbb{R}^m} \left(\int_{\mathbb{R}^n} f(x, y) dx \right) dy,$$

при чему све три вредности могу бити и $+\infty$.

(ii) (Фубини) *Ако је $\int_{\mathbb{R}^{n+m}} |f(x, y)| d(x, y) < \infty$, онда унутрашњи интеграл постоје за скоро свако x , односно y , и важе исте једнакости.*

Дефиниција 1.4. За $1 \leq p < \infty$ простор $L^p(\mathbb{R}^n)$ чине класе мерљивих функција $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ (функције које се поклапају скоро свуда се поистовећују) за које је

$$\|f\|_p = \left(\int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^p dx \right)^{1/p} < \infty.$$

Простор $L^\infty(\mathbb{R}^n)$ чине (класе) мерљивих функција за које је $\|f\|_\infty = \inf\{C \geq 0 \mid |f(x)| \leq C \text{ скоро свуда}\} < \infty$. Простор $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ чине мерљиве функције f за које је $\int_K |f(x)| dx < \infty$ за сваки компактан скуп $K \subset \mathbb{R}^n$.

Дефиниција 1.5. Са $C^\infty(\mathbb{R}^n)$ означавамо скуп бесконачно диференцијабилних функција $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$. Носач функције f је $\text{supp } f = \overline{\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \neq 0\}}$, а

$$C_c^\infty(\mathbb{R}^n) = \{f \in C^\infty(\mathbb{R}^n) \mid \text{supp } f \text{ је компактан}\}$$

је скуп глатких функција са компактним носачем.

1.3 Хилбертови простори и простор $L^2(\mathbb{R}^n)$

Дефиниција 1.6. Нека је $\mathfrak{H}$ векторски простор над $\mathbb{C}$. Пресликавање $\langle \cdot, \cdot \rangle: \mathfrak{H} \times \mathfrak{H} \rightarrow \mathbb{C}$ је скаларни производ ако је антилинеарно по првом, линеарно по другом аргументу, ако важи $\langle f, g \rangle = \overline{\langle g, f \rangle}$ и $\langle f, f \rangle > 0$ за $f \neq 0$. Простор $\mathfrak{H}$ са нормом $\|f\| = \langle f, f \rangle^{1/2}$ је Хилбертов ако је комплетан у односу на ту норму.

Теорема 1.7 (Коши–Шварц–Буњаковски (Cauchy–Schwarz–Bunyakovsky), [7, Теорема 0.22]). *За све $f, g \in \mathfrak{H}$ важи $|\langle f, g \rangle| \leq \|f\| \|g\|$.*

Доказ. Ако је $g = 0$, тврђење је тривијално. Нека је $g \neq 0$. Обе стране неједнакости су хомогене по g , па је довољно размотрити случај $\|g\| = 1$. Ставимо $f_\perp = f -$

$\langle g, f \rangle g$. Тада је $\langle g, f_{\perp} \rangle = \langle g, f \rangle - \langle g, f \rangle \|g\|^2 = 0$, па је

$$\|f\|^2 = \|\langle g, f \rangle g + f_{\perp}\|^2 = |\langle g, f \rangle|^2 + \|f_{\perp}\|^2 \geq |\langle g, f \rangle|^2.$$

Како је $|\langle f, g \rangle| = |\overline{\langle g, f \rangle}| = |\langle g, f \rangle|$, тврђење следи. $\square$

Дефиниција 1.8. Нека је $\mathfrak{H}$ Хилбертов простор. За скуп $M \subseteq \mathfrak{H}$ његов *ортогонални комплемент* је

$$M^{\perp} = \{\psi \in \mathfrak{H} \mid \langle \varphi, \psi \rangle = 0 \text{ за све } \varphi \in M\}.$$

Због непрекидности скаларног производа, $M^{\perp}$ је затворен потпростор и $M^{\perp} = \overline{M}^{\perp}$.

Теорема 1.9 (теорема о пројекцији, [7, Теорема 1.7]). *Ако је M затворен потпростор Хилбертовог простора $\mathfrak{H}$, онда се свако $\psi \in \mathfrak{H}$ на јединствен начин пише као $\psi = \psi_{\parallel} + \psi_{\perp}$, где је $\psi_{\parallel} \in M$ и $\psi_{\perp} \in M^{\perp}$.*

Дефиниција 1.10. Нека су $\mathfrak{H}_1, \mathfrak{H}_2$ Хилбертови простори. Линеаран оператор $A: \mathfrak{H}_1 \rightarrow \mathfrak{H}_2$ је *ограничен* ако је

$$\|A\| = \sup_{\|\psi\|=1} \|A\psi\| < \infty.$$

Скуп ограничених оператора означавамо са $L(\mathfrak{H}_1, \mathfrak{H}_2)$, а $L(\mathfrak{H}) = L(\mathfrak{H}, \mathfrak{H})$; $I \in L(\mathfrak{H})$ је идентички оператор, $I\psi = \psi$. Даље:

- $U \in L(\mathfrak{H})$ је *унитаран* ако је бијекција и $\langle U\varphi, U\psi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle$ за све $\varphi, \psi \in \mathfrak{H}$;
- ако је M затворен потпростор, *ортогонални пројектор* на M је оператор $P_M\psi = \psi_{\parallel}$ из Теореме 1.9.

Дефиниција 1.11. На простору $L^2(\mathbb{R}^n)$ (случај $p = 2$ у Дефиницији 1.4) уводимо скаларни производ

$$\langle f, g \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(x)} g(x) dx. \quad (1.3)$$

Теорема 1.12 ([7, Теореме 0.34 и 0.40]). *Простор $L^2(\mathbb{R}^n)$ је сепарабилан Хилбертов простор, а $C_c^{\infty}(\mathbb{R}^n)$ је густ у $L^2(\mathbb{R}^n)$.*

Напомена 1.13. Као у [7], скаларни производ је антилинеаран по првом аргументу, што је уобичајено у физици.

1.4 Простор Шварцових брзопадајућих функција $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$

Дефиниција 1.14. Шварцов (Schwartz) простор је

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) = \left\{ f \in C^\infty(\mathbb{R}^n) \mid \sup_{x \in \mathbb{R}^n} |x^\alpha \partial^\beta f(x)| < \infty \text{ за све } \alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^n \right\}. \quad (1.4)$$

Напомена 1.15. Важи $C_c^\infty(\mathbb{R}^n) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset L^p(\mathbb{R}^n)$, па је $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ густ у $L^p(\mathbb{R}^n)$ за $1 \leq p < \infty$. Ако је $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, онда су и $x^\alpha f$ и $\partial^\alpha f$ у $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$.

Пример 1.16. Гаусова (Gauss) функција $e^{-|x|^2/2}$ припада $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, а не припада $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$.

1.5 Простори Собољева $H^s(\mathbb{R}^n)$

Дефиниција 1.17 ([3, §9.1]). Нека је $f \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$. Функција $g \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ је слаби извод $\partial^\alpha f$ ако је

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(x) \partial^\alpha \varphi(x) dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\mathbb{R}^n} g(x) \varphi(x) dx \quad \text{за све } \varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n). \quad (1.5)$$

Дефиниција 1.18. За $m \in \mathbb{N}_0$ простор Собољева (Sobolev) је

$$H^m(\mathbb{R}^n) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \partial^\alpha f \in L^2(\mathbb{R}^n) \text{ за } |\alpha| \leq m\}, \quad (1.6)$$

где су $\partial^\alpha f$ слаби изводи.

Напомена 1.19. Простор $H^m(\mathbb{R}^n)$ је Хилбертов. У одељку 2.5.5 навешћемо еквивалентан опис преко Фуријеове трансформације, који има смисла и за реално $s \geq 0$.

Глава 2

Математичке методе: неограничени оператори и Фуријеова трансформација

У овој глави развијамо апарат потребан за анализу оператора $H_0 = -\Delta$. Излагање прати [7, §2.1–§2.3 и §7.1–§7.2].

2.1 Математички оквир квантне механике

Стање квантног система описује се вектором $\psi \in \mathfrak{H}$, $\|\psi\| = 1$. За честицу у $\mathbb{R}^n$ је $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$, а $|\psi(x)|^2$ је густина вероватноће положаја честице. Опсервабли a одговара линеаран оператор A , а очекивана вредност мерења у стању ψ је

$$E_\psi(A) = \langle \psi, A\psi \rangle. \quad (2.1)$$

Дефиниција 2.1. Фамилија унитарних оператора $U(t)$, $t \in \mathbb{R}$, је јако непрекидна једнопараметарска унитарна група ако је $U(0) = I$, $U(t+s) = U(t)U(s)$ и $t \mapsto U(t)\psi$ непрекидно за свако ψ . Генератор групе је

$$A\psi = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{i}{t} (U(t)\psi - \psi), \quad (2.2)$$

на скупу оних ψ за које лимес постоји.

Временска еволуција задата је јако непрекидном једнопараметарском унитарном групом $U(t)$, чији је генератор Хамилтонијан H , па $\psi(t) = U(t)\psi(0)$ задовољава Шредингерову једначину

$$i \frac{d}{dt} \psi(t) = H\psi(t). \quad (2.3)$$

Пример 2.2. Оператор положаја $(x_j\psi)(x) = x_j\psi(x)$ и оператор импулса $p_j = -i\partial_j$ нису дефинисани на целом $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Решење. Нека је $\psi(x) = \frac{1}{1+|x|}$, $x \in \mathbb{R}$. Тада је

$$\|\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} \frac{dx}{(1+|x|)^2} = 2 \int_0^\infty \frac{dx}{(1+x)^2} = 2 \left[-\frac{1}{1+x} \right]_0^\infty = 2 < \infty,$$

па је $\psi \in L^2(\mathbb{R})$. С друге стране, за $x \geq 1$ важи $1+x \leq 2x$, тј. $\frac{x}{1+x} \geq \frac{1}{2}$, па је

$$\|x\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} \frac{x^2}{(1+|x|)^2} dx \geq \int_1^\infty \left(\frac{x}{1+x} \right)^2 dx \geq \int_1^\infty \frac{1}{4} dx = \infty.$$

Дакле, $x\psi \notin L^2(\mathbb{R})$.

За $n > 1$ ставимо $\Psi(x) = \psi(x_j) \prod_{i \neq j} e^{-x_i^2/2}$. По Тонелијевој теореме (Теорема 1.3), користећи $\int_{\mathbb{R}} e^{-t^2} dt = \sqrt{\pi}$, добијамо

$$\|\Psi\|^2 = \|\psi\|^2 \pi^{(n-1)/2} < \infty, \quad \|x_j\Psi\|^2 = \|x\psi\|^2 \pi^{(n-1)/2} = \infty,$$

па је $\Psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$, а $x_j\Psi \notin L^2(\mathbb{R}^n)$.

Тврђење за оператор импулса доказујемо у Напомени 2.25, пошто уведемо Фуријеову трансформацију. $\square$

2.2 Неограничени оператори у Хилбертовим просторима

2.2.1 Домен и густо дефинисани оператори

Дефиниција 2.3. Линеаран оператор у $\mathfrak{H}$ је линеарно пресликавање $A: \mathfrak{D}(A) \rightarrow \mathfrak{H}$, где је $\mathfrak{D}(A) \subseteq \mathfrak{H}$ линеаран потпростор (домен). Оператор је густо дефинисан ако је $\mathfrak{D}(A)$ густ у $\mathfrak{H}$. Пишемо $A \subseteq B$ ако је $\mathfrak{D}(A) \subseteq \mathfrak{D}(B)$ и $B\psi = A\psi$ за $\psi \in \mathfrak{D}(A)$. *Језгро* и *слика* оператора A су

$$\text{Ker}(A) = \{\psi \in \mathfrak{D}(A) \mid A\psi = 0\}, \quad \text{Ran}(A) = \{A\psi \mid \psi \in \mathfrak{D}(A)\}.$$

Дефиниција 2.4. Оператори A и B у $\mathfrak{H}$ су *унитарно еквивалентни* ако постоји унитаран оператор U такав да је $B = UAU^{-1}$, тј. $\mathfrak{D}(B) = U\mathfrak{D}(A)$ и $BU\psi = UA\psi$ за $\psi \in \mathfrak{D}(A)$.

2.2.2 Затворени и затвориви оператори

Дефиниција 2.5. Граф оператора је $\Gamma(A) = \{(\psi, A\psi) \mid \psi \in \mathfrak{D}(A)\} \subseteq \mathfrak{H} \oplus \mathfrak{H}$. Оператор A је затворен ако је $\Gamma(A)$ затворен скуп, а затворив ако затворење $\overline{\Gamma(A)}$ јесте граф неког оператора $\overline{A}$ (затворење оператора A).

Теорема 2.6 (затворени граф, [7, Теорема 2.9]). *Нека је $A: \mathfrak{H}_1 \rightarrow \mathfrak{H}_2$ линеаран оператор дефинисан на целом $\mathfrak{H}_1$. Тада је A ограничен ако и само ако је затворен.*

2.2.3 Адјунговани оператор

Дефиниција 2.7. Нека је A густо дефинисан. Адјунговани оператор A^* дефинише се са

$$\mathfrak{D}(A^*) = \{\psi \in \mathfrak{H} \mid \exists \tilde{\psi} \in \mathfrak{H} : \langle \psi, A\varphi \rangle = \langle \tilde{\psi}, \varphi \rangle \text{ за све } \varphi \in \mathfrak{D}(A)\}, \quad (2.4)$$

$$A^*\psi = \tilde{\psi}. \quad (2.5)$$

Лема 2.8 ([7, Лема 2.4 и (2.21), (2.28)]). *Нека је A густо дефинисан. Тада:*

- (i) A^* је затворен;
- (ii) A је затворив ако и само ако је $\mathfrak{D}(A^*)$ густ, и тада је $\overline{A} = A^{**}$ и $(\overline{A})^* = A^*$;
- (iii) $\text{Ker}(A^*) = \text{Ran}(A)^\perp$;
- (iv) ако је $A \subseteq B$, онда је $B^* \subseteq A^*$.

Доказ. Посматрајмо оператор U на Хилбертовом простору $\mathfrak{H}^2 = \mathfrak{H} \oplus \mathfrak{H}$ дат са

$$U(\varphi, \psi) = (\psi, -\varphi).$$

Оператор U је унитаран и важи $U^{-1} = -U$. Како U чува скаларни производ и бијекција је, за сваки скуп $M \subseteq \mathfrak{H}^2$ важи $UM^\perp = (UM)^\perp$.

(i) Из

$$\begin{aligned} \Gamma(A^*) &= \{(\varphi, \tilde{\varphi}) \in \mathfrak{H}^2 \mid \langle \varphi, A\psi \rangle = \langle \tilde{\varphi}, \psi \rangle, \forall \psi \in \mathfrak{D}(A)\} \\ &= \{(\varphi, \tilde{\varphi}) \in \mathfrak{H}^2 \mid \langle (\varphi, \tilde{\varphi}), (A\psi, -\psi) \rangle_{\mathfrak{H}^2} = 0, \forall \psi \in \mathfrak{D}(A)\} \\ &= \{(\varphi, \tilde{\varphi}) \in \mathfrak{H}^2 \mid \langle (\varphi, \tilde{\varphi}), U(\psi, A\psi) \rangle_{\mathfrak{H}^2} = 0, \forall \psi \in \mathfrak{D}(A)\} \\ &= (U\Gamma(A))^\perp \end{aligned} \quad (2.6)$$

закључујемо да је $\Gamma(A^*)$ затворен, као ортогонални комплемент, па је A^* затворен.

(ii) Слично, користећи $U\Gamma^\perp = (U\Gamma)^\perp$ и (i), добијамо $\Gamma(A)^\perp = U^{-1}\Gamma(A^*)$, па је

$$\begin{aligned}\overline{\Gamma(A)} &= \Gamma(A)^{\perp\perp} = (U^{-1}\Gamma(A^*))^\perp \\ &= \{(\psi, \tilde{\psi}) \in \mathfrak{H}^2 \mid \langle (\psi, \tilde{\psi}), (-A^*\varphi, \varphi) \rangle_{\mathfrak{H}^2} = 0, \forall \varphi \in \mathfrak{D}(A^*)\} \\ &= \{(\psi, \tilde{\psi}) \in \mathfrak{H}^2 \mid \langle \psi, A^*\varphi \rangle - \langle \tilde{\psi}, \varphi \rangle = 0, \forall \varphi \in \mathfrak{D}(A^*)\}.\end{aligned}\quad (2.7)$$

Одавде видимо да $(0, \tilde{\psi}) \in \overline{\Gamma(A)}$ ако и само ако $\tilde{\psi} \in \mathfrak{D}(A^*)^\perp$. Према томе, A је затворив ако и само ако је $\mathfrak{D}(A^*)^\perp = \{0\}$, тј. ако и само ако је $\mathfrak{D}(A^*)$ густ.

У том случају, како је $\Gamma(\bar{A}) = \overline{\Gamma(A)}$, једнакост (2.6) даје

$$\Gamma((\bar{A})^*) = (U\overline{\Gamma(A)})^\perp = (\overline{U\Gamma(A)})^\perp = (U\Gamma(A))^\perp = \Gamma(A^*),$$

тј. $(\bar{A})^* = A^*$. Најзад, ако у (2.6) заменимо A са A^* и искористимо $U = -U^{-1}$, добијамо

$$\Gamma(A^{**}) = (U\Gamma(A^*))^\perp = (-U^{-1}\Gamma(A^*))^\perp = (U^{-1}\Gamma(A^*))^\perp,$$

што је, по (2.7), једнако $\overline{\Gamma(A)} = \Gamma(\bar{A})$. Дакле, $A^{**} = \bar{A}$.

(iii) Ако је $\psi \in \text{Ker}(A^*)$, онда је $\langle \psi, A\varphi \rangle = \langle A^*\psi, \varphi \rangle = 0$ за свако $\varphi \in \mathfrak{D}(A)$, па је $\psi \in \text{Ran}(A)^\perp$. Обратно, ако је $\psi \in \text{Ran}(A)^\perp$, онда је $\langle \psi, A\varphi \rangle = 0 = \langle 0, \varphi \rangle$ за свако $\varphi \in \mathfrak{D}(A)$, па по (2.4)–(2.5) важи $\psi \in \mathfrak{D}(A^*)$ и $A^*\psi = 0$.

(iv) Нека је $A \subseteq B$. Тада је $\mathfrak{D}(B) \supseteq \mathfrak{D}(A)$ густ, па је B^* добро дефинисан. Ако је $\psi \in \mathfrak{D}(B^*)$, онда за свако $\varphi \in \mathfrak{D}(A)$ важи

$$\langle \psi, A\varphi \rangle = \langle \psi, B\varphi \rangle = \langle B^*\psi, \varphi \rangle,$$

па је $\psi \in \mathfrak{D}(A^*)$ и $A^*\psi = B^*\psi$. Дакле, $B^* \subseteq A^*$. □

2.3 Симетрични и самоадјунговани оператори

2.3.1 Дефиниције и основна својства

Дефиниција 2.9. Густо дефинисан оператор A је симетричан ако је $\langle \varphi, A\psi \rangle = \langle A\varphi, \psi \rangle$ за све $\varphi, \psi \in \mathfrak{D}(A)$, тј. ако је $A \subseteq A^*$. Оператор је самоадјунгован ако је $A = A^*$.

Лема 2.10 ([7, Лема 2.1]). *Густо дефинисан оператор A је симетричан ако и само ако је $\langle \psi, A\psi \rangle \in \mathbb{R}$ за све $\psi \in \mathfrak{D}(A)$.*

Доказ. Ако је A симетричан, онда је $\langle \psi, A\psi \rangle = \langle A\psi, \psi \rangle = \overline{\langle \psi, A\psi \rangle}$, па је $\langle \psi, A\psi \rangle \in \mathbb{R}$. Обратно, нека је $q_A(\psi) = \langle \psi, A\psi \rangle$ реално за свако $\psi \in \mathfrak{D}(A)$. Узимањем имаги-

нарног дела идентитета

$$q_A(\psi + i\varphi) = q_A(\psi) + q_A(\varphi) + i(\langle \psi, A\varphi \rangle - \langle \varphi, A\psi \rangle)$$

добиамо $\operatorname{Re}\langle A\varphi, \psi \rangle = \operatorname{Re}\langle \varphi, A\psi \rangle$. Заменом φ са $i\varphi$ добијамо и $\operatorname{Im}\langle A\varphi, \psi \rangle = \operatorname{Im}\langle \varphi, A\psi \rangle$, па је $\langle A\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, A\psi \rangle$. $\square$

Последица 2.11 ([7, Последица 2.2]). *Самоадјунговани оператори су максимални: немају право симетрично проширење.*

Доказ. Ако је A самоадјунгован и B симетрично проширење оператора A , онда по Лему 2.8 (iv) важи $A \subseteq B \subseteq B^* \subseteq A^* = A$, па је $B = A$. $\square$

Пример 2.12 (оператор множења, [7, §2.2]). Нека је $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ мерљива функција и

$$(M_V f)(x) = V(x)f(x), \quad \mathfrak{D}(M_V) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid Vf \in L^2(\mathbb{R}^n)\}. \quad (2.8)$$

Тада је $\mathfrak{D}(M_V)$ густ, $M_V^* = M_{\overline{V}}$, па је M_V самоадјунгован ако је V реална функција.

Пример 2.13 ([7, §2.2]). На $L^2(0, 2\pi)$ оператор $A_0 = -i \frac{d}{dx}$ са рубним условима $f(0) = f(2\pi) = 0$ је симетричан, али није самоадјунгован, док је исти оператор са периодичним условом $f(0) = f(2\pi)$ самоадјунгован.

Решење. Нека је $\mathfrak{H} = L^2(0, 2\pi)$. Са $AC[0, 2\pi]$ означавамо скуп апсолутно непрекидних функција, тј. функција облика $f(x) = f(0) + \int_0^x h(t) dt$, $h \in L^1(0, 2\pi)$, и нека је

$$H^1(0, 2\pi) = \{f \in AC[0, 2\pi] \mid f' \in L^2(0, 2\pi)\}.$$

Прецизније, посматрамо операторе

$$\begin{aligned} A_0 f &= -i f', & \mathfrak{D}(A_0) &= \{f \in C^1[0, 2\pi] \mid f(0) = f(2\pi) = 0\}, \\ A f &= -i f', & \mathfrak{D}(A) &= \{f \in H^1(0, 2\pi) \mid f(0) = f(2\pi)\}. \end{aligned}$$

Оба домена садрже $C_c^\infty(0, 2\pi)$, па су густе, и важи $A_0 \subseteq A$. За $f, g \in AC[0, 2\pi]$ важи формула парцијалне интеграције

$$\int_0^{2\pi} \overline{g(x)} f'(x) dx = \overline{g(2\pi)} f(2\pi) - \overline{g(0)} f(0) - \int_0^{2\pi} \overline{g'(x)} f(x) dx, \quad (2.9)$$

одакле за $f, g \in H^1(0, 2\pi)$ добијамо

$$\langle g, -i f' \rangle - \langle -i g', f \rangle = -i \int_0^{2\pi} (\overline{g} f' + \overline{g'} f) dx = i(f(0)\overline{g(0)} - f(2\pi)\overline{g(2\pi)}). \quad (2.10)$$

Адјунговани оператор оператора A_0 . Нека је $g \in \mathfrak{D}(A_0^*)$ и $\tilde{g} = A_0^*g$. Тада је

$$\int_0^{2\pi} \overline{g(x)} (-if'(x)) dx = \int_0^{2\pi} \overline{\tilde{g}(x)} f(x) dx \quad \text{за све } f \in \mathfrak{D}(A_0). \quad (2.11)$$

Нека је $G(x) = \int_0^x \tilde{g}(t) dt$. Тада је $G \in AC[0, 2\pi]$ и $G' = \tilde{g}$. Како је $f(0) = f(2\pi) = 0$, по (2.9) је $\int_0^{2\pi} \overline{\tilde{g}} f dx = - \int_0^{2\pi} \overline{G} f' dx$, па (2.11) постаје

$$\int_0^{2\pi} (-i \overline{g(x)} + \overline{G(x)}) f'(x) dx = -i \int_0^{2\pi} \overline{(g(x) - iG(x))} f'(x) dx = 0,$$

тј. $g - iG \in \{f' \mid f \in \mathfrak{D}(A_0)\}^\perp$. Ако је $f \in \mathfrak{D}(A_0)$, онда је $\int_0^{2\pi} f'(t) dt = f(2\pi) - f(0) = 0$. Обратно, ако је $h \in C[0, 2\pi]$ и $\int_0^{2\pi} h(t) dt = 0$, онда $f(x) = \int_0^x h(t) dt$ припада $\mathfrak{D}(A_0)$ и $f' = h$. Дакле,

$$\{f' \mid f \in \mathfrak{D}(A_0)\} = \{h \in C[0, 2\pi] \mid \langle 1, h \rangle = 0\}.$$

Овај скуп је густ у $\{1\}^\perp$: ако је $h \in \{1\}^\perp$ и $h_k \in C[0, 2\pi]$, $h_k \rightarrow h$, онда функције $h_k - \frac{1}{2\pi} \langle 1, h_k \rangle$ припадају том скупу и теже ка $h - \frac{1}{2\pi} \langle 1, h \rangle = h$. Отуда је $\{f' \mid f \in \mathfrak{D}(A_0)\}^\perp = \{1\}^{\perp\perp} = \text{span}\{1\}$, па је $g - iG$ константа, тј.

$$g(x) = g(0) + i \int_0^x \tilde{g}(t) dt.$$

Дакле, $g \in AC[0, 2\pi]$, $g' = i\tilde{g} \in L^2(0, 2\pi)$ и $A_0^*g = \tilde{g} = -ig'$, па је $g \in H^1(0, 2\pi)$. Обратно, ако је $g \in H^1(0, 2\pi)$, по (2.10) услов (2.11) важи са $\tilde{g} = -ig'$, јер је $f(0) = f(2\pi) = 0$. Закључујемо да је

$$A_0^*f = -if', \quad \mathfrak{D}(A_0^*) = H^1(0, 2\pi).$$

Специјално, $A_0 \subseteq A_0^*$, па је A_0 симетричан. Међутим, $1 \in \mathfrak{D}(A_0^*) \setminus \mathfrak{D}(A_0)$, па A_0 није самоадјунгован.

Израчунајмо и $\overline{A_0} = A_0^{**}$. Из $A_0 \subseteq A_0^*$ и Леме 2.8 (iv) следи $A_0^{**} \subseteq A_0^*$, па за $f \in \mathfrak{D}(A_0^{**})$ и $g \in \mathfrak{D}(A_0^*)$ из (2.10) добијамо

$$0 = \langle g, A_0^{**}f \rangle - \langle A_0^*g, f \rangle = i(f(0)\overline{g(0)} - f(2\pi)\overline{g(2\pi)}).$$

За $g(x) = 1 - \frac{x}{2\pi}$ добијамо $f(0) = 0$, а за $g(x) = \frac{x}{2\pi}$ добијамо $f(2\pi) = 0$. Обратно, за $f \in H^1(0, 2\pi)$ са $f(0) = f(2\pi) = 0$ израз на десној страни нестаје за свако $g \in \mathfrak{D}(A_0^*)$. Дакле,

$$\overline{A_0}f = -if', \quad \mathfrak{D}(\overline{A_0}) = \{f \in H^1(0, 2\pi) \mid f(0) = f(2\pi) = 0\}.$$

Адјунговани оператор оператора A . Како је $A_0 \subseteq A$, по Лемми 2.8 (iv) важи $A^* \subseteq A_0^*$, па је $\mathfrak{D}(A^*) \subseteq H^1(0, 2\pi)$ и $A^*g = -i g'$. По (2.10), за $g \in \mathfrak{D}(A^*)$ и свако $f \in \mathfrak{D}(A)$ важи

$$0 = \langle g, Af \rangle - \langle A^*g, f \rangle = i(f(0)\overline{g(0)} - f(2\pi)\overline{g(2\pi)}) = i f(0)(\overline{g(0)} - \overline{g(2\pi)}).$$

За $f \equiv 1 \in \mathfrak{D}(A)$ одавде следи $g(0) = g(2\pi)$, тј. $g \in \mathfrak{D}(A)$. Обратно, за $g \in \mathfrak{D}(A)$ десна страна нестаје за свако $f \in \mathfrak{D}(A)$, па је $g \in \mathfrak{D}(A^*)$. Дакле, $A^* = A$, тј. A је самоадјунгован.

Сопствене вредности. Сопствени вектор оператора A_0 је решење $u \neq 0$ једначине $A_0u = zu$, $z \in \mathbb{C}$, тј.

$$-i u'(x) = z u(x),$$

које задовољава $u(0) = u(2\pi) = 0$. Опште решење ове једначине је $u(x) = u(0) e^{izx}$, па из $u(0) = 0$ следи $u \equiv 0$. Дакле, A_0 нема сопствених вредности. Исто важи и за $\overline{A_0}$: ако је $u \in H^1(0, 2\pi)$ и $u' = izu$, онда је $(u(x)e^{-izx})' = 0$ скоро свуда, па је опет $u(x) = u(0) e^{izx}$.

За оператор A решења су поново облика $u(x) = u(0) e^{izx}$, а услов $u(0) = u(2\pi)$ даје $u(0) = u(0) e^{2\pi iz}$. За $u \neq 0$ мора бити $e^{2\pi iz} = 1$, тј. $z \in \mathbb{Z}$. Дакле, сопствене вредности оператора A су $n \in \mathbb{Z}$, са нормираним сопственим векторима

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{inx}, \quad n \in \mathbb{Z},$$

који чине ортонормирану базу простора $L^2(0, 2\pi)$ (видети нпр. [5]).

Најзад, свако $z \in \mathbb{C}$ је сопствена вредност оператора A_0^* , јер је $e^{izx} \in H^1(0, 2\pi)$ и $A_0^*e^{izx} = z e^{izx}$. $\square$

2.3.2 Есенцијална самоадјунгованост и језгро оператора

Дефиниција 2.14. Симетричан оператор A је есенцијално самоадјунгован ако је $\overline{A}$ самоадјунгован. Потпростор $D \subseteq \mathfrak{D}(B)$ је језгро самоадјунгованог оператора B ако је $\overline{B|_D} = B$.

Теорема 2.15 (основни критеријум, [7, Лема 2.3 и Последица 2.8]). *Нека је A симетричан. Тада:*

- (i) *ако је $\text{Ran}(A + z) = \text{Ran}(A + \bar{z}) = \mathfrak{H}$ за неко $z \in \mathbb{C}$, онда је A самоадјунгован;*
- (ii) *A је есенцијално самоадјунгован ако и само ако су $\text{Ran}(A - z)$ и $\text{Ran}(A - \bar{z})$ густе у $\mathfrak{H}$ за неко $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, нпр. $z = i$.*

Доказ. Најпре приметимо да за $w \in \mathbb{C}$ важи $(A+w)^* = A^* + \bar{w}$, јер је $\langle \psi, (A+w)\varphi \rangle = \langle \psi, A\varphi \rangle + \langle \bar{w}\psi, \varphi \rangle$ за све $\varphi \in \mathfrak{D}(A)$.

(i) Нека је $\psi \in \mathfrak{D}(A^*)$ и $A^*\psi = \tilde{\psi}$. Како је $\text{Ran}(A + \bar{z}) = \mathfrak{H}$, постоји $\vartheta \in \mathfrak{D}(A)$ такво да је $(A + \bar{z})\vartheta = \tilde{\psi} + \bar{z}\psi$. Сада за свако $\varphi \in \mathfrak{D}(A)$, користећи симетричност оператора A , добијамо

$$\begin{aligned}\langle \psi, (A + z)\varphi \rangle &= \langle \psi, A\varphi \rangle + z\langle \psi, \varphi \rangle = \langle \tilde{\psi} + \bar{z}\psi, \varphi \rangle = \langle (A + \bar{z})\vartheta, \varphi \rangle \\ &= \langle A\vartheta, \varphi \rangle + z\langle \vartheta, \varphi \rangle = \langle \vartheta, (A + z)\varphi \rangle.\end{aligned}$$

Дакле, $\psi - \vartheta \in \text{Ran}(A + z)^\perp = \{0\}$, па је $\psi = \vartheta \in \mathfrak{D}(A)$. Према томе, $\mathfrak{D}(A^*) \subseteq \mathfrak{D}(A)$, а како је $A \subseteq A^*$, следи $A = A^*$.

(ii) Нека је $z = x + iy$, $y \neq 0$. За $\psi \in \mathfrak{D}(A)$ важи

$$\begin{aligned}\|(A - z)\psi\|^2 &= \|(A - x)\psi - iy\psi\|^2 = \|(A - x)\psi\|^2 + y^2\|\psi\|^2 - 2\text{Re}(iy\langle (A - x)\psi, \psi \rangle) \\ &= \|(A - x)\psi\|^2 + y^2\|\psi\|^2 \geq y^2\|\psi\|^2,\end{aligned}\tag{2.12}$$

јер је $\langle (A - x)\psi, \psi \rangle \in \mathbb{R}$ по Лемми 2.10. Специјално, $\text{Ker}(A - z) = \{0\}$.

Оператор A је симетричан, па је $\mathfrak{D}(A^*) \supseteq \mathfrak{D}(A)$ густ. По Лемми 2.8 (ii), A је затворив, $\bar{A} = A^{**}$ и $(\bar{A})^* = A^*$. Из $A \subseteq A^*$ и Леме 2.8 (iv) следи $\bar{A} = A^{**} \subseteq A^* = (\bar{A})^*$, тј. $\bar{A}$ је симетричан, па оцена (2.12) важи и за $\bar{A}$.

Покажимо да је

$$\text{Ran}(\bar{A} - z) = \overline{\text{Ran}(A - z)}.\tag{2.13}$$

Ако је $\psi \in \mathfrak{D}(\bar{A})$, постоји низ $\psi_k \in \mathfrak{D}(A)$ такав да $\psi_k \rightarrow \psi$ и $A\psi_k \rightarrow \bar{A}\psi$, па $(A - z)\psi_k \rightarrow (\bar{A} - z)\psi$. Обратно, нека $(A - z)\psi_k \rightarrow \eta$ за неки низ $\psi_k \in \mathfrak{D}(A)$. Из (2.12) је $\|\psi_k - \psi_m\| \leq |y|^{-1}\|(A - z)(\psi_k - \psi_m)\|$, па је (ψ_k) Кошијев (Cauchy) низ и $\psi_k \rightarrow \psi$ за неко $\psi \in \mathfrak{H}$. Тада $A\psi_k = (A - z)\psi_k + z\psi_k \rightarrow \eta + z\psi$, па је $(\psi, \eta + z\psi) \in \Gamma(A) = \Gamma(\bar{A})$, тј. $\psi \in \mathfrak{D}(\bar{A})$ и $(\bar{A} - z)\psi = \eta$.

Ако су $\text{Ran}(A - z)$ и $\text{Ran}(A - \bar{z})$ густе, из (2.13), примењене на z и $\bar{z}$, следи $\text{Ran}(\bar{A} - z) = \text{Ran}(\bar{A} - \bar{z}) = \mathfrak{H}$. По делу (i), примењеном на симетричан оператор $\bar{A}$ и на $-z$, оператор $\bar{A}$ је самоадјунгован.

Обратно, нека је $\bar{A}$ самоадјунгован. Тада је $A^* = (\bar{A})^* = \bar{A}$, па из (2.12) за $\bar{A}$ следи $\text{Ker}(A^* - \bar{z}) = \text{Ker}(A^* - z) = \{0\}$. Како је $(A - z)^* = A^* - \bar{z}$, по Лемми 2.8 (iii) је

$$\text{Ran}(A - z)^\perp = \text{Ker}(A^* - \bar{z}) = \{0\}, \quad \text{Ran}(A - \bar{z})^\perp = \text{Ker}(A^* - z) = \{0\},$$

тј. $\text{Ran}(A - z)$ и $\text{Ran}(A - \bar{z})$ су густе у $\mathfrak{H}$. □

2.3.3 Значај самоадјунгованости у квантној механици

Теорема 2.16 (Хелингер–Теплиц (Hellinger–Toeplitz), [7, Теорема 2.10]). *Симетричан оператор дефинисан на целом $\mathfrak{H}$ је ограничен.*

Према томе, опсервабле као што је енергија, које нису ограничене, морају бити дефинисане на правом подскупу $\mathfrak{H}$. Самоадјунгованост обезбеђује да спектар буде реалан (Теорема 3.9) и да оператор генерише унитарну временску еволуцију (одељак 3.7).

2.4 Квадратне форме

Дефиниција 2.17. Квадратна форма оператора A је $q_A(\psi) = \langle \psi, A\psi \rangle$, $\psi \in \mathfrak{D}(A)$. Оператор је ненегативан, $A \geq 0$, ако је $q_A(\psi) \geq 0$ за све $\psi \in \mathfrak{D}(A)$.

Теорема 2.18 ([7, Теорема 2.14]). *Свакој затвореној полуограниченој квадратној форми q одговара јединствен самоадјунгован оператор A такав да је $q = q_A$.*

Теорема 2.19 (Фридрихово (Friedrichs) проширење, [7, Теорема 2.13]). *Сваки полуограничен симетричан оператор има самоадјунговано проширење са истом доњом границом.*

2.5 Фуријеова трансформација

2.5.1 Фуријеова трансформација на $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$

Дефиниција 2.20. За $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ Фуријеова трансформација је

$$(\mathcal{F}f)(p) = \hat{f}(p) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ipx} f(x) dx. \quad (2.14)$$

2.5.2 Превођење парцијалних извода у операторе множења

Лема 2.21 ([7, Лема 7.1]). *За $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ и сваки мулти-индекс α важи*

$$(\partial^\alpha f)^\wedge(p) = (ip)^\alpha \hat{f}(p), \quad (x^\alpha f)^\wedge(p) = i^{|\alpha|} \partial^\alpha \hat{f}(p). \quad (2.15)$$

Посебно је $(-\Delta f)^\wedge(p) = |p|^2 \hat{f}(p)$.

2.5.3 Инверзна Фуријеова трансформација

Лема 2.22 ([7, Лема 7.3]). *За $\operatorname{Re} z > 0$ важи $\mathcal{F}(e^{-z|x|^2/2})(p) = z^{-n/2} e^{-|p|^2/(2z)}$.*

Теорема 2.23 ([7, Теорема 7.4]). *Фуријеова трансформација је бијекција $\mathcal{F}: \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, а инверз је*

$$(\mathcal{F}^{-1}g)(x) = \check{g}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ipx} g(p) dp. \quad (2.16)$$

Доказ. За $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subseteq L^1(\mathbb{R}^n)$ важи $|\hat{g}(p)| \leq (2\pi)^{-n/2} \|g\|_1$. Интеграцијом по деловима и диференцирањем под знаком интеграла добијамо $p^\alpha \partial^\beta \hat{f} = (-i)^{|\alpha|+|\beta|} (\partial^\alpha (x^\beta f))^\wedge$ (Лема 2.21), а како је $\partial^\alpha (x^\beta f) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, функција $p^\alpha \partial^\beta \hat{f}$ је ограничена. Дакле, $\mathcal{F}(\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)) \subseteq \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$.

Нека је $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ и $\phi_\varepsilon(p) = e^{-\varepsilon|p|^2/2}$, $\varepsilon > 0$. По теореме о доминантној конвергенцији (јер $\phi_\varepsilon \rightarrow 1$ и $|\phi_\varepsilon \hat{f}| \leq |\hat{f}| \in L^1(\mathbb{R}^n)$) имамо

$$\begin{aligned} (\hat{f})^\vee(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ipx} \hat{f}(p) dp = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} \phi_\varepsilon(p) e^{ipx} \hat{f}(p) dp \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} \phi_\varepsilon(p) e^{ip(x-y)} f(y) dy dp. \end{aligned}$$

Подинтегрална функција је интеграбилна на $\mathbb{R}^{2n}$, па по Фубинијевој теореме и Лема 2.22 (са $z = \varepsilon$) добијамо

$$\begin{aligned} (\hat{f})^\vee(x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} (\mathcal{F}\phi_\varepsilon)(y-x) f(y) dy \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{\varepsilon^{n/2}} e^{-|y-x|^2/(2\varepsilon)} f(y) dy \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-|u|^2/2} f(x + \sqrt{\varepsilon} u) du = f(x), \end{aligned}$$

где смо увели смену $y = x + \sqrt{\varepsilon} u$ и поново искористили доминантну конвергенцију (јер је $|f| \leq \|f\|_\infty$) и $\int_{\mathbb{R}^n} e^{-|u|^2/2} du = (2\pi)^{n/2}$. Дакле, $\mathcal{F}^{-1} \mathcal{F} f = f$ за $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$.

Нека је $(Rf)(x) = f(-x)$. Из дефиниција следи $\mathcal{F}^{-1} = R\mathcal{F} = \mathcal{F}R$, па $\mathcal{F}^{-1}$ такође пресликава $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ у $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Из $\mathcal{F}^{-1} \mathcal{F} = R\mathcal{F}\mathcal{F} = I$ и $R^2 = I$ следи $\mathcal{F}\mathcal{F} = R$, па је $\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1} = \mathcal{F}\mathcal{F}R = R^2 = I$. Према томе, $\mathcal{F}: \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ је бијекција са инверзом $\mathcal{F}^{-1}$. $\square$

2.5.4 Планшерелова теорема и проширење на $L^2(\mathbb{R}^n)$

Теорема 2.24 (Планшерел (Plancherel), [7, Теорема 7.5]). *Фуријеова трансформација се проширује до унитарног оператора $\mathcal{F}: L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$, тј. $\|\hat{f}\| = \|f\|$ за све $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$.*

Доказ. Нека је $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Како је $\overline{\hat{f}(p)} = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ipx} \overline{f(x)} dx$ и $f, \hat{f} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subseteq L^1(\mathbb{R}^n)$, по Фубинијевој теореме и Теореме 2.23 добијамо

$$\begin{aligned} \|\hat{f}\|^2 &= \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\hat{f}(p)} \hat{f}(p) dp = \int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(x)} \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ipx} \hat{f}(p) dp dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(x)} f(x) dx = \|f\|^2. \end{aligned}$$

Нека је сада $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Како је $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ густ у $L^2(\mathbb{R}^n)$, постоји низ $f_k \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$

такав да $f_k \rightarrow f$. Из $\|\hat{f}_k - \hat{f}_m\| = \|f_k - f_m\|$ следи да је $(\hat{f}_k)$ Кошијев низ, па дефинишемо $\mathcal{F}f = \hat{f} = \lim_{k \rightarrow \infty} \hat{f}_k$. Ова граница не зависи од избора низа: ако $g_k \rightarrow f$, $g_k \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, онда $\|\hat{f}_k - \hat{g}_k\| = \|f_k - g_k\| \rightarrow 0$. Тако дефинисан оператор $\mathcal{F}$ је линеаран, поклапа се са (2.14) на $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, а због непрекидности нормe важи $\|\hat{f}\| = \lim_{k \rightarrow \infty} \|\hat{f}_k\| = \lim_{k \rightarrow \infty} \|f_k\| = \|f\|$.

Остаје да покажемо да је $\mathcal{F}$ сурјективан. Скуп $\text{Ran}(\mathcal{F})$ је затворен: ако $\hat{f}_k \rightarrow g$, онда је (f_k) Кошијев низ, $f_k \rightarrow f$, и $g = \hat{f}$. Са друге стране, по Теорему 2.23 је $\text{Ran}(\mathcal{F}) \supseteq \mathcal{F}(\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)) = \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, што је густ скуп. Дакле, $\text{Ran}(\mathcal{F}) = L^2(\mathbb{R}^n)$, па је $\mathcal{F}$ унитаран. $\square$

Напомена 2.25 (оператор импулса). Сада можемо довршити Пример 2.2. По Лемми 2.21 је $(-i\partial_j\varphi)^\wedge(p) = p_j\hat{\varphi}(p)$ за $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, па се оператор импулса p_j дефинише као $\mathcal{F}^{-1}M_{p_j}\mathcal{F}$, где је M_{p_j} множење координатом p_j (Пример 2.12). Нека је Ψ функција из решења Примера 2.2 и $\varphi = \mathcal{F}^{-1}\Psi$. По Теорему 2.24 је $\|\varphi\| = \|\Psi\| < \infty$, док је

$$\|p_j\varphi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^n} |p_j|^2 |\Psi(p)|^2 dp = \|x_j\Psi\|^2 = \infty.$$

Дакле, ни p_j није дефинисан на целом $L^2(\mathbb{R}^n)$.

2.5.5 Опис простора Собољева преко Фуријеове трансформације

Дефиниција 2.26. За $s \geq 0$ дефинишемо

$$H^s(\mathbb{R}^n) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid (1 + |p|^2)^{s/2} \hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^n)\}, \quad (2.17)$$

са скаларним производом $\langle f, g \rangle_{H^s} = \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\hat{f}(p)} \hat{g}(p) (1 + |p|^2)^s dp$.

Тврђење 2.27 ([7, §7.2], [1]). За $s = t \in \mathbb{N}_0$ ова дефиниција се поклапа са дефиницијом преко слабих извода из одељка 1.4, и за $|\alpha| \leq t$ важи $\partial^\alpha f = ((ip)^\alpha \hat{f})^\vee$.

Глава 3

Спектрална теорија неограничених оператора

У овој глави излажемо спектралну теорију (видети [7, §2.4, §3.1–§3.3 и §5.1]) прилагођену слободном Шредингеровом оператору, углавном директним функционално-аналитичким методама. Општу спектралну теорему наводимо без доказа (одељак 3.6), а за слободни Шредингеров оператор сви објекти које она уводи рачунају се експлицитно.

3.1 Резолвентни скуп и резолвента

Дефиниција 3.1. Нека је A густо дефинисан затворен оператор. Резолвентни скуп је

$$\rho(A) = \{z \in \mathbb{C} \mid A - z: \mathfrak{D}(A) \rightarrow \mathfrak{H} \text{ је бијекција и } (A - z)^{-1} \text{ је ограничен}\}. \quad (3.1)$$

Резолвента је пресликавање $R_A(z) = (A - z)^{-1}$, $z \in \rho(A)$.

Напомена 3.2. Због теореме о затвореном графу, за затворен A довољно је да $A - z$ буде бијекција.

Лема 3.3 (прва резолвентна формула, [7, (2.84)]). За $z, w \in \rho(A)$ важи

$$R_A(z) - R_A(w) = (z - w) R_A(z) R_A(w) = (z - w) R_A(w) R_A(z). \quad (3.2)$$

Доказ. Како је $(A - w) - (A - z) = z - w$ на $\mathfrak{D}(A)$, важи

$$R_A(z) - R_A(w) = R_A(z)((A - w) - (A - z))R_A(w) = (z - w) R_A(z) R_A(w).$$

Друга једнакост следи заменом улога z и w . □

Теорема 3.4 ([7, Теорема 2.16]). Скуп $\rho(A)$ је отворен, пресликавање $R_A: \rho(A) \rightarrow L(\mathfrak{H})$ је холоморфно и важи $\|R_A(z)\| \geq \text{dist}(z, \sigma(A))^{-1}$, где је $\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A)$ спектар оператора A (Дефиниција 3.5) и $\text{dist}(z, \sigma(A)) = \inf\{|z - w| \mid w \in \sigma(A)\}$ растојање тачке z од скупа $\sigma(A)$.

Доказ. Нека је $z_0 \in \rho(A)$ и $|z - z_0| < \|R_A(z_0)\|^{-1}$. Тада ред

$$R_\infty = \sum_{j=0}^{\infty} (z - z_0)^j R_A(z_0)^{j+1}$$

(Нојманов ред, С. Neumann) апсолутно конвергира у $L(\mathfrak{H})$, јер је $\|(z - z_0)^j R_A(z_0)^{j+1}\| \leq \|R_A(z_0)\| (|z - z_0| \|R_A(z_0)\|)^j$. Нека су $R_k = \sum_{j=0}^k (z - z_0)^j R_A(z_0)^{j+1}$ парцијалне суме. Како је $(A - z_0)R_A(z_0)^{j+1} = R_A(z_0)^j$, важи

$$(A - z_0)R_k = \sum_{j=0}^k (z - z_0)^j R_A(z_0)^j = I + (z - z_0)R_{k-1}.$$

Нека је $\psi \in \mathfrak{H}$, $\varphi_k = R_k \psi$ и $\varphi = R_\infty \psi$. Тада

$$A\varphi_k = (A - z_0)R_k \psi + z_0 \varphi_k = \psi + (z - z_0)\varphi_{k-1} + z_0 \varphi_k \rightarrow \psi + z\varphi.$$

Како $(\varphi_k, A\varphi_k) \rightarrow (\varphi, \psi + z\varphi)$ и A је затворен, следи $\varphi \in \mathfrak{D}(A)$ и $A\varphi = \psi + z\varphi$, тј. $(A - z)R_\infty \psi = \psi$. Слично, за $\psi \in \mathfrak{D}(A)$ из $R_A(z_0)^{j+1}(A - z_0)\psi = R_A(z_0)^j \psi$ добијамо

$$R_k(A - z)\psi = R_k(A - z_0)\psi - (z - z_0)R_k \psi = \psi + (z - z_0)(R_{k-1} - R_k)\psi \rightarrow \psi,$$

па је $R_\infty(A - z)\psi = \psi$. Дакле, $A - z$ је бијекција са ограниченим инверзом R_∞ , тј. $z \in \rho(A)$ и

$$R_A(z) = \sum_{j=0}^{\infty} (z - z_0)^j R_A(z_0)^{j+1}, \quad |z - z_0| < \|R_A(z_0)\|^{-1}.$$

Према томе, отворени диск полупречника $\|R_A(z_0)\|^{-1}$ око z_0 садржан је у $\rho(A)$, па је $\rho(A)$ отворен, а R_A се око сваке тачке $z_0 \in \rho(A)$ развија у апсолутно конвергентан степени ред, тј. холоморфно је. Најзад, како тај диск не сече $\sigma(A)$, важи $\text{dist}(z_0, \sigma(A)) \geq \|R_A(z_0)\|^{-1}$, што је тражена оцена. $\square$

3.2 Спектар оператора

Дефиниција 3.5. Спектар оператора A је $\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A)$. Ако је $\text{Ker}(A - z) \neq \{0\}$, z је сопствена вредност, а $\psi \in \text{Ker}(A - z) \setminus \{0\}$ сопствени вектор.

Последица 3.6. Спектар је затворен подскуп од $\mathbb{C}$.

Доказ. Скуп $\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A)$ је комплемент отвореног скупа (Теорема 3.4). $\square$

3.3 Класификација спектра

Дефиниција 3.7 ([6, §7.2]). За затворен оператор A дефинишемо:

- тачкасти спектар $\sigma_p(A) = \{z \in \mathbb{C} \mid A - z \text{ није инјективан}\}$;
- непрекидни спектар $\sigma_c(A)$: $A - z$ је инјективан, $\text{Ran}(A - z)$ је густ, а $(A - z)^{-1}$ није ограничен;
- резидуални спектар $\sigma_r(A)$: $A - z$ је инјективан, а $\text{Ran}(A - z)$ није густ.

Тада је $\sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_c(A) \cup \sigma_r(A)$, дисјунктна унија.

Пример 3.8. *Тачкасти спектар.* Самоадјунговани оператор $A = -i \frac{d}{dx}$ са периодичним условом из Примера 2.13 је затворен (Лема 2.8 (i)), а сваки цео број n је његова сопствена вредност са сопственим вектором e^{inx} . Дакле, $\mathbb{Z} \subseteq \sigma_p(A)$.

Непрекидни спектар. Нека је M_x оператор множења са x на $L^2(\mathbb{R})$ (Пример 2.12 са $V(x) = x$). Он је самоадјунгован, па и затворен. Нека је $\lambda \in \mathbb{R}$. Ако је $(x - \lambda)f(x) = 0$ скоро свуда, онда је $f = 0$ скоро свуда, па је $M_x - \lambda$ инјективан. По Леми 2.8 (iii) је $\text{Ran}(M_x - \lambda)^\perp = \text{Ker}(M_x - \lambda) = \{0\}$, па је $\text{Ran}(M_x - \lambda)$ густ. Најзад, за $f_k = \sqrt{k} \chi_{[\lambda, \lambda+1/k]}$ важи $\|f_k\| = 1$ и

$$\|(M_x - \lambda)f_k\|^2 = k \int_0^{1/k} s^2 ds = \frac{1}{3k^2} \rightarrow 0,$$

па $(M_x - \lambda)^{-1}$ није ограничен. Дакле, $\lambda \in \sigma_c(M_x)$, тј. $\mathbb{R} \subseteq \sigma_c(M_x)$.

Резидуални спектар. Посматрајмо затворење $\overline{A_0}$ оператора A_0 из Примера 2.13. За свако $z \in \mathbb{C}$ оператор $\overline{A_0} - z$ је инјективан, јер $\overline{A_0}$ нема сопствених вредности. С друге стране, по Леми 2.8 (ii) и (iii) је

$$\text{Ran}(\overline{A_0} - z)^\perp = \text{Ker}((\overline{A_0})^* - \bar{z}) = \text{Ker}(A_0^* - \bar{z}) \ni e^{izx} \neq 0,$$

па $\text{Ran}(\overline{A_0} - z)$ није густ. Дакле, $\sigma_r(\overline{A_0}) = \mathbb{C}$.

3.4 Спектар самоадјунгованих оператора

Теорема 3.9 ([7, Теорема 2.19 и Лема 2.21]). *Нека је A самоадјунгован. Тада:*

- (i) $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$ и $\|R_A(z)\| \leq |\text{Im } z|^{-1}$ за $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$;
- (ii) $\sigma_r(A) = \emptyset$;

(iii) сопствени вектори за различите сопствене вредности су ортогонални;

(iv) $A \geq 0$ ако и само ако је $\sigma(A) \subseteq [0, \infty)$.

Доказ. Оператор $A = A^*$ је затворен по Лему 2.8 (i), па је $\overline{A} = A$.

(i) Нека је $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. По оцени (2.12) оператор $A - z$ је инјективан и $\|(A - z)\psi\| \geq |\operatorname{Im} z| \|\psi\|$ за $\psi \in \mathfrak{D}(A)$. По (2.13) је $\operatorname{Ran}(A - z)$ затворен, а по Лему 2.8 (iii) је $\operatorname{Ran}(A - z)^\perp = \operatorname{Ker}(A - \bar{z}) = \{0\}$. Дакле, $\operatorname{Ran}(A - z) = \mathfrak{H}$, $z \in \rho(A)$ и, за $\varphi = (A - z)\psi$, $\|R_A(z)\varphi\| = \|\psi\| \leq |\operatorname{Im} z|^{-1} \|\varphi\|$.

(ii) Нека је $z \in \sigma(A)$ и $A - z$ инјективан. По (i) је $z \in \mathbb{R}$, па по Лему 2.8 (iii) важи

$$\operatorname{Ran}(A - z)^\perp = \operatorname{Ker}(A^* - \bar{z}) = \operatorname{Ker}(A - z) = \{0\},$$

тј. $\operatorname{Ran}(A - z)$ је густ. Дакле, $z \notin \sigma_r(A)$, тј. $\sigma_r(A) = \emptyset$.

(iii) Нека је $A\psi_j = \lambda_j\psi_j$, $\psi_j \neq 0$, $j = 1, 2$. Тада је

$$\lambda_1 \|\psi_1\|^2 = \langle \psi_1, A\psi_1 \rangle = \langle A\psi_1, \psi_1 \rangle = \overline{\lambda_1} \|\psi_1\|^2,$$

па је $\lambda_1 \in \mathbb{R}$, и слично $\lambda_2 \in \mathbb{R}$. Отуда

$$(\lambda_1 - \lambda_2) \langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \langle A\psi_1, \psi_2 \rangle - \langle \psi_1, A\psi_2 \rangle = 0,$$

па за $\lambda_1 \neq \lambda_2$ важи $\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = 0$.

(iv) Нека је $A \geq 0$ и $\lambda > 0$. За $\psi \in \mathfrak{D}(A)$ важи

$$\|(A + \lambda)\psi\|^2 = \|A\psi\|^2 + 2\lambda \langle \psi, A\psi \rangle + \lambda^2 \|\psi\|^2 \geq \lambda^2 \|\psi\|^2.$$

Као у доказу (2.13), одавде следи да је $A + \lambda$ инјективан и да је $\operatorname{Ran}(A + \lambda)$ затворен, а $\operatorname{Ran}(A + \lambda)^\perp = \operatorname{Ker}(A + \lambda) = \{0\}$. Дакле, $-\lambda \in \rho(A)$, па уз (i) добијамо $\sigma(A) \subseteq [0, \infty)$.

Обратно, нека је $\sigma(A) \subseteq [0, \infty)$. Тада је $-\lambda \in \rho(A)$ за свако $\lambda > 0$. Нека је $\|\varphi\| = 1$ и

$$f(\lambda) = \langle \varphi, (A + \lambda)^{-1} \varphi \rangle, \quad \lambda > 0.$$

За $\psi = (A + \lambda)^{-1} \varphi$ је $f(\lambda) = \langle (A + \lambda)\psi, \psi \rangle \in \mathbb{R}$. По првој резолвентној формули и непрекидности резолвенте (Теорема 3.4) важи

$$f'(\lambda) = -\|(A + \lambda)^{-1} \varphi\|^2 \leq -f(\lambda)^2,$$

где смо искористили $\langle \varphi, (A + \lambda)^{-2} \varphi \rangle = \langle (A + \lambda)\psi, (A + \lambda)^{-1} \psi \rangle = \|\psi\|^2$ (симетричност оператора A) и Коши–Шварцову неједнакост $|f(\lambda)| \leq \|(A + \lambda)^{-1} \varphi\|$. Специјално, f је опадајућа. Претпоставимо да је $f(\lambda_0) < 0$ за неко $\lambda_0 > 0$. Тада је $f(\lambda) < 0$ за

$\lambda \geq \lambda_0$, а интеграцијом неједнакости $(1/f)' = -f'/f^2 \geq 1$ од λ_0 до λ добијамо

$$f(\lambda) \leq \frac{f(\lambda_0)}{1 + f(\lambda_0)(\lambda - \lambda_0)}.$$

Одавде $f(\lambda) \rightarrow -\infty$ када $\lambda \rightarrow \lambda_0 - f(\lambda_0)^{-1}$, што је контрадикција са непрекидношћу функције f на $(0, \infty)$. Дакле, $f(\lambda) \geq 0$ за свако $\lambda > 0$ и свако φ . За $\psi \in \mathfrak{D}(A)$ и $\varphi = (A + \lambda)\psi$ ово даје $\langle (A + \lambda)\psi, \psi \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle + \lambda\|\psi\|^2 \geq 0$, па пуштањем $\lambda \rightarrow 0$ добијамо $\langle \psi, A\psi \rangle \geq 0$, тј. $A \geq 0$. $\square$

Лема 3.10 (Вејлов (Weyl) критеријум, [7, Лема 2.17]). *Ако постоји низ $\psi_k \in \mathfrak{D}(A)$, $\|\psi_k\| = 1$, такав да $\|(A - \lambda)\psi_k\| \rightarrow 0$, онда је $\lambda \in \sigma(A)$. За самоадјунгован A и $\lambda \in \mathbb{R}$ важи и обрат.*

Доказ. Ако би било $\lambda \in \rho(A)$, имали бисмо $1 = \|\psi_k\| = \|R_A(\lambda)(A - \lambda)\psi_k\| \leq \|R_A(\lambda)\| \|(A - \lambda)\psi_k\| \rightarrow 0$, што је немогуће. Обратно, нека је A самоадјунгован и $\lambda \in \sigma(A)$. Тада је $\lambda \in \mathbb{R}$ и $z_k = \lambda + i/k \in \rho(A)$, а по Теорему 3.4 је $\|R_A(z_k)\| \geq \text{dist}(z_k, \sigma(A))^{-1} \geq k$. Изаберимо $\varphi_k \neq 0$ тако да је $\|R_A(z_k)\varphi_k\| \geq \frac{k}{2}\|\varphi_k\|$ и ставимо $\psi_k = R_A(z_k)\varphi_k / \|R_A(z_k)\varphi_k\|$. Тада је $\|\psi_k\| = 1$ и

$$\|(A - \lambda)\psi_k\| = \frac{\|\varphi_k + (z_k - \lambda)R_A(z_k)\varphi_k\|}{\|R_A(z_k)\varphi_k\|} \leq \frac{2}{k} + \frac{1}{k} \rightarrow 0.$$

$\square$

3.5 Оператори множења и њихов спектар

Посматрамо оператор множења M_V из Примера 2.12.

Теорема 3.11 ([7, §2.4]). *Нека је $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ мерљива функција. Тада је M_V самоадјунгован и*

$$\sigma(M_V) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid |\{x : |V(x) - \lambda| < \varepsilon\}| > 0 \text{ за свако } \varepsilon > 0\} \quad (3.3)$$

(есенцијални ранг функције V). Број λ је сопствена вредност оператора M_V ако и само ако скуп $V^{-1}(\{\lambda\})$ има позитивну Лебегову меру. За $\lambda \in \rho(M_V)$ резолвента је множење са $(V(x) - \lambda)^{-1}$.

Напомена 3.12. Ако су A и B унитарно еквивалентни, $B = UAU^{-1}$, онда је $\sigma(A) = \sigma(B)$, $\sigma_p(A) = \sigma_p(B)$ и $\mathfrak{D}(B) = U\mathfrak{D}(A)$. Ово ћемо користити у глави 4 са $U = \mathcal{F}$.

3.6 Спектрална теорема и спектрални типови

Спектралну теорему наводимо без доказа. За слободни Шредингеров оператор сви објекти које она уводи могу се експлицитно израчунати, јер је он унитарно еквивалентан оператору множења.

Дефиниција 3.13. Пројекторска мера на $\mathbb{R}$ је пресликавање $\Omega \mapsto P(\Omega)$ које сваком Бореловом скупу $\Omega \subseteq \mathbb{R}$ додељује ортогонални пројектор $P(\Omega)$ у $\mathfrak{H}$, тако да је $P(\mathbb{R}) = I$ и $P(\bigcup_j \Omega_j)\psi = \sum_j P(\Omega_j)\psi$ за сваки низ дисјунктних Борелових скупова Ω_j и свако $\psi \in \mathfrak{H}$. За $\psi \in \mathfrak{H}$ је $\mu_\psi(\Omega) = \langle \psi, P(\Omega)\psi \rangle$ коначна Борелова мера, са $\mu_\psi(\mathbb{R}) = \|\psi\|^2$.

Теорема 3.14 (спектрална теорема, [7, Теореме 3.1, 3.6 и 3.7]). *Сваком самоадјунгованом оператору A одговара јединствена пројекторска мера P_A таква да је $A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dP_A(\lambda)$, тј.*

$$\mathfrak{D}(A) = \left\{ \psi \in \mathfrak{H} \mid \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\mu_\psi(\lambda) < \infty \right\}, \quad \langle \psi, A\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_\psi(\lambda), \quad \psi \in \mathfrak{D}(A),$$

где је $\mu_\psi(\Omega) = \langle \psi, P_A(\Omega)\psi \rangle$ спектрална мера вектора ψ . За сваку Борелову функцију $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ дефинисан је оператор $f(A) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) dP_A(\lambda)$ са

$$\mathfrak{D}(f(A)) = \left\{ \psi \in \mathfrak{H} \mid \int_{\mathbb{R}} |f|^2 d\mu_\psi < \infty \right\}, \quad \|f(A)\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d\mu_\psi(\lambda).$$

Ако је f ограничена, онда је $f(A) \in L(\mathfrak{H})$ и $\|f(A)\| \leq \|f\|_\infty$. Посебно је

$$\langle \psi, R_A(z)\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{d\mu_\psi(\lambda)}{\lambda - z}, \quad z \in \rho(A),$$

и $\sigma(A) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid P_A((\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)) \neq 0 \text{ за свако } \varepsilon > 0\}$.

Специјално, за $f(\lambda) = e^{-it\lambda}$ добијамо унитарне операторе $e^{-itA} = \int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda} dP_A(\lambda)$, $t \in \mathbb{R}$. Ако је $B = UAU^{-1}$ за унитаран U , онда због јединствености важи $P_B(\Omega) = UP_A(\Omega)U^{-1}$ и $f(B) = Uf(A)U^{-1}$.

Пример 3.15. Нека је $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ мерљива. Пројекторска мера оператора M_V је $P_{M_V}(\Omega) = M_{\chi_{V^{-1}(\Omega)}}$, тј. множење карактеристичном функцијом скупа $V^{-1}(\Omega)$. Заиста, тако дефинисано P је пројекторска мера (σ -адитивност следи из теореме о доминантној конвергенцији), а за њу је

$$\mu_\psi(\Omega) = \int_{V^{-1}(\Omega)} |\psi(x)|^2 dx, \quad \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_\psi(\lambda) = \int_{\mathbb{R}^n} V(x) |\psi(x)|^2 dx = \langle \psi, M_V \psi \rangle,$$

па по јединствености $P = P_{M_V}$. Даље је $f(M_V) = M_{f \circ V}$; посебно је e^{-itM_V} множење са $e^{-itV(x)}$.

Дефиниција 3.16. Свака коначна Борелова мера μ на $\mathbb{R}$ на јединствен начин се разлаже као $\mu = \mu_{ac} + \mu_{sc} + \mu_{pp}$, где је μ_{ac} апсолутно непрекидна у односу на Лебегову меру, μ_{sc} сингуларно непрекидна, а μ_{pp} чисто тачкаста. За самоадјунгован A дефинишемо

$$\begin{aligned}\mathfrak{H}_{ac} &= \{\psi \in \mathfrak{H} \mid \mu_\psi \text{ је апсолутно непрекидна}\}, \\ \mathfrak{H}_{sc} &= \{\psi \in \mathfrak{H} \mid \mu_\psi \text{ је сингуларно непрекидна}\}, \\ \mathfrak{H}_{pp} &= \{\psi \in \mathfrak{H} \mid \mu_\psi \text{ је чисто тачкаста}\}.\end{aligned}$$

Теорема 3.17 ([7, Лема 3.18]). *Важни $\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_{ac} \oplus \mathfrak{H}_{sc} \oplus \mathfrak{H}_{pp}$, а ови потпростори редукују A .*

Апсолутно непрекидан, сингуларно непрекидан и чисто тачкасти спектар оператора A су

$$\sigma_{ac}(A) = \sigma(A|_{\mathfrak{H}_{ac}}), \quad \sigma_{sc}(A) = \sigma(A|_{\mathfrak{H}_{sc}}), \quad \sigma_{pp}(A) = \sigma(A|_{\mathfrak{H}_{pp}}).$$

Стављамо још $\mathfrak{H}_c = \mathfrak{H}_{ac} \oplus \mathfrak{H}_{sc}$, а са P_{ac} и P_c означавамо ортогоналне пројекторе на $\mathfrak{H}_{ac}$ и $\mathfrak{H}_c$.

Напомена 3.18. За оператор множења M_V , по Примеру 3.15, вектор ψ припада $\mathfrak{H}_{ac}$ ако и само ако је мера $\Omega \mapsto \int_{V^{-1}(\Omega)} |\psi|^2 dx$ апсолутно непрекидна. Специјално, ако $|V^{-1}(N)| = 0$ за сваки скуп $N \subseteq \mathbb{R}$ Лебегове мере нула, онда је $\mathfrak{H}_{ac} = L^2(\mathbb{R}^n)$, па је $\sigma(M_V) = \sigma_{ac}(M_V)$ и $\sigma_{sc}(M_V) = \sigma_{pp}(M_V) = \emptyset$.

3.7 Једнопараметарске унитарне групе и Стоунова теорема

Јако непрекидне једнопараметарске унитарне групе и њихов генератор уведени су у Дефиницији 2.1.

Теорема 3.19 (Стоун, [7, Теореме 5.1 и 5.3]). *Самоадјунговани оператори одговарају тачно јако непрекидним једнопараметарским унитарним групама: ако је A самоадјунгован, онда $U(t) = e^{-itA}$ јесте таква група са генератором A , и обрнуто, генератор сваке такве групе је самоадјунгован.*

Пример 3.20. За реално V је e^{-itM_V} оператор множења са $e^{-itV(x)}$. Јака непрекидност следи из теореме о доминантној конвергенцији.

Напомена 3.21. За општи самоадјунгован оператор A група e^{-itA} дефинисана је спектралном теоремом (одељак 3.6). За операторе унитарно еквивалентне оператору множења, што је случај од интереса за H_0 , она се своди на Пример 3.20.

Глава 4

Слободни Шредингеров оператор

У овој глави примењујемо методе из глава 2 и 3 на оператор $H_0 = -\Delta$ у $L^2(\mathbb{R}^n)$, пратећи [7, §7.3–§7.4]. Користимо јединице у којима је $\hbar = 1$ и маса честице $m = \frac{1}{2}$.

4.1 Дефиниција и самоадјунгованост оператора

$$H_0 = -\Delta$$

Дефиниција 4.1. Слободни Шредингеров оператор је

$$H_0\psi = -\Delta\psi, \quad \mathfrak{D}(H_0) = H^2(\mathbb{R}^n), \quad (4.1)$$

где се изводи схватају у слабом смислу.

Теорема 4.2 ([7, Теорема 7.17]). *Оператор H_0 је унитарно еквивалентан (Дефиниција 2.4) оператору множења са $|p|^2$:*

$$\mathcal{F}H_0\mathcal{F}^{-1} = M_{|p|^2}, \quad \mathfrak{D}(M_{|p|^2}) = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid |p|^2\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)\}. \quad (4.2)$$

Посебно, H_0 је самоадјунгован.

Доказ. Нека је $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Како је $\hat{\psi} \in L^2(\mathbb{R}^n)$, услов $(1 + |p|^2)\hat{\psi} \in L^2(\mathbb{R}^n)$ еквивалентан је услову $|p|^2\hat{\psi} \in L^2(\mathbb{R}^n)$, па је по дефиницији из одељка 2.5.5 $\psi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ ако и само ако $\mathcal{F}\psi \in \mathfrak{D}(M_{|p|^2})$, тј. $\mathcal{F}\mathfrak{D}(H_0) = \mathfrak{D}(M_{|p|^2})$. За $\psi \in H^2(\mathbb{R}^n)$, по Тврђењу из одељка 2.5.5, важи $\partial_j^2\psi = ((ip_j)^2\hat{\psi})^\vee$, па је

$$\mathcal{F}H_0\psi = -\sum_{j=1}^n (ip_j)^2\hat{\psi} = |p|^2\hat{\psi} = M_{|p|^2}\mathcal{F}\psi.$$

Дакле, $\mathcal{F}H_0\mathcal{F}^{-1} = M_{|p|^2}$. Функција $|p|^2$ је реална, па је $M_{|p|^2}$ самоадјунгован (Пример 2.12). Најзад, ако је U унитаран и $B = UAU^{-1}$, онда

из $\langle \psi, B\varphi \rangle = \langle U^{-1}\psi, AU^{-1}\varphi \rangle$ и дефиниције адјунгованог оператора следи $B^* = UA^*U^{-1}$. Применом на $H_0 = \mathcal{F}^{-1}M_{|p|^2}\mathcal{F}$ добијамо $H_0^* = \mathcal{F}^{-1}M_{|p|^2}^*\mathcal{F} = H_0$. $\square$

4.2 Квадратна форма и језгро $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$

Тврђење 4.3 ([7, (7.37)]). *Квадратна форма оператора H_0 је*

$$q_{H_0}(\psi) = \sum_{j=1}^n \int_{\mathbb{R}^n} |\partial_j \psi(x)|^2 dx = \|\nabla \psi\|^2, \quad \psi \in H^1(\mathbb{R}^n). \quad (4.3)$$

Посебно, $H_0 \geq 0$.

Лема 4.4 ([7, Лема 7.19]). *Скупови $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ и $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ су језгра оператора H_0 , тј. $-\Delta$ на $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ је есенцијално самоадјунгован.*

Доказ. Оператор H_0 је самоадјунгован, па и затворен, и важи $\overline{H_0|_{C_c^\infty(\mathbb{R}^n)}} \subseteq \overline{H_0|_{\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)}} \subseteq H_0$. Довољно је, дакле, показати $H_0 \subseteq \overline{H_0|_{\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)}}$ и $H_0|_{\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)} \subseteq \overline{H_0|_{C_c^\infty(\mathbb{R}^n)}}$.

Нека је $\psi \in \mathfrak{D}(H_0) = H^2(\mathbb{R}^n)$. Тада је $(1 + |p|^2)\hat{\psi} \in L^2(\mathbb{R}^n)$, па постоји низ $\phi_k \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ такав да $\phi_k \rightarrow (1 + |p|^2)\hat{\psi}$ у $L^2(\mathbb{R}^n)$. Функција $(1 + |p|^2)^{-1}$ је глатка и сви њени изводи су ограничени, па је $\phi_k(1 + |p|^2)^{-1} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ и, по Теорему 2.23, $\psi_k = \mathcal{F}^{-1}(\phi_k(1 + |p|^2)^{-1}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. По Планшереловој теорему и Теорему 4.2 је

$$\begin{aligned} \|\psi_k - \psi\| &= \left\| \frac{\phi_k - (1 + |p|^2)\hat{\psi}}{1 + |p|^2} \right\| \leq \|\phi_k - (1 + |p|^2)\hat{\psi}\| \rightarrow 0, \\ \|H_0\psi_k - H_0\psi\| &= \left\| \frac{|p|^2(\phi_k - (1 + |p|^2)\hat{\psi})}{1 + |p|^2} \right\| \leq \|\phi_k - (1 + |p|^2)\hat{\psi}\| \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Дакле, $(\psi, H_0\psi) \in \overline{\Gamma(H_0|_{\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)})}$, тј. $H_0 \subseteq \overline{H_0|_{\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)}}$.

Нека је сада $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ таква да је $\varphi(x) = 1$ за $|x| \leq 1$, и $\psi_k(x) = \varphi(x/k)\psi(x)$ за $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Тада је $\psi_k \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ и $|\psi_k| \leq \|\varphi\|_\infty|\psi|$, па $\psi_k \rightarrow \psi$ по теорему о доминантној конвергенцији. Даље је

$$\Delta\psi_k(x) = \varphi(x/k) \Delta\psi(x) + \frac{2}{k} (\nabla\varphi)(x/k) \cdot \nabla\psi(x) + \frac{1}{k^2} (\Delta\varphi)(x/k) \psi(x).$$

Први сабирак тежи ка $\Delta\psi$ по теорему о доминантној конвергенцији, а норме другог и трећег сабирка су ограничене са $\frac{C}{k}(\|\nabla\psi\| + \|\psi\|) \rightarrow 0$. Дакле, $H_0\psi_k \rightarrow H_0\psi$, тј. $H_0|_{\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)} \subseteq \overline{H_0|_{C_c^\infty(\mathbb{R}^n)}}$.

Према томе, $\overline{H_0|_{C_c^\infty(\mathbb{R}^n)}} = \overline{H_0|_{\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)}} = H_0$, па су $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ и $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ језгра оператора H_0 . $\square$

4.3 Спектар слободног Шредингеровог оператора

Теорема 4.5 ([7, Теорема 7.17]). *Важно*

$$\sigma(H_0) = \sigma_{ac}(H_0) = [0, \infty), \quad \sigma_{sc}(H_0) = \sigma_{pp}(H_0) = \emptyset. \quad (4.4)$$

Доказ. По Теореме 4.2 је $H_0 = \mathcal{F}^{-1} M_{|p|^2} \mathcal{F}$. По Теореме 3.11, $\sigma(H_0) = \sigma(M_{|p|^2})$ је есенцијални ранг функције $p \mapsto |p|^2$. За $\lambda \geq 0$ и $\varepsilon > 0$ скуп $\{p : ||p|^2 - \lambda| < \varepsilon\}$ је непразан отворен скуп, па има позитивну меру, а за $\lambda < 0$ и $\varepsilon < |\lambda|$ тај скуп је празан. Дакле, $\sigma(H_0) = [0, \infty)$.

По Примеру 3.15 и унитарној еквиваленцији, спектрална мера вектора $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ у односу на H_0 је

$$\mu_\psi(\Omega) = \int_{\{p : |p|^2 \in \Omega\}} |\hat{\psi}(p)|^2 dp.$$

Ако је $N \subseteq \mathbb{R}$ скуп Лебегове мере нула, онда прелазом на поларне координате добијамо

$$|\{p : |p|^2 \in N\}| = |S^{n-1}| \int_{\{r > 0 : r^2 \in N\}} r^{n-1} dr = \frac{|S^{n-1}|}{2} \int_{N \cap (0, \infty)} \lambda^{n/2-1} d\lambda = 0,$$

па је $\mu_\psi(N) = 0$. Према томе, μ_ψ је апсолутно непрекидна за свако ψ , тј. $\mathfrak{H}_{ac} = L^2(\mathbb{R}^n)$ и $\mathfrak{H}_{sc} = \mathfrak{H}_{pp} = \{0\}$. Одатле је $\sigma_{ac}(H_0) = \sigma(H_0) = [0, \infty)$ и $\sigma_{sc}(H_0) = \sigma_{pp}(H_0) = \emptyset$. Посебно, за $\lambda \geq 0$ скуп $\{p : |p|^2 = \lambda\}$ има меру нула, па H_0 нема сопствених вредности. $\square$

Напомена 4.6. Тврђење $\sigma(H_0) = [0, \infty)$ може се доказати и директно Вејловим критеријумом (Лема 3.10), помоћу низа таласних пакета $\psi_k(x) = k^{-n/2} \varphi(x/k) e^{ip_0 x}$, $|p_0|^2 = \lambda$. Физички, слободна честица нема везаних стања.

4.4 Временска еволуција и унитарна група e^{-itH_0}

Решење Шредингерове једначине $i\partial_t \psi = H_0 \psi$, $\psi(0) = \psi_0 \in \mathfrak{D}(H_0)$, је $\psi(t) = e^{-itH_0} \psi_0$, где је, по Примеру 3.20,

$$e^{-itH_0} = \mathcal{F}^{-1} e^{-it|p|^2} \mathcal{F}. \quad (4.5)$$

Тврђење 4.7 ([7, Теорема 5.1]). e^{-itH_0} је јако непрекидна једнопараметарска унитарна група са генератором H_0 , и $\psi(t)$ је јединствено решење почетног проблема.

4.5 Интегрална репрезентација решења

Теорема 4.8 ([7, (7.41)]). *За $t \neq 0$ и $\psi \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ важи*

$$(e^{-itH_0}\psi)(x) = \frac{1}{(4\pi it)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\frac{|x-y|^2}{4t}} \psi(y) dy. \quad (4.6)$$

Доказ. Нека је најпре $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Функција $e^{-it|p|^2}\hat{\psi}$ припада $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, па по (4.5), Теорему 2.23 и теорему о доминантној конвергенцији (јер $\hat{\psi} \in L^1(\mathbb{R}^n)$) важи

$$\begin{aligned} (e^{-itH_0}\psi)(x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ipx} e^{-(it+\varepsilon)|p|^2} \hat{\psi}(p) dp \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ip(x-y)} e^{-(it+\varepsilon)|p|^2} \psi(y) dy dp. \end{aligned}$$

Подинтегрална функција је интеграбилна на $\mathbb{R}^{2n}$, па по Фубинијевој теорему и Леми 2.22 са $z = 2(it + \varepsilon)$, $\operatorname{Re} z > 0$, добијамо

$$\begin{aligned} (e^{-itH_0}\psi)(x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} \mathcal{F}(e^{-z|\cdot|^2/2})(y-x) \psi(y) dy \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(4\pi(it + \varepsilon))^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{|x-y|^2}{4(it+\varepsilon)}} \psi(y) dy. \end{aligned}$$

Како је $\operatorname{Re} \frac{1}{it+\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{t^2+\varepsilon^2} > 0$, модуо подинтегралне функције је ограничен са $(4\pi|t|)^{-n/2}|\psi(y)| \in L^1(\mathbb{R}^n)$, а $-\frac{1}{4(it+\varepsilon)} \rightarrow \frac{i}{4t}$. Доминантна конвергенција даје (4.6) за $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$.

Нека је сада $\psi \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$. Постоји низ $\psi_k \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ такав да $\psi_k \rightarrow \psi$ и у $L^1(\mathbb{R}^n)$ и у $L^2(\mathbb{R}^n)$ (на пример, одсецање $\chi_{\{|x|<k\}}\psi$, а затим регуларизација конволуцијом). Означимо са $I\psi$ десну страну у (4.6). Тада је $\|I\psi_k - I\psi\|_\infty \leq (4\pi|t|)^{-n/2}\|\psi_k - \psi\|_1 \rightarrow 0$, а $e^{-itH_0}\psi_k \rightarrow e^{-itH_0}\psi$ у $L^2(\mathbb{R}^n)$, јер је e^{-itH_0} унитаран. Неки подниз конвергира скоро свуда, па је $e^{-itH_0}\psi = I\psi$ скоро свуда. $\square$

4.6 Дисперзија и асимптотско понашање: Долардова теорема

Последица 4.9 (дисперзивна оцена, [7, (7.42)]). *За $\psi \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ и $t \neq 0$ важи*

$$\|e^{-itH_0}\psi\|_\infty \leq \frac{1}{(4\pi|t|)^{n/2}} \|\psi\|_1. \quad (4.7)$$

Доказ. Како је $|(4\pi it)^{n/2}| = (4\pi|t|)^{n/2}$ и $|e^{i|x-y|^2/(4t)}| = 1$, оцена следи директно из (4.6). Видети и [4]. $\square$

Теорема 4.10 (Долард (Dollard), [7, Лема 7.20]). *За свако $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ важи*

$$\lim_{|t| \rightarrow \infty} \left\| e^{-itH_0} \psi - \left(\frac{1}{2it} \right)^{n/2} e^{i\frac{|x|^2}{4t}} \hat{\psi} \left(\frac{x}{2t} \right) \right\| = 0. \quad (4.8)$$

Доказ. За $t \neq 0$ дефинишемо оператор

$$(D_t g)(x) = \left(\frac{1}{2it} \right)^{n/2} e^{i\frac{|x|^2}{4t}} g \left(\frac{x}{2t} \right).$$

Сменом $x = 2tp$ добијамо $\|D_t g\|^2 = (2|t|)^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} |g(x/2t)|^2 dx = \|g\|^2$, па је D_t изометрија.

Нека је најпре $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Развијањем $|x - y|^2 = |x|^2 - 2xy + |y|^2$ у (4.6) добијамо

$$\begin{aligned} (e^{-itH_0} \psi)(x) &= \frac{e^{i\frac{|x|^2}{4t}}}{(4\pi it)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\frac{xy}{2t}} e^{i\frac{|y|^2}{4t}} \psi(y) dy \\ &= \left(\frac{1}{2it} \right)^{n/2} e^{i\frac{|x|^2}{4t}} \left(e^{i\frac{|y|^2}{4t}} \psi(y) \right)^\wedge \left(\frac{x}{2t} \right) = (D_t \mathcal{F} \psi_t)(x), \end{aligned}$$

где је $\psi_t(y) = e^{i|y|^2/(4t)} \psi(y) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Како су D_t и $\mathcal{F}$ изометрије, следи

$$\|e^{-itH_0} \psi - D_t \mathcal{F} \psi\| = \|D_t \mathcal{F}(\psi_t - \psi)\| = \|\psi_t - \psi\| = \left(\int_{\mathbb{R}^n} |e^{i\frac{|y|^2}{4t}} - 1|^2 |\psi(y)|^2 dy \right)^{1/2}.$$

Подинтегрална функција тежи нули када $|t| \rightarrow \infty$ и ограничена је са $4|\psi|^2 \in L^1(\mathbb{R}^n)$, па по теореме о доминантној конвергенцији израз тежи нули.

Нека је сада $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ и $\varepsilon > 0$. Изаберимо $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ тако да је $\|\psi - \varphi\| < \varepsilon$. Како су e^{-itH_0} и $D_t \mathcal{F}$ изометрије, важи

$$\|e^{-itH_0} \psi - D_t \mathcal{F} \psi\| \leq 2\varepsilon + \|e^{-itH_0} \varphi - D_t \mathcal{F} \varphi\|,$$

па је $\limsup_{|t| \rightarrow \infty} \|e^{-itH_0} \psi - D_t \mathcal{F} \psi\| \leq 2\varepsilon$. Како је $\varepsilon > 0$ произвољно, тврђење следи. $\square$

Напомена 4.11. Вероватноћа да се честица за велико $|t|$ нађе у области Ω асимптотски је једнака вероватноћи да јој импулс буде у $\frac{1}{2t}\Omega$. Ово одговара класичном кретању $x(t) \approx x_0 + 2pt$.

4.7 RAGE теорема и бекство честице у бесконачност

Лема 4.12 ([7, Лема 7.21]). *Нека су f, g ограничене Борелове функције на $\mathbb{R}^n$ које теже нули у бесконачности. Тада су $g(x)f(p)$ и $f(p)g(x)$ компактни оператори,*

где је $f(p) = \mathcal{F}^{-1} M_f \mathcal{F}$. Посебно, за ограничен скуп $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ оператор $\chi_\Omega (H_0 + i)^{-1}$ је компактан.

Дефиниција 4.13. Нека је A самоадјунгован. Оператор K је релативно компактан у односу на A ако је $\mathfrak{D}(A) \subseteq \mathfrak{D}(K)$ и $KR_A(z)$ компактан за неко $z \in \rho(A)$. По првој резолвентној формули, тада је $KR_A(z)$ компактан за свако $z \in \rho(A)$.

Теорема 4.14 (RAGE – Ruelle, Amrein, Georgescu, Enss, [7]). Нека је A самоадјунгован и нека су P_c и P_{ac} ортогонални пројектори на $\mathfrak{H}_c = \mathfrak{H}_{ac} \oplus \mathfrak{H}_{sc}$ и на $\mathfrak{H}_{ac}$.

(i) Ако је K релативно компактан у односу на A , онда за свако $\psi \in \mathfrak{D}(A)$ важи

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|K e^{-itA} P_c \psi\|^2 dt = 0 \quad \text{и} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \|K e^{-itA} P_{ac} \psi\| = 0.$$

Ако је K још и ограничен, ово важи за свако $\psi \in \mathfrak{H}$.

(ii) Ако је $K_k \in L(\mathfrak{H})$ низ релативно компактних оператора који јако конвергира ка I , онда је

$$\begin{aligned} \mathfrak{H}_c &= \left\{ \psi \in \mathfrak{H} \mid \lim_{k \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|K_k e^{-itA} \psi\| dt = 0 \right\}, \\ \mathfrak{H}_{pp} &= \left\{ \psi \in \mathfrak{H} \mid \lim_{k \rightarrow \infty} \sup_{t \geq 0} \|(I - K_k) e^{-itA} \psi\| = 0 \right\}. \end{aligned}$$

Теорема 4.15 (бекство у бесконачност, [7, (7.47)]). За свако $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ и сваки ограничен скуп $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ важи

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|\chi_\Omega e^{-itH_0} \psi\|^2 = 0. \quad (4.9)$$

Доказ. Оператор χ_Ω је ограничен, а по Лемми 4.12 оператор $\chi_\Omega (H_0 + i)^{-1} = \chi_\Omega R_{H_0}(-i)$ је компактан. Дакле, χ_Ω је релативно компактан у односу на H_0 . По доказу Теореме 4.5 је $\mathfrak{H}_{ac} = L^2(\mathbb{R}^n)$, па је $P_{ac} = I$. По Теореми 4.14 (i), примењеној на $K = \chi_\Omega$, за свако $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ важи $\lim_{t \rightarrow \infty} \|\chi_\Omega e^{-itH_0} \psi\| = 0$, а тиме и тврђење. $\square$

Напомена 4.16 (доказ без спектралних мера). Тврђење се може доказати и директно, без RAGE теореме. За $\psi \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ из (4.7) следи

$$\|\chi_\Omega e^{-itH_0} \psi\|^2 \leq |\Omega| \|e^{-itH_0} \psi\|_\infty^2 \leq |\Omega| (4\pi|t|)^{-n} \|\psi\|_1^2 \rightarrow 0.$$

Ако је $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ и $\varepsilon > 0$, изаберимо $\varphi \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ тако да је $\|\psi - \varphi\| < \varepsilon$. Како је e^{-itH_0} унитаран и $\|\chi_\Omega\| \leq 1$, важи $\|\chi_\Omega e^{-itH_0} \psi\| \leq \varepsilon + \|\chi_\Omega e^{-itH_0} \varphi\|$, па је $\limsup_{t \rightarrow \infty} \|\chi_\Omega e^{-itH_0} \psi\| \leq \varepsilon$.

Закључак

У раду је показано да је слободни Шредингеров оператор $H_0 = -\Delta$ самоадјунгован на $H^2(\mathbb{R}^n)$, да му је спектар $[0, \infty)$ и чисто апсолутно непрекидан, и да слободна честица увек побегне у бесконачност.

Кључни алат била је Фуријеова трансформација, која H_0 своди на оператор множења са $|p|^2$. Тиме су самоадјунгованост, спектар и временска еволуција добијени директно, а општа спектрална теорема коришћена је само кроз своју формулацију.

Резултати за H_0 су полазна тачка за проучавање оператора облика $H = -\Delta + V$ са потенцијалом V (видети нпр. [2]). Природни наставак рада су резолвенти и Гринова (Green) функција слободног оператора, теорија пертурбација (Като–Релихова теорема, Kato–Rellich), таласни оператори и теорија расејања.

Литература

- [1] H. Abels, *Pseudodifferential and Singular Integral Operators. An Introduction with Applications*, De Gruyter, Berlin, 2012.
- [2] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn, H. Holden, *Solvable Models in Quantum Mechanics*, Texts and Monographs in Physics, Springer-Verlag, New York, 1988.
- [3] H. Brezis, *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*, Springer, New York, 2011.
- [4] T. Cazenave, *Semilinear Schrödinger Equations*, Courant Lecture Notes in Mathematics, Vol. 10, American Mathematical Society, Providence, RI, 2003.
- [5] C. Heil, *A Basis Theory Primer*, Springer Science+Business Media, New York, 2011.
- [6] E. Kreyszig, *Introductory Functional Analysis with Applications*, John Wiley & Sons, New York, 1978.
- [7] G. Teschl, *Mathematical Methods in Quantum Mechanics: With Applications to Schrödinger Operators*, 2nd ed., Graduate Studies in Mathematics, Vol. 157, American Mathematical Society, Providence, RI, 2014.

Биографија

Сара Бачевић рођена је 28. јула 2002. године у Врању, Република Србија. Основну школу „Бранко Радичевић“ у Бујановцу завршила је 2017. године као ђак генерације и носилац дипломе „Вук Караџић“, а потом је наставила школовање у Трећој београдској гимназији, на природно-математичком смеру, коју је завршила 2021. године, такође као носилац дипломе „Вук Караџић“. Исте године уписала је основне академске студије математике на Природно-математичком факултету Универзитета у Новом Саду, које је завршила 2024. године са просечном оценом 9,00. Исте године уписала је мастер академске студије математике на истом факултету. Положила је у року све испите предвиђене наставним планом и програмом мастер студија, са просечном оценом 8,50, и тиме стекла право на одбрану мастер рада.

Коауторка је рада *On the Equational Base of SMB Algebras* (Р. Ђарић, С. Ваћевић, Ф. Ковачевић), објављеног у часопису *Mathematics* 2023. године. На Пролећном фестивалу математике Универзитета у Новом Саду, у оквиру Математичког подјума младих, одржала је 19. јуна 2020. године предавање „Фрактали“.



УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
КЉУЧНА ДОКУМЕНТАЦИЈСКА ИНФОРМАЦИЈА

Редни број:

РБР

Идентификациони број:

ИБР

Тип документације: Монографска документација

ТД

Тип записа: Текстуални штампани материјал

ТЗ

Врста рада: Мастер рад

ВР

Аутор: Сара Бачевић

АУ

Ментор: др Ивана Војновић

МЕ

Наслов рада: Математичке методе у квантној механици и анализа слободног Шредингеровог оператора

НР

Језик публикације: Српски (ћирилица)

ЈП

Језик извода: српски / енглески

ЈИ

Земља публикавања: Република Србија

ЗП

Уже географско подручје: Војводина

УГП

Година: 2026

ГО

Издавач: Ауторски репринт

ИЗ

Место и адреса: Нови Сад, Трг Доситеја Обрадовића 4
МА

Физички опис рада: (4/39/7/0/0/0/0) (број поглавља/ број страна/ број лите-
рарних цитата/ број табела/ број слика/ број графика/ број прилога)

ФО

Научна област: Математика
НО

Научна дисциплина: Функционална анализа
НД

Кључне речи: Квантна механика, неограничени оператори, самоадјунговани опе-
ратори, спектрална теорија, Фуријеова трансформација, слободни Шредингеров
оператор, временска еволуција

ПО, УДК

Чува се: У библиотеци Департмана за математику и информатику, Природно-
математички факултет, Универзитет у Новом Саду

ЧУ

Важна напомена:
ВН

Извод: У раду се излажу математичке методе квантне механике и примењују на
слободни Шредингеров оператор $H_0 = -\Delta$ у простору $L^2(\mathbb{R}^n)$. Након увођења
неограничених, адјунгованих, симетричних и самоадјунгованих оператора, кри-
теријума самоадјунгованости и основа спектралне теорије, уводи се Фуријеова
трансформација на Шварцовом простору и на $L^2(\mathbb{R}^n)$. Показује се да је H_0 пре-
ко Фуријеове трансформације унитарно еквивалентан оператору множења са $|p|^2$,
одакле следи да је самоадјунгован на $H^2(\mathbb{R}^n)$, да је $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ његово језгро и да
је његов спектар $[0, \infty)$ чисто апсолутно непрекидан. У завршном делу изводи се
интегрална репрезентација временске еволуције, дисперзивна оцена и Долардова
теорема о асимптотском понашању решења, и доказује се да слободна честица бе-
жи у бесконачност.

ИЗ

Датум прихватања теме од стране НН већа: 15.9.2026.

ДП

Датум одбране:

ДО

Чланови комисије:

ЧК

Председник: др Милица Жигић, ванредни професор Природно-математичког факултета у Новом Саду

Члан: др Маја Јолић, доцент Природно-математичког факултета у Новом Саду

Ментор: др Ивана Војновић, ванредни професор Природно-математичког факултета у Новом Саду

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCE
KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Document type: Monograph type

DT

Type of record: Printed text

TR

Contents Code: Master's thesis

CC

Author: Sara Bačević

AU

Mentor: Ivana Vojnović, PhD

MN

Title: Mathematical Methods in Quantum Mechanics and Analysis of the Free Schrödinger Operator

TI

Language of text: Serbian (Cyrillic)

LT

Language of abstract: Serbian / English

LA

Country of publication: Republic of Serbia

CP

Locality of publication: Vojvodina

LP

Publication year: 2026

PY

Publisher: Author's reprint

PU

Publication place: Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 4

PP

Physical description: (4/39/7/0/0/0/0) (chapters/ pages/ quotations/ tables/ pictures/ graphics/ enclosures)

PD

Scientific field: Mathematics

SF

Scientific discipline: Functional analysis

SD

Subject/Key words: Quantum mechanics, unbounded operators, self-adjoint operators, spectral theory, Fourier transform, free Schrödinger operator, time evolution

SKW

Holding data: The Library of the Department of Mathematics and Informatics, Faculty of Science and Mathematics, University of Novi Sad

HD

Note:

N

Abstract: This thesis presents mathematical methods of quantum mechanics and applies them to the free Schrödinger operator $H_0 = -\Delta$ in $L^2(\mathbb{R}^n)$. After introducing unbounded, adjoint, symmetric and self-adjoint operators, criteria for self-adjointness and the basics of spectral theory, the Fourier transform is introduced on the Schwartz space and on $L^2(\mathbb{R}^n)$. It is shown that H_0 is, via the Fourier transform, unitarily equivalent to multiplication by $|p|^2$; consequently, it is self-adjoint on $H^2(\mathbb{R}^n)$, $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ is a core for it, and its spectrum $[0, \infty)$ is purely absolutely continuous. The final part derives the integral representation of the time evolution, the dispersive estimate and Dollard's theorem on the asymptotic behaviour of solutions, and proves that a free particle escapes to infinity.

AB

Accepted by the Scientific Board on: 15.9.2026.

ASB

Defended:

DE

Thesis defence board:

DB

President: Milica Žigić, PhD, associate professor at the Faculty of Science, University of Novi Sad

Mentor: Ivana Vojnović, PhD, associate professor at the Faculty of Science, University of Novi Sad

Member: Maja Jolić, PhD, assistant professor at the Faculty of Science, University of Novi Sad