Matematički temelji kvantne mehanike

Nino Kovačić*
Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Bijenička cesta 32, Zagreb

Mentor: dr. sc. Tajron Jurić
Zavod za teorijsku fiziku, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb
(Dated: 22. siječnja 2022.)

U ovom radu izučavamo suptilnosti predstavljanja opservabli u QM sa SA operatorima, gdje se ključnim pokazuje ideja da operator mora biti zadan na svojoj domeni te da u beskonačno-dimenzionalnom Hilbertovom prostoru postoje bitne razlike između simetričnih i SA operatora. Iz toga onda slijedi niz bitnih rezultata koje sve detaljno objašnjavamo na primjeru paradoksa i operatora slobodne QM čestice.

I. UVOD I MOTIVACIJA

Osnovni cilj znanosti, uz općenito razumijevanje svijeta oko nas, jest stvaranje pouzdanih predikcija i interpretiranje istih. Da bi se do toga došlo nužno je postaviti model kojim ćemo opisati sustav od interesa, kojemu kontekst i konzistentnost daje šira teorija na kojoj ga zasnivamo.

Prva takva sustavna teoriju koju susrećemo u fizici je klasična mehanika, gdje smo (neovisno o odabranoj formulaciji) u stanju počevši od aksioma reproducirati Newtonovu jednadžbu, čiju valjanost možemo praktički "zaključiti" iz svakodnevnog iskustva. Zahvaljujući tome, a i činjenici da je korištena matematika poprilično jednostavna, njome se relativno lako i intuitivno barata.

Posve je drugačija situacija kada dođemo do kvantne mehanike (skraćeno nadalje na QM), gdje je početniku sve mahom neintuitivno, počevši već od rezultata eksperimenta koje moramo biti u stanju predvidjeti i objasniti. Situaciju dodatno pogoršava puno teža matematička "mašinerija" koja cjelokupnu priču pogoni. Među osnovnim problemima stoji potreba za zamjenom realnih funkcija koje opisuju dinamiku ili stanje sistema diferencijalnim operatorima te prelazak na beskonačno-dimenzionalan Hilbertov prostor dio kojega će ta stanja biti. Tako da kada se studenti po prvi puta upoznavaju s QM najčešće se samo pozove na rezultate linearne algebre zajedno s tvrdnjom kako se oni jednostavno prenose te se tako preko bitnih matematičkih detalja prijeđe ne pridajući im veliki značaj. Treba ipak napomenuti kako postoje i kursevi QM sa pedantnijim pristupom [1–3].

Ovdje ćemo započeti i motivirati daljnju razradu preko paradoksa koje takav naivan pristup izaziva, zatim izložiti rezultate funkcionalne analize (konkretno teorije operatora) koji će nam biti nužni za kvalitetno i potpuno razumijevanje QM, koje ćemo i iskoristiti kako bi pokazali da zapravo paradoksa uopće ni nema. Na kraju ćemo i demistificirati Diracovu bra-ket notaciju te ju rigorozno opravdati, smještajući ju u kontekst opremljenog Hilbertovog prostora.

A. Paradoksi

Pod terminom paradoks mislimo na naizgled konzistentan niz zaključivanja koji vodi ka kontradikciji. Oni imaju veliku važnost u istraživanju jer upućuju ili na nedostatnost teorije koju razvijamo ili na nedostatnost znanja korisnika iste. Stoga ih u nastavku iznosimo kao svojevrsni protuprimjer i provokaciju, što je zapravo standardan pristup u mnogim radovima na ovu temu[4–7].

Primjer 1. (Kanonska komutacijska relacija)
Prilikom prve kvantizacije zamjena Poissonovih zagrada komutatorima vodi na:

$$[X, P] = i\mathbb{1} \tag{1}$$

Sada pretpostavimo da je ψ_p svojstveno stanje operatora P, realne (jer je impuls opservabla) svojstvene vrijednosti $p \in \mathbb{R}$. Tada možemo djelovati s (1) na ψ_p i potom sve skalarno množiti opet sa ψ_p, što daje:

$$\langle \psi_p, [X, P]\, \psi_p \rangle = \langle \psi_p, i\mathbb{1}\psi_p \rangle = i\, \langle \psi_p, \psi_p \rangle = i \tag{2}$$

Ali istovremeno, iskoristimo li hermitičnost operatora P i već navedene pretpostavke o ψ_p doći ćemo do kontradiktornog zaključka:

$$\begin{aligned} \langle \psi_p, [X, P]\, \psi_p \rangle &= \langle \psi_p, (XP - PX)\, \psi_p \rangle \\ &= \langle \psi_p, XP\psi_p \rangle - \langle \psi_p, PX\psi_p \rangle \\ &= \langle \psi_p, XP\psi_p \rangle - \langle P\psi_p, X\psi_p \rangle \\ &= \langle \psi_p, Xp\psi_p \rangle - \langle p\psi_p, X\psi_p \rangle \\ &= p\, \langle \psi_p, X\psi_p \rangle - p\, \langle \psi_p, X\psi_p \rangle = 0 \end{aligned} \tag{3}$$

Štoviše, ovaj smo račun mogli i eksplicitno odraditi koristeći, primjerice, koordinatnu reprezentaciju gdje je $\psi_p(x)=e^{ipx}$, $(X\psi)(x)=x\psi(x)$, $(P\psi)(x)=-i\psi'(x)$. U svakom slučaju preostaje pitanje: kako smo uspjeli dobiti ovakav, očito krivi, rezultat?

*Electronic address: nkovacic.phy@pmf.hr

Primjer 2. (Očekivana vrijednost H^2 na kompaktu)
Neka se kvantna slobodna čestica mase $1/2$ nalazi unutar beskonačne pravokutne jame sa zidovima na $a < b$. Tada je formalno djelovanje hamiltonijana u koordinatnoj reprezentaciji $H\psi = -\psi''$. Pogledajmo sada funkciju:

$$\phi = (x-a)(b-x)/2 \tag{4}$$

Kako je ona kvadratno integrabilna na $[a,b]$ te iščezava u a i b, zaključujemo da bi ona mogla predstavljati nekakvo fizikalno stanje ovog sustava. Sada izračunajmo očekivanu vrijednost kvadrata hamiltonijana, koristeći njegovo svojstvo da je hermitski operator:

$$\left\langle \phi, H^2\phi \right\rangle = \langle H\phi, H\phi\rangle = \langle 1,1\rangle = b-a \tag{5}$$

No direktnim računom trivijalno se dobija: $H\phi = 1$ te tako dolazimo do drugačijeg zaključka:

$$\left\langle \phi, H^2\phi \right\rangle = \langle \phi, H1\rangle = \langle \phi, 0\rangle = 0 \tag{6}$$

Jasno je da u dobro zasnovanoj teoriji nemoguće da su oba rezultata točna istovremeno pa nam preostaje pitanje: koji je od njih ispravan i zašto?

Primjer 3. (Trag kanonske komutacijske relacije)
Vratimo li se na (1) i uzmemo li trag dobivamo:

$$\begin{aligned} Tr\left([X,P]\right) &= Tr\left(XP - PX\right) \\ &= Tr\left(XP\right) - Tr\left(PX\right) = 0 \qquad (7) \\ Tr\left([X,P]\right) &= iTr(\mathbb{1}) \neq 0 \qquad (8) \end{aligned}$$

Gdje smo u drugom redu iskoristili cikličnost traga. Opet se čini da kršimo kanonske komutacijske relacije, no kako je to moguće kada su nam one osnovni postulat iz procesa kanonske kvantizacije?

Primjer 4. (Operator impulsa na $\mathbb{R}$)
Kako su opservable hermitski operatori složit ćemo se da one moraju zadovoljiti simetričnost, odnosno da za svaku opservablu O mora vrijediti:

$$\langle \phi, O\psi\rangle = \langle O\phi, \psi\rangle \tag{9}$$

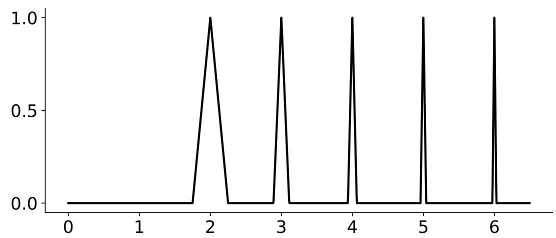
Sada promotrimo najosnovniji primjer: slobodnu kvantnu česticu na $\mathbb{R}$ te provjerimo gornje svojstvo na primjeru operatora impulsa u koordinatnoj reprezentaciji:

$$\begin{aligned} \langle \phi, P\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \left(-i\psi'\right) \mathrm{d}x \\ &= -i\left(\phi^*\psi\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-i\phi'\right)^* \psi \mathrm{d}x \\ &= -i\left(\phi^*\psi\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty} + \langle P\phi, \psi\rangle \qquad (10) \end{aligned}$$

Vidimo da nam tu prilikom parcijalne integracije pojavio dodatni (tzv. površinski) član, za kojega u pravilu uzimamo da iščezava bez velikog razmišljanja, pozivajući se, na primjer, da će kvadratno integrabilne funkcije iščeznuti u beskonačnosti. No, tu postoji više protuprimjera, od kojih je najjednostavniji funkcija "smanjujućeg češlja":

$$\begin{aligned} f(x) = \sum_{n=2}^{+\infty} \Bigg(&\theta\left(x - n + \frac{1}{n^2}\right)\theta\left(-x+n\right)\left(1 + n^2\left(x-n\right)\right) \\ &+ \theta\left(x-n\right)\theta\left(-x+n+\frac{1}{n^2}\right)\left(1 - n^2\left(x-n\right)\right)\Bigg) \end{aligned} \tag{11}$$

čiji je formalni zapis zaista nezgrapan, ali će njeno ponašanje odmah biti jasno pogledamo li njen graf na slici1:



Slika 1: Graf funkcije smanjujućeg češlja.

Dakle, riječ je o nizu "šiljaka" centriranih oko prirodnih brojeva većih od jedan, visine 1 i smanjujuće širine od $2/n^2$, pa je sasvim jasno da limes ove funkcije u beskonačnosti ne postoji, dok je istovremeno ona ipak kvadratno integrabilna[1]:

$$\int_{\mathbb{R}} |f|^2(x)\,\mathrm{d}x \leqslant \int_{\mathbb{R}} f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{2}^{+\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6} - 1 \tag{12}$$

Postavlja se pitanje: što ćemo sada uraditi s ovakvim operatorom impulsa ako nam on nije ni simetričan, a kamoli hermitski te stoga ne može predstavljati opservablu?

Primjer 5. (Operator impulsa na kompaktu)
Promotrimo opet kvantnu česticu iz primera 2, to jest ograničenu na interval $[a,b]$, s rubnim uvjetima na valne funkcije $\psi(a) = \psi(b) = 0$. Odradimo li isti račun kao i u prošlom primjeru vidimo:

$$\langle \phi, P\psi\rangle = -i\left(\phi^*\psi\right)\Big|_a^b + \int_a^b \left(-i\phi'\right)^* \psi \mathrm{d}x = \langle P\phi, \psi\rangle \tag{13}$$

---

[1] Ovdje je korištena estimacijska formula: za funkcije $h, g \geqslant 0$ t.d. $h \geqslant g$ na Ω slijedi: $\int_\Omega h\,\mathrm{d}x \geqslant \int_\Omega g\,\mathrm{d}x$ te činjenica da f postiže vrijednosti između 0 i 1, što povlači $f \geqslant f^2$.

Sada nam je pak površinski član iščeznuo zbog rubnog uvjeta, pa je P simetričan te se sve čini u redu. No, svojstvena jednadžba

$$P\psi_p = p\psi_p, \quad p \in \mathbb{R} \tag{14}$$

ima dobro poznato rješenje: $\psi_p = ce^{ipx}$, gdje (kompleksnu) konstantu c fiksiramo iz rubnih uvjeta, ali pokušamo li to učiniti nalazimo da je problem "prezadan" – dva nezavisna rubna uvjeta na diferencijalnu jednadžbu prvog reda ostavljaju nam samo trivijalno rješenje, tj. nul-funkciju (koju moramo odbaciti jer nul-vektor ne spada u rješenja svojstvenog problema). Dakle, dobili smo zanimljivu (ali i zabrinjavajuću) situaciju, gdje imamo simetrični operator, koji nema svojstvenih vrijednosti, dok ćemo kasnije vidjeti da je spektar ovog operatora čine svi realni brojevi $\mathbb{R}$ - postavlja se opet pitanje: što uraditi s operatorom impulsa?

II. RIGOROZNI PRISTUP TEORIJI OPERATORA

U ovom trenutku nam je jasno da smo u prethodno iznesenim paradoksima nužno u nekom koraku računa pogriješili, no da bi pravilno obrazložili gdje smo (i zašto) bili u krivu moramo sve pojmove temeljito razraditi pa nam je, nažalost, neizbježno navođenje niza definicija, jer bez njih jednostavno nećemo moći sustavno dalje:

A. Uvodne definicije

Definicija. Za metrički prostor (X, d) kažemo da je *potpun* ako svaki Cauchyjev niz u X konvergira ka nekom elementu iz X.

Ako baratamo s normiranim prostorom $(X, ||\cdot||)$ prirodno se udaljenost $d : X{\times}X{\to}\mathbb{R}^+$ može definirati da je jednaka normi za $a, b{\in}X$: $d(a, b){=}||a - b||$ te tako dobijamo metrički prostor, pa u tom smislu vrijedi sljedeće:

Definicija. Potpun normirani prostor nazivamo *Banachov prostor.*

Definicija. Neka je V vektorski prostor nad poljem $\mathbb{C}$ te $x, y \in V$, tada funkciju $\langle\cdot,\cdot\rangle : V{\times}V{\to}\mathbb{C}$, $(x, y) \mapsto \langle x, y\rangle$ nazivamo *skalarni produkt* ako vrijedi:

(S1) $\langle\cdot,\cdot\rangle$ je linearno u drugom argumentu i antilinearno u prvom argumentu
(S2) $\langle\cdot,\cdot\rangle$ je hermitski simetrično, tj. $\langle x, y\rangle = \langle y, x\rangle^*$
(S3) $\langle\cdot,\cdot\rangle$ je strogo pozitivno, odnosno: $\langle x, x\rangle \geqslant 0$ te $\langle x, x\rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0$.

Vektorski prostor V zajedno sa skalarnim produktom $\langle\cdot,\cdot\rangle$ zovemo *unitarni prostor*, te pišemo $(V, \langle\cdot,\cdot\rangle)$.

Definicija. Za unitarni prostor $(\mathcal{H}\ ,\langle\cdot,\cdot\rangle)$ kažemo da je *Hilbertov prostor* ako je i Banachov prostor s obzirom na normu induciranu skalarnim produktom[2] : $||x||_{\mathcal{H}} = \sqrt{\langle x, x\rangle}$, konačno, za Hilbertov prostor kažemo da je *separabilan* ako ako sadrži gust[3] i prebrojiv podskup.

Propozicija 1. (CSB nejednakost)
Neka je $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ unitaran prostor, tada za sve $x, y \in \mathcal{H}$ vrijedi tzv. Cauchy-Schwartz-Bunyakowsky (skraćeno CSB) nejednakost:

$$|\langle x, y\rangle|^2 \leqslant \langle x, x\rangle \langle y, y\rangle \tag{15}$$

Dokaze ove tri tvrdnje (CSB, norma se generira skalarnim produktom te obrat) preskačemo zbog prostora, ali se oni (zajedno s bilo kojim kasnijim dokazima koje budemo preskočili) mogu lako naći u bilo kojem boljem udžbeniku koji se bavi ovim temama[8–14]. Vrijedi napomenuti da, kao što je već spomenuto, u Hilbertovom prostoru normu možemo iskoristiti da bi inducirali udaljenost, pomoću koje generiramo standardnu topologiju otvorenih kugli (koju nadalje podrazumijevamo).

Definicija. Neka je $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ Hilbertov prostor te $\mathcal{I}$ (ne nužno prebrojiv) skup indeksa. Za familiju vektora $e_i, i{\in}\mathcal{I}$ kažemo da je ortonormirana baza (ONB) Hilbertovog prostora ako vrijedi:
(ortonormiranost) $\forall\, i, j \in \mathcal{I} : \quad \langle e_i, e_j\rangle = \delta_{ij}$
(Fourierov red) $\quad \forall x \in \mathcal{H}$: $\sum_{i\in\mathcal{I}} \langle e_i, x\rangle\, e_i = x$

Propozicija 2. Uvjet o Fourierovom redu iz prethodne definicije te sljedeće tvrdnje su međusobno ekvivalentne:
(B1) linearna ljuska $\mathrm{Span}(e_i)_{i\in\mathcal{I}}$ je gust skup u $\mathcal{H}$
(B2) ako za $x{\in}\mathcal{H}$ je $\langle x, e_i\rangle = 0$ za sve $i{\in}\mathcal{I}$, onda je $x = 0$

Teorem 1. Svaki Hilbertov prostor posjeduje barem jednu ONB te bilo koje dvije ONB istog Hilbertovog prostora imaju isti kardinalni broj.

Definicija. Kardinalni broj ONB Hilbertovog prostora nazivamo *dimenzija Hilbertovog prostora* i označavamo ju s $\dim(\mathcal{H})$. Ako skup indeksa $i \in \mathcal{I}$ nije neprebrojivo beskonačan tada takvu ONB nazivamo *Hilbertova baza.*

---

[2] Zanimljivo je da vrijedi i svojevrsni obrat, odnosno da je moguće (gdje moramo i provjeriti svojstva S1-3) inducirati skalarni produkt preko norme koristeći tzv. *polarizacijsku formulu*:

$$\langle x, y\rangle = \frac{1}{4}\left(||x + y||^2 - ||x - y||^2 + i||x - iy||^2 - i||x + iy||^2\right)$$

[3] Govoreći u terminima topologije podskup A topološkog prostora $(X, \mathcal{T})$ je gust u točki $a \in A$ ako za svaku okolinu O točke a vrijedi $O \cap A \neq \varnothing$, odnosno, presjeci svih okolina od a s gustim skupom A su neprazni.
Nama je praktičnije uzeti sljedeću ekvivalentnu definiciju: podskup A Hilbertovog prostora $\mathcal{H}$ je gust ako za njegovo topološko zatvorenje vrijedi $\bar{A} = \mathcal{H}$, dok $\bar{A}$ dobivamo tako da na A "dodamo" sve limese svih Cauchyjevih nizova u A (ti limesi onda ne leže nužno u A, ali su sigurno u $\mathcal{H}$).

Primijetimo kako nam je prethodni teorem osigurao da možemo odrediti dimenziju svakog Hilbertovog prostora te da te dimenzija neće ovisiti o izboru baze. Na kraju, u stanju smo povezati pojmove separabilnosti i baze preko sljedećeg teorema:

Teorem 2. Hilbertov prostor je separabilan akko posjeduje Hilbertovu bazu.

B. Prostor $\mathbf{L}^2$, operatori i njihove domene

Sada kada imamo ovako detaljne definicije možemo se vratiti na samu problematiku u QM. Bilo da krećemo direktno iz aksioma ili pratimo povijesni razvoj, neminovno nam slijedi zaključak da QM moramo zasnivati na Hilbertovom prostoru te ispada da[4] moramo raditi na beskonačno-dimenzionalnom prostoru.

Jedan od kandidata za ∞-dim Hilbertov prostor jest vektorski prostor kompleksnih funkcija[5] $f : \Omega \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{C}$. No, da bi od njega načinili Hilbertov prostor treba nam skalarni produkt, ali želimo li da nam je on oblika:

$$\int_\Omega f^*(x) g(x) \mathrm{d}x \tag{16}$$

ulazimo u probleme sa svojstvom (S3) skalarnoga produkta, jer nam je, primjerice, rezultat integracije prave nul-funkcije i funkcije koja je različita od nje u svega nekoliko izoliranih točaka isti i jednak nuli, pa onda imamo dva naizgled "različita" nul-vetora.

Rješenje dolazi konstrukcijom prostora kvadratno-integrabilnih funkcija L^2, detalje koje zajedno s preciznim definicijama dajemo u dodatku B, dok u nastavku pretpostavljamo da je sve to čitatelju poznato, a sada ćemo izreći samo najbitnije rezultate:

Propozicija 3. Za $\psi, \phi \in L^2(\Omega \subseteq \mathbb{R}, \mathrm{d}x)$ preslikavanje $\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2}$: $L^2(\Omega) \times L^2(\Omega) \to \mathbb{C}$, $(\psi, \phi) \mapsto \int_\Omega \psi^* \phi \, \mathrm{d}x$ je skalarni produkt[6] na $L^2(\Omega)$.

Teorem 3. (Riesz–Fischer)
Unitaran prostor $(L^2(\Omega), \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2})$ je potpun.

Teorem 4. (Izomorfizam Hilbertovih prostora)
Svi konačno-dimenzionalni kompleksni Hilbertovi prostori $\dim(\mathcal{H}) = n < \infty$ su izomorfni s $\mathbb{C}^n$ (opremljenim s kanonskim skalarnim produktom).
Svi separabilni beskonačno-dimenzionalni kompleksni Hilbertovi prostori su izomorfni s $(L^2(\mathbb{R}), \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2})$[7].

[4] Za detaljno obrazloženje ove tvrdnje vidi raspravu vezanu uz propoziciju 5. i 6.

[5] Tu smo naravno definirali zbrajanje vektora tj. funkcija po točkama $(f + g)(x) = f(x) + g(x)$.

[6] Primijetimo da zbog CSB nejednakosti i definicije L^2 prostora su svi skalarni produkti na L^2 ograničeni:
$$|\langle \psi, \phi \rangle|^2 \leqslant \|\psi\|^2 \, \|\phi\|^2 < \infty$$

Direktna posljedica Riesz–Fischer teorema je zaključak da je $(L^2(\mathbb{R}), \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2})$ Hilbertov prostor (štoviše, on će i biti separabilan), dok je drugi teorem o izomorfizmu Hilbertovih prostora dovršio raspravu o tome na kakvim prostorima bismo uopće mogli zasnivati QM. Tako da nadalje kada kažemo Hilbertov prostor nije uopće krivo misliti baš u terminima kvadratno-integrabilnih funkcija, jer sve što na njima uspijemo naučiti i pokazati dati će nam općenitu informaciju.

Definicija. Linearno preslikavanje A: $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ zovemo *operator*, a skup $\mathcal{D}(A)$ *domena operatora.* Ako je domena gust skup u $\mathcal{H}$ (tj. $\overline{\mathcal{D}(A)} = \mathcal{H}$) tada kažemo da je operator *gusto zadan.*

Iako se prethodna definicija čini trivijalnom u njoj se već skriva jedna vrlo bitna činjenica – domena je odabrana upravo tako da djelovanje operatora na bilo koji njen element nas "ne izbaci" iz $\mathcal{H}$ (to, naravno, ne mora biti jedini uvjet kojega postavljamo), a to je točno kako se definiraju tzv. *maksimalne domene operatora* $\mathcal{D}_{max}(A)$, koje će biti jasne na primjeru:

Primjer 6. (Maksimalne domene)
Na Hilbertovom prostoru $L^2(\mathbb{R})$ maksimalne domene operatora X, P i H su:

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_{max}(X) &= \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) \,\middle|\, X\psi \in L^2(\mathbb{R}) \right\} \\
&= \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) \,\middle|\, \int_\mathbb{R} |x\psi(x)|^2 < \infty \right\} \qquad (17) \\
\mathcal{D}_{max}(P) &= \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) \,\middle|\, P\psi \in L^2(\mathbb{R}) \right\} \\
&= \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) \,\middle|\, \int_\mathbb{R} |\psi'(x)|^2 < \infty \right\} \qquad (18) \\
\mathcal{D}_{max}(H) &= \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) \,\middle|\, H\psi \in L^2(\mathbb{R}) \right\} \\
&= \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) \,\middle|\, \int_\mathbb{R} |\psi''(x)|^2 < \infty \right\} \qquad (19)
\end{aligned}$$

Ove domene pokazat će se vrlo korisne u kasnijoj raspravi, a sada je vrijeme da se vratimo na neke od paradoksa: U primjeru 1. odmah primjećujemo greške: prvo, nije jasno na koje sve funkcije komutator $[X, P]$ "smije"

[7] U literaturi je česta varijanta ovog teorema gdje se navodi: svi separabilni beskonačno-dimenzionalni kompleksni Hilbertovi prostori su izomorfni s $l^2(\mathbb{C})$. Gdje je $l^2(\mathbb{C})$ prostor kvadratno sumabilnih nizova $\{a_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ u $\mathbb{C}$, a "kvadratno sumabilan niz" znači $\sum_n |a_n|^2 < \infty$. No, kao direktnu posljedicu teorema o egzistenciji Hilbertove baze u separabilnom Hilbertovom prostoru (kao što je upravo L^2) i svojstva baze imamo da je preslikavanje elemenata L^2 u niz njihovih Fourierovih koeficjenata (koji leže u l^2) izomorfizam Hilbertovih prostora L^2 i l^2. Zato se autor odmah odlučio na oblik iskaza teorema kakav je dan u glavnom tekstu.

djelovati[8], a čak i odaberemo li nekakvu domenu na kojoj je sve kompatibilno pitanje je hoće li ψ_p uopće biti u njoj. Sjetimo li se računa u koordinatnoj reprezentaciji situacija postaje još gora jer $\psi_p(x) = e^{ipx} \notin L^2(\mathbb{R})$. Na ovaj ćemo se detalj još vratiti u sklopu generaliziranih svojstvenih funkcija, ali u ovom trenutku ne samo da smo sigurni kako nismo smjeli odraditi račun koristeći $\psi_p(x)$, već je i sama pretpostavka njenog postojanja problematična.

Kod primjera 2. nismo deklarirali nikakve domene, ali bez ulaženja u tu raspravu kako $H\phi{=}1$ ne zadovoljava rubne uvjete ono nikako ne može biti dio domene hamiltonijana, stoga se nije smjelo djelovati s H na $H\phi$.

Primjer 4. se upravo svodi na još jedan pokušaj računa izvan (bilo kakve smislene) domene, što je razlog neiščezavanja površinskog člana. Ipak, već s odabirom $\mathcal{D}(P){=}\mathcal{D}_{max}(P)$ simetričnost (9) je zadovoljena zahvaljujući trnjenju površinskog člana u beskonačnosti (za dokaz vidjeti dodatak C).

C. Adjungat operatora i vrste operatora

Do sada smo rekli sve što smo mogli razmišljajući samo o domenama, no teorija operatora je daleko bogatija te da bi se u nju zaputili moramo navesti sljedeće definicije:

Definicija. Neka je A operator na Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$ tada operator $A^\dagger$ zadajemo na idući način:

$$\mathcal{D}(A^\dagger) = \big\{\psi \in \mathcal{H} \,\big|\, \exists\phi \in \mathcal{H}\, \forall\alpha \in \mathcal{D}(A): \langle\psi, A\alpha\rangle = \langle\phi, \alpha\rangle\big\}$$
$$A^\dagger\psi = \phi \tag{20}$$

Propozicija 4. Ako je operator A iz prethodne definicije gusto zadan onda je $A^\dagger$ jedinstven te ga nazivamo *adjungat operatora* A (eng. *adjoint*), te je dodatno njegova domena $\mathcal{D}(A^\dagger)$ isto gusta u $\mathcal{H}$.

Definicija. Neka su A i B operatori, ako je $\mathcal{D}(A){\subseteq}\,\mathcal{D}(B)$ te $\forall\psi\mathcal{D}(A)$: $B\psi{=}A\psi$ tada kažemo da je B *proširenje* od A na $\mathcal{D}$(B) te pišemo $A \subseteq B$.

Definicija. Neka je A operator, kažemo da je on:
- *ograničen* ako $\forall\psi{\in}\mathcal{D}(A), \exists c{\in}\mathbb{R}^+$ t.d. $\|A\psi\| \leqslant c\,\|\psi\|$,
- *zatvoren* ako je njegov graf zatvoren skup[9],
- *zatvoriv* ako postoji zatvoreno proširenje $\overline{A} \supseteq A$ kojega nazivamo *zatvorenje* operatora A,
- *simetričan* ako je gusto zadan te $\forall\psi,\phi{\in}\mathcal{D}(A)$ vrijedi: $\langle\psi, A\phi\rangle = \langle A\psi, \phi\rangle$,
- *samoadjungiran*^{1}0(skraćeno nadalje na SA) ako je simetričan i $A^\dagger{=}A$,
- *esencijalno samoadjungiran* (skraćeno eSA) ako je simetričan te $\overline{A}$ je SA,
- *unitaran* ako je gusto zadan te $AA^\dagger{=}A^\dagger A{=}\mathbb{1}$.

D. Svojstva ograničenih operatora

Definicija. Neka je $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor tada skup svih ograničenih operatora na $\mathcal{H}$ označavamo s $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. *Operatorskom normom*(dalje ćemo samo govoriti norma) nazivamo funkciju:

$$\|.\|_{op} : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \to \mathbb{R},\ \|A\|_{op} = \sup_{\substack{\psi\in\mathcal{H}\\ \|\psi\|_{\mathcal{H}}=1}} \|A\psi\|_{\mathcal{H}} \tag{21}$$

Teorem 5. (BLT od eng.*bounded linear transformation*) Za svaki gusto zadani ograničeni operator A postoji jedinstveno proširenje $\widetilde{A}$ na cijeli Hilbertov prostor $\mathcal{H}$ koje ima istu normu $||\widetilde{A}||_{op} = \|A\|_{op}$.

Propozicija 5. (neka svojstva ograničenih operatora)
(Ogr 1) Operator A je ograničen akko je neprekidan.
(Ogr 2) Za ograničene operatore A i B vrijedi: $\|AB\|_{op} \leqslant \|A\|_{op}\|B\|_{op}$
(Ogr 3) Ograničen operator A je zatvoren akko je njegova domena $\mathcal{D}$(A) zatovrena.
(Ogr 4) Svi operatori na konačno-dimenzionalnim Hilbertovim prostorima su ograničeni.
(Ogr 5) Svi unitarni operatori su ograničeni te im je norma jednaka 1.
(Ogr 6) Ako je operator A ograničen i gusto zadan tada $\|A\|_{op} = \left\|A^\dagger\right\|_{op}$

Iz prethodnog vidimo da su ograničeni operatori vrlo "pitomi" objekti, kod kojih se zahvaljujući BLT teoremu ne moramo bojati domenskih problema, što sve skupa zvuči predobro da bi bilo istinito i to je nažalost točno, jer je direktna posljedica propozicije 6 koja slijedi da nećemo moći formulirati QM držeći se isključivo ograničenih operatora[11]. Što onda, kao što smo najavili, zahvaljujući svojstvu (Ogr 4) u propoziciji 5. znači da moramo

[8] Formalno govoreći tzv. *standardna domena* produkta XP dvaju operatora X i P bi bila: $\mathcal{D}(XP) = \{x \in \mathcal{D}(P) \,|\, Px \in \mathcal{D}(X))\} \neq \mathcal{D}(PX)$, a standardna domena ukupnog komutatora $\mathcal{D}(XP) \cap \mathcal{D}(PX)$ (za koju a priori neznamo sadrži li išta osim nul-funkcije, ali se na njoj algebarski može potvrditi rezultat (1) za komutator te će on biti posve točan).

[9] Graf operatora se definira analogno grafu funkcije: $G_A = \big\{(\psi, A\psi) \,\big|\, \psi \in \mathcal{D}(A)\big\} \subseteq \mathcal{H} \times \mathcal{H}$, a zatvorenost zahtijevamo na kartezijevom produktu $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$, sa standardnom topologijom otvorenih kugli, generiranu udaljenošću $d_{\mathcal{H}\times\mathcal{H}}(\psi, \phi) = \Big(\|\psi\|^2_{\mathcal{H}} + \|\phi\|^2_{\mathcal{H}}\Big)^{1/2}$

[10] Iako je za samoadjungirane operatore u domaćoj literaturi uvriježen naziv *hermitski* u engleskoj je literaturi moguće pronaći hermitske[14] operatore odvojeno definirane kao one koji nisu nužno gusto zadani, ali zadovoljavaju isti uvjet na skalarne produkte kao i simetrični operatori. Kako bi izbjegli tu konfuziju te uskladili nazivlje s internacionalnim standardom (a i smanjili asocijaciju s hermitičnosti na konačno-dimenzionalnim prostorima) autor se odlučio na korištenje pojma samoadjungiran (kojega se može naći spomenutog i u domaćoj literaturi[12]).

zasnivati QM na beskonačno-dimenzionalnom Hilbertovom prostoru.

Propozicija 6. (Winter-Wielandt)
Neka je $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor, tada ne postoji par ograničenih i svugdje definiranih[12] operatora X i P koji bi zadovoljavali komutacijsku relaciju: $[X,P] = XP - PX = i\mathbb{1}$.

Dokaz. Primijetimo da zahvaljujući $\mathcal{D}(X)$=$\mathcal{H}$=$\mathcal{D}(P)$ je bilo kakav produkt operatora X i P zasigurno dobro definiran, te da će njegova domena opet biti cijeli Hilbertov prostor $\mathcal{H}$ (ovo, naravno, vrijedi i za komutator u pretpostavci propozicije, koji je onda identički jednak jediničnom operatoru i po djelovanju i po domeni). Kada smo to raščistili računamo: $[P^{n+1}, X] = P^{n+1}X - XP^{n+1} = P^n[PX - XP] + [P^nX - XP^n] = -iP + [P^n, X] = (...) = -i(n+1)P^n$ iz čega slijedi:

$$\begin{aligned}(n+1)\left\|P^n\right\|_{op} &= \left\|[P^{n+1}, X]\right\|_{op} \\ &\leqslant \left\|P^{n+1}X\right\|_{op} + \left\|XP^{n+1}\right\|_{op} \\ &\leqslant 2\left\|P\right\|_{op}\left\|XP^n\right\|_{op} \\ &\leqslant 2\left\|P\right\|_{op}\left\|X\right\|_{op}\left\|P^n\right\|_{op}\end{aligned} \tag{22}$$

Sada, kako je norma $\mathbb{1}$ jednaka 1 iz prethodnog raspisa (odabir $n = 1$) zaključujemo da $\left\|P^n\right\|_{op} \neq 0$ pa smijemo s njime dijeliti, što i uradimo nakon čega nam ostaje: $n + 1 \leqslant 2\left\|X\right\|_{op}\left\|P\right\|_{op}$ za proizvoljni n $\in \mathbb{N}$ što je u kontradikciji s pretpostavkom o ograničenosti X i P. □

Vratimo se sada na primjer 3. Jedan način kako možemo definirati trag operatora A u Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$ s bazom e_i, $i \in \mathcal{I}$ je kao "sumu matričnih elemenata" $\mathrm{Tr}(A) = \sum_{i\in\mathcal{I}} \langle e_i, Ae_i\rangle$. U slučaju da je A neograničen odmah naslućujemo da ćemo imati velikih problema s konvergencijom te sume, a kako smo upravo vidjeli smo barem je jedan od operatora X i P neograničen pa preostaje zaključak da nismo ni mogli definirati trag za komutator tih operatora, a kamoli raditi algebarske manipulacije na njemu.

[11] Istina je malo suptilnija jer $[X,P] = XP - PX = i\mathbb{1}$ nije jedini način kako se kanonska komutacijska relacija može zadati, primjerice *Weylov način* je preko unitarnih operatora (koji su znamo ograničeni pa nećemo imati domenskih problema) dobivenih eksponenciranjem: $e^{itX}e^{isP} = e^{-ist\hbar}e^{isP}e^{itX}$.

[12] Svugdje definiranih u smislu $\mathcal{D}(X) = \mathcal{H} = \mathcal{D}(P)$, a zapravo znamo i malo više:
Propozicija (Popa) Neka je ϵ>0, $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor te X i P svugdje definirani i ograničeni operatori na $\mathcal{H}$. Ako zahtjevamo da ta dva operatora X i P zadovoljavaju:

$$\left\|[X,P] - i\mathbb{1}\right\|_{op} \leqslant \epsilon$$

Tada slijedi:

$$\left\|X\right\|_{op}\left\|P\right\|_{op} \geqslant \frac{1}{2}log\frac{1}{\epsilon}$$

E. Svojstva Simetričnih, eSA i SA operatora te njihova proširenja

U QM nam ključnu ulogu igraju opservable koje su dane SA operatorima, stoga će nas zanimati ako imamo neki operator-kandidat od kojega želimo "napraviti" opservablu hoće li to biti moguće, a odgovor na to pitanje dat ćemo u ovom odjeljku, zajedno s najbitnijim svojstvima pojedinih vrsta operatora.

Propozicija 7. Neka je A gusto zadan operator na Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$, tada:
(Adj 1) adjungat $A^\dagger$ je zatvoren operator,
(Adj 2) ako je A zatvoren, njegova je domena $\mathcal{D}(A^\dagger)$ gusta u $\mathcal{H}$ te $\left(A^\dagger\right)^\dagger$=$A$

Propozicija 8. (Svojstva simetričnih operatora)
Neka je A simetričan operator na Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$ tada:
(Sim 1) A je zatvoriv, $A \subseteq A^\dagger$ te je $A^\dagger$ zatvoren
(Sim 2) $\left(A^\dagger\right)^\dagger \subseteq A^\dagger$
(Sim 3) $A \subseteq \overline{A} \subseteq A^\dagger$
(Sim 4) $\overline{A}$ je isto simetričan
(Sim 5) $\forall\psi\in\mathbb{R}$: $\langle\psi, A\psi\rangle \in \mathbb{R}$
(Sim 6) ako je $\dim(\mathcal{H})<\infty$ A je SA operator.

Teorem 6. (Hellinger–Toeplitz, skraćeno HT)
Neka je A simetričan i svugdje definiran ($\mathcal{D}(A) = \mathcal{H}$) operator na Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$, tada je A ograničen.

Uz propoziciju 8. vrijedi napomenuti kako adjungat simetričnog operatora ne mora nužno biti njegovo zatvorenje niti ne mora biti simetričan. HT teorem nam opet potvrđuje da (jer znamo da je barem jedan od X i P neograničen po propoziciji 6.) ćemo se u QM morati brinuti oko domenskih problema jer nam već simetrični (u koje opservable kao SA operatori upravo i spadaju) neograničeni operatori ne mogu imati cijeli $\mathcal{H}$ za domenu. Možemo dodati da je svojstvo (Sim 6) je diretkna posljedica HT teorema te svojstva (Ogr 5), što opet pokazuje kako se suptilnosti teorije gube prelaskom na konačnodimenzioanaln prostor.

Propozicija 9. (Proširenje eSA operatora)
Neka je A eSA operator, tada $\overline{A} = A^\dagger = \left(A^\dagger\right)^\dagger = \left(\overline{A}\right)^\dagger$

Prethodna propozicija zajedno s propozicijom 4. kaže kako eSA operatori imaju jedinstveno SA proširenje te je ono točno jednako adjungatu $A^\dagger$. Ipak, provjeravanje je li operator eSA preko računanja adjungata i onda dodatne provjere je li $A^\dagger$ SA je vrlo zamorno, a dodatno ulazimo u probleme ako simetričan operator nije eSA, jer tada on može i ne mora imati SA proširenje (a ako ga ima neće nužno biti jednistveno). Srećom, teorem 7. o von Neumannovim kriterijima SA proširenja nam daje vrlo elegantan odgovor:

Definicija. Neka je A gusto zadan operator veličine

$$n_+ = \dim\left(\ker\left(A^\dagger - i\mathbb{1}\right)\right) \text{ te } n_- = \dim\left(\ker\left(A^\dagger + i\mathbb{1}\right)\right) \tag{23}$$

nazivamo[13] *indeksi defekta operatora A.*

Teorem 7. (von Neumannovi kriteriji)
Neka je A simetričan operator, ako je:
(vN 1) $n_+ = n_- = 0$ A je eSA
(vN 2) $n_+ = n_- \neq 0$ A nije eSA ali postoji SA proširenje
(vN 3) $n_+ \neq n_-$ A nije eSA niti postoji SA proširenje.

Dakle, da bi vidjeli kakav je (po pitanju simetričnosti, eSA, SA) neki operator metoda je sljedeća: Prvo, provjerimo je li njegova domena gusta, ako ne onda već ni ne možemo zadati adjungat. Drugo, ispitamo simetričnost provjeravajući $\forall\psi,\phi \in \mathcal{D}(A)$: $\langle\psi, A\phi\rangle = \langle A\psi, \phi\rangle$. Konačno, ako je operator simetričan odredimo adjungat te (ako nismo već potvrdili da imamo SA operator) njegove indekse defekta i pozovemo se na prethodni teorem. Ovaj postupak ćemo detaljno provesti u primjeru 7.

Definicija. *Schwartzov prostor funkcija* definiramo kao

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}, \mathbb{C}) = \left\{\psi \in C^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \,\middle|\, \forall n, m \in \mathbb{N}^n, \|\psi\|_{n,m} < \infty\right\} \tag{24}$$

gdje je $\|\cdot\|_{n,m} : \mathcal{S} \to \mathbb{R}$ seminorma[14] na $\mathcal{S}$ dana sa:

$$\|\psi\|_{n,m} = \sup_{x\in\mathbb{R}} \left| x^n \frac{\mathrm{d}^m\psi(x)}{\mathrm{d}x^m} \right| \tag{25}$$

Gornja definicija znači da bilo koja Schwartzova funkcija i sve njene derivacije trnu brže od bilo kojeg polinoma, pa se Schwartzov prostor često naziva i *prostor rapidno trnućih funkcija*, naravno, jasno je da $\mathcal{S}(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \subseteq L^2(\mathbb{R})$, ali vrijedi još i više:

Propozicija 10. $\mathcal{S}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ je gust u $L^2(\mathbb{R})$ te su njegova baza $\psi_n = e^{-x^2} H_n$ gdje su H_n Hermiteovi polinomi, $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(e^{-x^2}\right)$.

Iz prethodne propozicije po teoremu 2. imamo da je Hilbertov prostor L^2 separabilan, što je veoma bitno jer to i jedan od zahtjeva na prostor stanja kojega nameću aksiomi QM.

Dodatno, odmah je vidljivo da je $\mathcal{S}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ *maksimalni invarijantni prostor*[15] operatora X i P, stoga, ako moramo raditi s produktima tih operatora uvijek imamo opciju da koristimo u prostor Schwartzovih funkcija gdje smijemo množiti (formalno, zapravo radimo kompozicije) operatore bez razmišljanja o domenama[16]. To nam dodatno omogućava da ponovno damo značenje kanonskom komutatoru (1), koji onda vrijedi restringiramo li domene na $\mathcal{S}$.

Primjer 7. (Operatori X,P,H slobodne čestice na $\mathbb{R}$)
Uzmimo operatore X, P i H s odabirom domene $\mathcal{S}$, tvrdimo da su svi u tom slučaju eSA, a radi jednostavnosti neka je masa čestice 1/2. Po propoziciji 10. imamo da je uvjet gustoće domene je odmah zadovoljen.
Simetričnost operatora X je trivijalna:

$$\langle\psi, X\phi\rangle = \int \psi^* x\phi \mathrm{d}x = \int (x\psi)^*\phi \mathrm{d}x = \langle X\psi, \phi\rangle \tag{26}$$

Za simetričnost operatora P iskoristimo formulu (4) iz računa u primjeru 4:

$$\langle\psi, P\phi\rangle = -i\left(\psi^*\phi\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty} + \langle P\psi, \phi\rangle = \langle P\psi, \phi\rangle \tag{27}$$

vidimo da površinski član iščezava jer su $\psi, \phi \in \mathcal{S}$. Da bi pokazali simetričnost H odradimo analogni račun, gdje iz istog razloga površinski član utrne:

$$\langle\psi, H\phi\rangle = \left(\psi^*\phi' - \psi'^*\phi\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{\mathbb{R}} \psi''^*\phi \,\mathrm{d}x = \langle H\psi, \phi\rangle \tag{28}$$

Sada moramo naći adjungat ovih operatora, odnosno, njegovu domenu. To postižemo po definiciji tražeći sve $\psi \in \mathcal{H}$ t.d. $\langle\psi, A\phi\rangle = \langle A\psi, \phi\rangle$, za $\phi \in \mathcal{S}$, gdje koristimo gotov raspis skalarnog produkta od maloprije.
Za $A = X$ imamo da je domena $\mathcal{D}(X^\dagger) = \mathcal{D}_{max}(X)$ jednaka maskimalnoj domeni iz primjera 6. Kako $\mathcal{D}(X^\dagger) \neq \mathcal{D}(X) = \mathcal{S}$ po definiciji vidimo da X nije SA, ali još uvijek ima nade da je eSA ili da mu možemo naći SA proširenje. Isto se dešava za $A = P$ (u slučaju sumnje v. lemu 1.), tj. $\mathcal{D}(P^\dagger) = \mathcal{D}_{max}(P)$. Konačno, imamo da ni H nije SA jer je[17]:

[13] Jezgra operatora A je definirana isto kao i u linearnoj algebri, $\ker(A) = \{\psi \in \mathcal{D}(A) \mid A\psi = 0\}$.

[14] Za definicju seminorme vidjeti dodatak D *Fréchetov prostor i Gelfandov triplet.*

[15] Maksimalni invarijantni prostor X skupa operatora $\{A_i\}_{i\in\mathcal{N}\subseteq\mathbb{N}}$, jest onaj koji ostaje nepromijenjen pod djelovanjem bilo kojeg produkta tih operatora, a to je sigurno zadovoljeno ako vrijedi $\mathcal{D}(A_i) = X$ te $\operatorname{ran}(A_i) = X$ (što je slučaj kod nas).

[16] Dodatno, zahvaljujući gustoći $\mathcal{S}$ možemo i izračunati djelovanje takvih produkata operatora na bilo koje stanje ψ razvijanjem njega po ONB – primjerice, Hermiteovim polinomima (ovakav račun je jasno, vrlo zamoran, ali barem u principu izvediv):

$$\begin{aligned}\left(\prod_n A_n\right)\psi &= \left(\prod_n A_n\right)\left(\sum_{i\in\mathcal{I}} \langle e_i, \psi\rangle\, e_i\right)\\ &= \sum_{i\in\mathcal{I}}\left(\langle e_i, \psi\rangle \left(\prod_n A_n e_i\right)\right)\end{aligned}$$

$\mathcal{D}(H^\dagger) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) \,|\, \psi', \psi'' \in L^2(\mathbb{R})\} \subsetneq \mathcal{D}_{max}(H)$
Iduće izračunajmo indekse defekta tražeći nul-potprostor operatora rješavajući ODJ:

$$A^\dagger \psi_\pm = \pm i \psi_\pm, \quad \psi_\pm \in \mathcal{D}(A^\dagger)$$

Za $A{=}X$ jedino je rješenje $\psi = 0$, što znači da je $n_+ = n_- = 0$ pa je X eSA na $\mathcal{S}(\mathbb{R})$.
Za $A{=}P$ rješenje je $\psi_\pm = ce^{\pm x}$, ali to nije niti kvadratno-integrabilno (sa izuzetkom trivijalnog rješenja c=0), slijedi $n_+ = n_- = 0$ tj. P je eSA na $\mathcal{S}(\mathbb{R})$.
Za $A{=}H$ rješenje je $\psi_\pm = ce^{\pm\sqrt{i}x} = ce^{\pm(1+i)x/\sqrt{2}}$, što opet nije kvadratno-integrabilno (opet, s izuzetkom trivijalnog rješenja c=0), slijedi $n_+ = n_- = 0$, odnosno, H je eSA na $\mathcal{S}(\mathbb{R})$.
No, to nije sve jer nam propozicija 9. kaže kako je adjungat eSA operatora njegovo jedinstveno SA proširenje pa smo i njih "po putu" pronašli tako da konačno znamo kako pravilno definirati opservable koje odgovaraju položaju, impulsu i energiji (slobodne čestice) na $\mathbb{R}$.

Na kraju još možemo navesti koja dodatna svojstva SA operatori posjeduju:

Propozicija 11. (Svojstva SA operatotra)
Neka je A SA operator u Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$, tada:
(SA 1) A je zatvoren
(SA 2) A nema (netrivijalnih) eSA proširenja niti simetričnih proširenja.

F. Rezolventa i spektar operatora

Među bitnijim pojmovima vezanim uz operatore nalazi se, kao jedna od invarijanti operatora, i spektar te, u pravilu, kada ga fizičari spominju misle na skup svojstvenih vrijednost, što je točno samo ako smo u konačno-dimenzionalnom prostoru, dok prelaskom na beskonačno-dimenzionalni se stvari (kao što smo već puno puta vidjeli) kompliciraju. Da bismo mogli uvesti spomenuto poopćenje moramo prvo objasniti pojam rezolvente:

Definicija. Neka je A operator na Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$, tada podskup kompleksnih brojeva:

$$\rho(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} \,|\, \text{postoji ogr. inverz}^{18} \text{ operatora } A - \lambda\mathbb{1}\} \tag{29}$$

nazvamo *rezolventni skup op.* A, a za $\lambda{\in}\rho(A)$ inverz:

$$R_\lambda(A) = (A - \lambda\mathbb{1})^{-1}\colon\ \mathcal{H} \to \mathcal{D}(A) \tag{30}$$

zovemo *rezolventom operatora* A, a komplement rezolventnog skupa $\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A)$ *spektrom operatora* A.

Primijetimo sada nekoliko nekoliko stvari: prvo, zahvaljujući ograničenosti operatora identitete i rezolvente te BLT teoremu nismo se morali brinuti o njihovim domenama koje se mogu proširiti na cijeli $\mathcal{H}$.
Nadalje, pretpostavimo li da za $a{\in}\mathbb{C}$ $A-a\mathbb{1}$ nije injektivno, onda je sigurno $a{\in}\sigma(A)$, ali istovremeno to povlači da je jezgra $\mathrm{Ker}(A - a\mathbb{1})$ neprazna, tj. da postoji $\psi_a{\in}\mathcal{D}(A)$ takav da je $(A - a\mathbb{1})\psi_a = 0$ – vratili smo se upravo na rješenje problema svojstvenih vrijednosti koje nam leže u (ovako redefiniranom) spektru! Iako smo sigurno zadovoljni time da smo dobili svojevrsnu kompatibilnost sa starim pojmom spektra, možda ćemo doći u napast pitati se koja je onda poanta ovog pristupa, ali, ako smo pažljivi, primijetit ćemo da u spektru možemo imati i druge vrijednosti za koje inverz ne postoji iz drugih razloga (te njima tada neće biti pridružena rješenja svojstvenog problema), a klasifikacija kojih je predmet sljedeće definicije:

Definicija. Neka je A gusto zadan operator, tada spektar možemo razložiti na tri, po parovima disjunktna, skupa:

$$\sigma_p(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} \,|\, A - \lambda\mathbb{1} \text{ nije injekcija}\} \tag{31}$$

nazivamo *točkasti spektar* i on se podudara s skupom svojstvenih vrijednosti;

$$\sigma_c(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} \,|\, A - \lambda\mathbb{1} \text{ ima gustu sliku, je injekcija, ali ne i surjekcija}\} \tag{32}$$

---

[17] *Dokaz.* Obzirom da je djelovanje $H^\dagger$ restringirano na domenu $\mathcal{S}$ jednako drugoj derivaciji, jasno je da vrijedi $\mathcal{D}(H^\dagger) \subseteq \mathcal{D}_{max}(H)$, odnosno sigurno ćemo imati uvjet kvadratne-integrabilnosti same funkcije te njene druge derivacije. Imajući na umu, počinjemo od zahtjeva:

$$\int \psi^* \phi''\,\mathrm{d}x - \int \psi''^* \phi\,\mathrm{d}x = (\psi^*\phi' - \psi'^*\phi)\Big|_{-\infty}^{+\infty} \stackrel{!}{=} 0$$

Obzirom da je $\phi \in \mathcal{S}$ on i njegova derivacija trnu u oba limesa i to "brže" od bilo kojeg polinoma. Dakle, najmanji uvjet kojega moramo nametnuti jest da limesi $\lim_{x\to\pm\infty}\psi(x)$ i $\lim_{x\to\pm\infty}\psi'(x)$ postoje i da su konačni (u slučaju polinomijalne divergencije pogazili bi uvjet $\psi \in L^2$). Sada pogledajmo možemo li taj uvjet ekvivalentno i "ljepše" izreći:
Parcijalnom integracijom dobiva se:

$$\|\psi'\|^2 = \int \psi'^*\psi'\,\mathrm{d}x = (\psi^*\psi')\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \psi^*\psi''\,\mathrm{d}x$$

Gdje nam je prvi član konačan po pretpostavci o limesima, a drugi jer su $\psi, \psi'' \in L^2$, pa imamo $\|\psi'\| < \infty$ tj. $\psi' \in L^2$. Drugi smjer implikacije slijedi direktno primjenom leme 1. na ψ i ψ'.

[18] Situacija je analogna kao i kod inverza funkcije: ako je operator A bijekcija onda postoji jedinstven operator tzv *inverz* A^{-1} : $\mathrm{Ran}(A){\to}\mathcal{D}(A)$ t.d. $(AA^{-1})(\psi){=}\psi{=}(A^{-1}A)(\psi)$, za sve $\psi{\in}\mathcal{D}(A)$ te kažemo da je A invertibilan. Zgodno je da se uvjet injektivnosti može karakterizirati preko jezgre operatora kao: operator A je injektivan akko $\mathrm{Ker}(A) = 0$.

nazivamo *kontinuirani spektar*;

$$\sigma_r(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid A - \lambda\mathbb{1} \text{ nema gustu sliku, je injekcija, ali ne i surjekcija}\} \quad (33)$$

nazivamo *rezidualni spektar.*

Propozicija 12. (Spektar i SA operatori)
Neka je A SA opertor na Hilbertovom prostoru $\mathcal{H}$, tada:
(SAs 1) Spektar $\sigma(A)$ je neprazan, zatvoren i realan;
(SAs 2) Rezidualni spektar je prazan tj, $\sigma_r(A) = \varnothing$.
Dodatno, simetričan operator A je SA akko mu je spektar realan. Ukoliko je spektar sastavljen od samo točkastog dijela tada:
(SAs 3) postoji ONB za $\mathcal{H}$ sastavljena od svojstvenih vektora od A.

Do sada smo proširili shvaćanje spektra i vidjeli kako se ono uklapa u problem svojstvenih vrijednosti, ali preostaje nam pitanje kako tu odraditi ikakav praktični račun? Čini se da ćemo se neminovno morati baviti traženjem jezgre i slike $A - \lambda\mathbb{1}$, što je zamoran posao, a traženje inverza može biti i još zahtjevnije. Na sreću, oba se dijela posla drastično pojednostavljuju kada se bavimo multiplikativnim operatorima[19], gdje ćemo sada promotriti operator položaja kao osnovni primjer. Pri čemu treba imati na umu da, kao što ćemo u idućem poglavlju vidjeti, se svi operatori pomoću prikladnih integralnih transformacija svode na multiplikativne, tako da ćemo jako rijetko (ako uopće) morati probleme ovakvog tipa rješavati direktno.

Primjer 8. (Spektar i rezolventa multiplikativnog op.)
Neka nam je zadan operator položaja na svojoj maksimalnoj domeni, a u slučaju da imamo bilo kakav složeniji multiplikativni operator može se sprovesti analogna analiza.
Kako je djelovanje $(X - \lambda\mathbb{1})\psi = (x - \lambda)\psi(x)$, odmah možemo "pogoditi" da mu je inverz jednostavno množenje funkcijom: $(X - \lambda\mathbb{1})^{-1}\psi = \psi(x)/(x - \lambda)$. Vidimo da je ovo ograničeno za sve $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, pa zaključujemo da je upravo to rezolventni skup operatora položaja, iz čega odmah slijedi da spektar uključuje sve realne brojeve: $\sigma(X) = \mathbb{R}$.
Preostaje pitanje što spada u koju od tri particije spektra. U ovom trenu se ni čak ne moramo poslužiti rezultatima prethodnih primjera, već iz simetričnosti X i realnosti njegovog spektra po propoziciji 12. smo mogli odmah zaključiti da je on SA, što po istoj propoziciji kaže da je rezidualni spektar prazan. No, to možemo i diretno pokazati tako da se uvjerimo da je slika $(X + \lambda\mathbb{1})$ gusta, što počinjemo konstruirajući za proizvoljni $\psi \in \mathcal{H}$ niz funkcija u domeni $\mathcal{D}_{max}(X)$:

$$\phi_n(x) = \chi_{\mathbb{R}\setminus[\lambda - \frac{1}{n}, \lambda + \frac{1}{n}]} \frac{\psi(x)}{x - \lambda} \quad (34)$$

Gdje je χ_Ω karakteristična funkcija:

$$\chi_\Omega(x) = \begin{cases} 1, & x \in \Omega \\ 0, & \text{inače} \end{cases} \quad (35)$$

Djelujemo li na (34) s operatorom kojega proučavamo lako vidimo da imamo konvergenciju:

$$(X - \lambda\mathbb{1})\phi_n(x) \to \psi(x) \quad (36)$$

Sada svaki element Hilbertovog prostora možemo dobiti kao limes niza $((X - \lambda\mathbb{1})\phi_n(x))_n$, što po definiciji znači da je slika gusta.

Dakle na dva načina smo "eliminirali" razidualni spektar. Sada, sjetimo li se da operator X nema rješenja svojstvenog problema to nam povlači da je $\mathrm{Ker}(X - \lambda\mathbb{1}) = 0$, što daje da je $(X - \lambda\mathbb{1})$ uvijek injektivno te smo tako riješili i točkasti spektar. Konačno, slijedi zaključak $\sigma_p(X) = \varnothing = \sigma_r(X)$ te $\sigma(X) = \sigma_c(X) = \mathbb{R}$.

III. DISTRIBUCIJE I OPREMLJENI HILBERTOV PROSTOR

A. Motivacija i pojam distribucije

U prethodnom odjeljku smo se susreli s podjelom spektra operatora, a kako se gotovo uvijek bavimo s SA operatorima ta se podjela svodi na točkasti i kontinuirani spektar. Prvog smo odmah uspjeli povezati s rješenjima svojstvenog problema, dok za drugi za sada nismo uvodili takvu interpretaciju, ali već iz paradoksa s početka možemo naslutiti da bi ona trebala biti vezana uz traženje rješenja svojstvenog problema izvan Hilbertovog prostora, što ćemo (između ostaloga) u ovom poglavlju istražiti. Dakle, želimo li se na kontroliran način udaljiti od Hilbertovog prostora to će nas neminovno voditi na pojam distribucije, ali prvo se trebamo podsjetiti duala vektorskog prostora:

Definicija. Neka je V vektorski prostor nad poljem $\mathbb{C}$, tada skup svih linearnih preslikavanja $g : V \to \mathbb{C}$ nazivamo *Dual vektorskog prostora* V i označavamo ga s V^*, a njegove elemente nazivamo linearnim funkcionalima.

Može se pokazati [15] da je V^* vektroski prostor te, štoviše, da ako "početni" prostor V ima određenu bogatiju strukturu (primjerice da je unitaran), da je moguće tu strukturu uvesti i u V^*. Dok je za nas, konkretno, bitan sljedeći teorem:

Teorem 8. (Riesz)
Neka je $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor, tada za svaki element iz

[19] Multiplikativni operatori su oni čije se djelovanje sastoji samo od množenja (kompleksnom) funkcijom.

njegovog duala $g{\in}\mathcal{H}^*$ postoji $\phi_g{\in}\mathcal{H}$ takav da je za sve $\psi{\in}\mathcal{H}$ djelovanje tog funkcionala upravo jednako skalarnom produktu na $\mathcal{H}$:

$$g(\psi) = \langle \phi_g, \psi \rangle \tag{37}$$

Možda značaj ovog teorema nije očit na prvi pogled, stoga se možemo podsjetiti idućeg poznatog rezultata:

Propozicija 13. (Dirac δ)
Neka je $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor, tada ne postoji $\phi_{\delta(a)}{\in}\mathcal{H}$ sa svojstvom da je za sve $\psi{\in}\mathcal{H}$ zadovoljeno:

$$\left\langle \phi_{\delta(a)}, \psi \right\rangle = \psi(a) \tag{38}$$

Kada smo spomenuli traženje rješenja svojstvenog problema izvan $\mathcal{H}$ mogli smo se ponadati da ćemo ih moći ugraditi u dualni prostor (za kojega apriori ne znamo je li veći). Sada nam je jasno da, zahvaljujući Rieszovom teoremu, su Hilbertov prostor i njegov dual izomorfni te koristeći prethodnu propoziciju već na primjeru operatora položaja X vidimo da "delta funkciju" nećemo ni u principu moći smjestiti u $\mathcal{H}^*$. No, onda se postavlja pitanje kako je moguće da je baratanje s takvim objektima funkcioniralo u Diracovoj notaciji te je li moguće nju ikako matematički konzistentno definirati? Odgovor je potvrdan i da bismo do njega došli potrebno je proširiti dualni prostor svojevesnim poopćavanjem pojma funkcije na distribucije, a mi ćemo konkretno koristiti kaljene distribucije:

Definicija. *Kaljenom distribucijom* (eng. *tempered distribution*, nadalje skraćeno na TD) nazivamo neprekidni linearni funkcional[20] $g : \mathcal{S}(\mathbb{R}){\to}\mathbb{C}$. Prostor svih TD označavamo s $\mathcal{S}'$. Niz $(g_n)_{n\in\mathbb{N}}{\in}\mathcal{S}'$ konvergira ka $g{\in}\mathcal{S}'$ ako za sve $\psi{\in}\mathcal{S}$ vrijedi:

$$\lim_{n\to\infty} g_n(\psi) = g(\psi) \tag{39}$$

Tu možemo napomenuti kako nemamo problema s testiranjem konvergencija jer se limesi izvrijednjuju na $\mathbb{C}$, gdje imamo već dobro poznatu topologiju otvorenih kugli, što znači da u prostoru TD radimo s topologijom (i konvergencijom) u slabom smislu. Također, vrlo je česta sljedeća notacija koja upućuje na skalarni produkt:

$$g(\psi) = \langle g, \psi \rangle \text{ "=" } \int_{\mathbb{R}} g^* \psi \, \mathrm{d}x, \tag{40}$$

što je fizičarima dobro poznato pod maksimom da *"distribucija dobiva smisao samo pod integralom"*. Ovdje moramo biti oprezni, jer iako sve algebarske manipulacije koje možemo uraditi koristeći integral jesu točne, to je posljedica toga što je matematička teorija distribucija zasnovana upravo s ciljem da bude u sladu s Diracovom idejom o generaliziranim funkcijama koja se zaista koristi relacijom s integralom u (40) i koja je već duže bila u uporabi kod fizičara.

Zaista, kod jednakosti u navodnnicima u (40) ako je g integrabilna funkcija najviše polinomijalnog rasta u beskonačnosti, smjer s desna na lijevo vrijedi tj. na taj se način može zadati TD. Ipak, ovo nije jedan-na-jedan korespondencija, tj. drugi smjer ne mora uvijek vrijediti jer postoje TD za koje ne postoji odgovarajuća funkcija (npr. ako želimo TD s djelovanjem delte $\delta_a(\psi) = \psi(a)$).

[20] Primjetimo da je domena ovih funkcionala Schwartzov prostor funkcija, za razliku od "običnih" distribucija kod kojih je to prostor test-funkcija.

B. Opremljeni Hilbertov prostor, generalizacija svojstvenog problema i Diracova notacija

Sada ćemo na primjeru izvesti opremljeni Hilbertov prosotor[21] (nadalje skraćeno na RHS), dok se poopćenje ovog postupka može pronaći u dodatku D *Fréchetov prostor i Gelfandov triplet*, a svi rezultati koje tu iznesemo biti valjani ako zamjenimo korištene prostore proizvoljnima (dokle god oni zadovoljavaju uvjete iz dodatka). Možemo dodati kako je zanimljivo da su eksplicitne konstrukcije RHS za različite slučajave potencijala još uvijek tema koja se aktivno istražuje[16–18].

Primjer 9. Neka su dani Schwartzov prostor $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, TD prostor $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$ te Hilbertov prostor $L^2(\mathbb{R})$. Definirajmo preslikavanja: $i\colon \mathcal{S}{\to}L^2$ koje jednostavno pridruži Schwartovu funkciju pripadajućoj klasi u L^2 te $i^*\colon L^2{\to}\mathcal{S}'$ koje djeluje na sljedeći način:

$$\psi{\in}L^2 : \quad (i^*(\psi))(f) = \langle \psi, i(f) \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^* f \, \mathrm{d}x, \quad \forall f{\in}\mathcal{S} \tag{41}$$

Također bi trebalo biti jasno iz rasprave u prethodnom odjeljku da vrijedi sljedeća inkluzija:

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) \subseteq L^2(\mathbb{R}) \subseteq \mathcal{S}'(\mathbb{R}) \tag{42}$$

Takva trojka prostora, zajedno s navedenim preslikavanjima i, i^* čini jedan *Gelfandov triplet.* Možemo istim postupkom zadati još jednu trojku:

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) \subseteq L^2(\mathbb{R}) \subseteq \mathcal{S}^\times(\mathbb{R}), \tag{43}$$

gdje se $\mathcal{S}^\times$ definira analogno TD prostoru, s jedinom razlikom da je on sastavljen od neprekidnih antilinearnih funkcionala.

[21] Engleski je naziv *Rigged Hilbert space* (zato i kratica RHS), gdje ono "rigged" dolazi od prijevoda originalnog naziva s ruskog i referira se na složeni sustav konopa i kolotura koji omogućava posadi jedrenjaka da upravlja s jedrima (dakle, ne odnosi se na namještanje što bi bio naivniji prijevod) pa se misli na posve opremljen brod te je zato odabran termin "opremljen".

Te trojke, (a katkada, ali rijetko, i one obje zajedno) se nazivaju RHS, pri čemu je bitno za uočiti da nećemo u QM imati samo jedan RHS, već će se za svaki skup operatora morati konstruirati njihov maksimalni invarijantni prostor i njegov (anti)dual koji će služiti namjesto $\mathcal{S}$ i $\mathcal{S}'$. Dakle, u ovom primjeru imamo RHS za operatore položaja i impulsa te hamiltonijan slobodne QM čestice.

Prvi dio ingenioznosti RHS leži u odabiru $\mathcal{S}$ kao maksimalnog invarijantnog prostora koji nam omogućava bilo koji potrebni račun s X, P, H bez brige o domenama, gdje zahvaljujući njegovoj gustoći možemo bilo koje stanje iz L^2 razviti po njemu. Da bi mogli cijeniti drugi dio trebamo pak najprije uvesti djelovanje operatora na dualni prostor i pojam generaliziranih svojstvenih vektora koje ćemo odmah pojasniti na primjeru.

Definicija. Neka je A SA operator na $\mathcal{H}$ t.d. $\mathcal{S} \subseteq \mathcal{D}(A)$ te $A\mathcal{S}{\subseteq}\mathcal{S}$. Tada definiramo[22] A', *dualno proširenje operaotra A na $\mathcal{S}'$* $A' : \mathcal{S}'{\to}\mathcal{S}'$ preko:

$$g{\in}\mathcal{S}' : \quad (A'g)(\psi) = g(A\psi), \ \ \forall\psi{\in}\mathcal{S} \tag{44}$$

Svojstvene vektore od A' nazivamo *generaliziranim svojstvenim vektorima operatora A* (nadalje skraćeno na GV) te oni zadovoljavaju: $(A'g)(\psi_a) = ag(\psi_a)$.

Primjer 10. (generalizirani svojstveni vektori)
Neka je A operator kao u gornjoj definiciji i neka je $\psi_a{\in}\mathcal{D}(A)$ rješenje njegovog "običnog" svojstvenog problema $A\psi_a = a\psi_a$. Pokažimo da je tada ψ_a ujedno i GV od A: za $\phi{\in}\mathcal{S}$ proizvoljan;

$$\begin{aligned} (A'i^*\psi_a)(\phi) &= (i^*\psi_a)(A\phi) \\ &= \langle\psi_a, A\phi\rangle = \langle A\psi_a, \phi\rangle \\ &= a\,\langle\psi_a, \phi\rangle = (ai^*\psi_a)(\phi) \end{aligned} \tag{45}$$

Što potvrđuje da smo bili u pravu kada smo govorili o A' kao proširenju A. Sada neka su $g{\in}\mathcal{S}'$, $\phi{\in}\mathcal{S}$ i potražimo GV za operatore X i P definirane na svojim maksimalnim domenama:

$$(X'g)(\phi) = g(X\phi) = g(x\phi) = (xg)(\phi) \stackrel{!}{=} (ag)(\phi) \tag{46}$$

$$(P'g)(\phi) = g(P\phi) = g(-i\partial_x\phi) = (i\partial_x g)(\phi) \stackrel{!}{=} (ag)(\phi) \tag{47}$$

Rješenja prethodnih jednadžbi u smislu distribucija su $g = c\delta_a$ za X te $g = ce^{-iax}$ za P, gdje je $c{\in}\mathbb{C}$ proizvoljna konstanta. Sada smo konačno razrješili nedoumicu koja je vuče još od petog primjera: Diracova delta i ravni valovi su GV ovih operatora te spadaju u prostor TD, a njihove svojstvene vrijednosti odgovaraju kontinuiranom spektru, što je u ovom slučaju cijeli $\mathbb{R}$.

[22] Postoji, naravno, i antidualno proširenje $A^\times$ koje se zadaje analogno.

Uz to možemo do kraja opravdati i Diracovu notaciju, gdje su braovi i ketovi distribucije pri čemu braovi spadaju u dual $\mathcal{S}'$, a ketovi u antidual $\mathcal{S}^\times$, a kao takve u njih možemo "staviti" ne samo obične vektore (zahvaljujući korespondenciji preko i^*), već i objekte koji se ne moraju ponašati lijepo, poput GV od maloprije. Vrijedi dodati da je Diracova notacija u neku ruku dvosjekli mač, jer se kod nje stapa notacija gdje ne razlikujemo (anti)dualna proširenja A' i $A^\times$ od samog operatora A, kao ni elemente $\mathcal{S}$, $\mathcal{S}'$, $\mathcal{S}^\times$ i $\mathcal{H}$, što istovremeno ubrzava i olakšava račune, ali je i uzrok velikog broja paradoksa i nesporazuma.

C. Jezgreni spektralni teorem

Nastavimo sada još kratko u smjeru poopćavanja pojmova vezanih uz funkcije, gdje nam je prvi korak u prostor TD uvesti Fourierov transformat[23] (skraćeno nadalje na FT):

Definicija. Neka je $g{\in}\mathcal{S}'$ TD, tada za proizvoljnu Schwartzovu funkciju $\psi{\in}\mathcal{S}$ definiramo *Fourierov transformat TD* kao:

$$\mathcal{F}(g(\psi)) = g(\mathcal{F}(\psi)) \tag{48}$$

Propozicija 14. (svojstva FT i inverz na $\mathcal{S}'$)
FT kao preslikavanje $\mathcal{S}'{\to}\mathcal{S}'$ je neprekidna bijekcija te je, za g i ψ kao u prethodnoj definiciji, njegov inverz dan sa:

$$\mathcal{F}^{-1}(g(\psi)) = g(\mathcal{F}^{-1}(\psi)) \tag{49}$$

pri čemu je naravno kompozicija $\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}{=}\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}{=}\mathrm{id}_{\mathcal{S}'}$ identiteta na prostoru TD.

Definicija. Neka je A SA operator na $\mathcal{H}$ t.d. $\mathcal{S} \subseteq \mathcal{D}(A)$ te $A\mathcal{S}{=}\mathcal{S}$. Definiramo *generalizirani FT*:

$$\begin{gathered} \hat{} : \mathcal{S}{\to}\mathcal{S}' \\ \hat{\psi} = g_a(\psi) \end{gathered} \tag{50}$$

Gdje je nova varijabla generalizirana svojstvena vrijednost a koja kao parametar ulazi u GV g_a. Za operator A kažemo da ima *potpun skup GV* ako mu je generalizirani FT injektivan.

Teorem 9. (Jezgreni spektralni teorem)
Neka je A SA operator kao i prije. Tada za neki skup K taj operator ima potpun skup GV:

[23] Fourierov transformat je početno definiran na apsolutno-integrabilnim funkcijama ($L^1(\mathbb{R})$) te za njega postoji[10] restrikcija na $\mathcal{S}(R)$, koja je kao preslikavanje $\mathcal{S}{\to}\mathcal{S}$ neprekidna bijekcija te djeluje kao je integralna transformacija upravo onako na kakvu smo i "naviknuti". Bitno imati na umu da zahvaljujući tome definicija koja slijedi ima smisla.

$\{g_{a,k} \subseteq \mathcal{S}' \,|\, a{\in}\mathbb{R}, k{\in}K\}$ te postoje konačne Borelove mjere μ_k takve da za sve $\psi{\in}\mathcal{S}$ vrijedi sljedeći rastav:

$$\psi = \sum_{k\in K} \int_{\mathbb{R}} g_{a,k}(\psi) g_{a,k}\, \mathrm{d}\mu_k(a) \tag{51}$$

$$A\psi = \sum_{k\in K} \int_{R} a\, g_{a,k}(\psi) g_{a,k}\, \mathrm{d}\mu_k(a) \tag{52}$$

Ovaj teorem predstavlja svojevrsnu generalizaciju dijagonalizacije[24], što se često u nastavi QM zove prelaskom u bazu operatora. Dio ovog teorema s raspisom se može izreći da je za sve SA operatore moguće pronaći unitarnu trasformaciju koja ih pretvara u multiplikativne, pri čemu se mora uvesti nova mjera u integralima.

Primjer 11. (FT i operatori P, H_{free})
Iz prethodne rasprave znamo da svaki SA operator možemo svesti na multiplikativan pogodnom unitarnom transformacijom pa bilo da računamo GV ili pogodimo (jer znamo da se pri djelovanju FT deriviranje pretvara u množenje) ta transformacija za operator impulsa i hamiltonijan slobodne čestice (neka joj je masa 1/2 jednostavnosti radi) će biti upravo FT. Njihovo će djelovanje biti: $\mathcal{F}P\mathcal{F}^{-1} = p$, $\mathcal{F}H\mathcal{F}^{-1} = p^2$, pa koristeći račun iz primjera 8., imamo da su im rezolvente jednake $1/(p-\lambda)$ i $1/(p^2-\lambda)$, a spektri $\sigma(P) = \mathbb{R}$ i $\sigma(H_{free}) = \mathbb{R}^+$. Gdje vidimo da smo bez muke dobili rezultat koji uopće ne bi bio trivijalan da smo do njega probali doći invertiranjem operatora oblika $\partial_x - \lambda$ i $\partial_x^2 - \lambda$.

IV. AKSIOMATIZACIJA KVANTNE MEHANIKE

Sada opremljeni svim ovim znanjem možemo navesti aksiome QM[25][2, 13] te krećući od kojih smo u stanju izvesti čitavu QM kao konciznu i preciznu teorija[26] – baš onako kako se uradilo s klasičnom mehanikom, što je ovdje u osnovi i bio naš cilj:

Aksiom 1. (Kvantna stanja)
Stanja fizikalnog sustava dana su vektorima na separabilnom kompleksnom Hilberotvom prostru $\mathcal{H}$, ili, općenitije, matricama gustoće $\rho : \mathcal{H}{\to}\mathcal{H}$:

$$\rho = \sum_n a_n P_n,\ \ a_n \geqslant 0,\ \ \sum_n a_n = 1,\ \ \mathrm{Tr}(\rho) = 1 \tag{53}$$

za P_n projektore na jednodimenzionalne potprostore $\mathcal{H}$.

Aksiom 2. (Opservable)
Opservable fizikalnog sistema su SA operatori na $\mathcal{H}$.

Aksiom 3. (Mjerenja)
Ako je stanje ω opisano vektorom $\psi_\omega \in \mathcal{H}$ (matricom gustoće ρ_ω), tada za opservablu A očekivana vrijednost $\omega(A)$ je definirana kao prosjek ishoda ponavljanih mjerenja od A na sistemu u stanju ω, a dan je "matričnim elementom" preko skalarnog produkta:

$$\omega(A) = \langle \psi_\omega, A\psi_\omega \rangle\ \ (= \mathrm{Tr}\,(\rho_\omega A)) \tag{54}$$

Vjerojatnost da mjerenje opservable opservable A na stanju ω opisanim s ρ_ω dade vrijednost iz (Borelovog skupa) $E \subseteq \mathbb{R}$ je dana sa:

$$\mu_\rho^A(E) = \mathrm{Tr}(\rho P_A(E)) \tag{55}$$

gdje je P_A jedinstvena projektivna mjera[27] pridružen operatoru A (sukladno spektralnom teoremu) koji preslikava s Borelovih skupova na $\mathbb{R}$ u $\mathcal{B}(\mathcal{A})$.

Aksiom 4. (Vremenska evolucija)
Neka je $(t_1, t_2) \subseteq \mathbb{R}$ vremenski interval u kojem nema mjerenja i $\rho(t_1)$ stanje na početku tog intervala, onda je stanje na kraju dano s:

$$\rho(t_2) = U(t_2 - t_1)\rho(t_1)U^\dagger((t_2 - t_1) \tag{56}$$

gdje je unitarni operator vremenske evolucije[27]:

$$U(t) = e^{-iHt} = \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda t} \mathrm{dP}_H(\lambda) \tag{57}$$

Aksiom 5. (Kolaps valne funkcije)
Kvantno stanje odmah nakon mjerenja opservable A (za koje je E najmanji Borelov skup čiji je element rezultat mjerenja) je:

$$\psi_{poslije} = \frac{P_A(E)\psi_{prije}}{\|P_A(E)\psi_{prije}\|} \tag{58}$$

U slučaju da je stanja zadajemo matricama gustoće:

$$\rho_{poslije} = \frac{P_A(E)\rho_{prije}P_A(E)}{\mathrm{Tr}\,(P_A(E)\rho_{prije}P_A(E))} \tag{59}$$

---

[24] Vrijedi napomenuti da uz ovaj postoji i "obični" spektralni teorem koji kaže da se SA operatori mogu prikazati kao Riemann-Stieltjesov integral $A = \int \lambda \mathrm{dP}(\lambda)$, gdje su P projektivne mjere, ali zbog velikog broja novih pojmova koje taj teorem iziskuje ovdje ga navodimo samo u najkraćim crtama u dodatku E.

[25] Postoje i ekvivalentni set aksioma kada shvaćamo QM u kontekstu Weilove C*-algebre, a one koje to zanima mogu vidjeti [13, 14].

[26] Ovdje konkretno govorimo o teoriji u smislu matematičke teorije, tj. da se QM kakvu poznajemo može uredno pratiti kao logički slijed zaključivanja gdje nam u osnovi trebaju samo početni aksiomi i već objašnjena matematička temelja, pri čemu se ne dotičemo dodatnih "fizikalno-filozofskih" problema kakve se može sresti u QM, poput problema mjerenja, kvantne informacije, potpunosti teorije i EPR argumenta itd.

[27] Vidjeti dodatak E.

V. ZAKLJUčAK

U ovome radu nam je cilj bio predstaviti strogu matematičku pozadinu QM kojoj se često ne pridaje dovoljno pozornosti. Tako smo prvo motivirali daljnju raspravu i ukazali na potrebu za pažljivijim tretiranjem suptilnosti koje se javljaju pri baratanju s beskonačnodimenzionalnim prostorima preko paradoksa koji iznose na vidjelo nedostatke u razumijevanju i naizgledne probleme u teoriji koje naivan pristup stvara.

Kako bi na sustavan način tom problemu pristupili iznijeli smo niz bitnih spoznaja iz teorije operatora, gdje smo vidjeli da je nezaobilazno u definiranju operaotra deklaracija njegove domene, upoznali smo se s različitim vrstama operatora i njihovim svojstvima. Naučili smo da jedino samoadjungirani operatori mogu predstavljati opservable i kako ih prepoznati te je li moguće i, ako da, kako proširiti operatore-kandidate za opservable da postanu SA. Eventualnim raspravama o tome na kakvim prostorima možemo uopće zasnivati QM smo stali na kraj pokazujući da ju moramo raditi upravo na beskonačnodimenzionalnom seperabilnom Hilbertovom prsostoru te da su svi takvi izomorfni s prostorom L^2 kvadratnoinregrabilnih funkcija.

Proširili smo pojam spektra i na operatore u takvim prostorima, a potaknuti traženjem interpretacije za kontinuirani dio spektra te željom da nekako dademo smisao rješenjima svojstvenog problema koja leže izvan Hilbertovog prostora proučili smo kaljene distribucije. Koristeći kao primjer Schwartzov prostor funkcija konstruirali smo opremljeni Hilbertov prostor te smo vidjeli da se u njemu baratanje s operatorima drastično pojednostavljuje. Usput smo shvatili da na smislen način možemo tu smjestiti Diracove braove i ketove, opravdavajući s matematičkog stajališta kod fizičara sveprisutnu Diracovu notaciju. Konačno smo naveli jednu prikladnu varijantu spektralnog teorema koji predstavlja svojevrsno poopćenje dijagonalizacije.

Tako "oboružani" novim znanjem vraćali smo se na paradokse i pokazali kako njih naravno uopće ni nema te smo ukazali na česte tipove grešaka koji njima rezultiraju. Dok smo cijelim putem navedene ideje odmah primjenjivali na privido trivijalnom primjeru operatora položaja, impulsa i hamiltonijana slobodne čestice, gdje smo uočili da već tako jednostavan slučaj nije uopće trivijalan te zahtjeva pažljivo razmatranje.

VI. DODATAK

A. Minimalno o teoriji mjere

Iako bi sadržaj ovog odjeljka trebao biti poznat svim čitaocima, temeljitosti radi, donosimo najbitnije definicije pojmova koji nam trebaju i/ili na koje se pozivamo.

Definicija. Neka je M neprazan skup, podskup partitivnos skupa od M $\Sigma \subseteq \mathscr{P}(M)$ nazivamo *σ-aglgebra* na M ako je:
(σ1) $M \in \Sigma$
(σ2) $A \in \Sigma \Rightarrow M - A \in \Sigma$
(σ3) za bilo koji niz $\{A_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ u Σ vrijedi: $\bigcup_n A_n \in \Sigma$
Uređen par (M, Σ) zovemo *izmjerljiv prostor*, a elemente Σ *izmjerljivi podskupovi.*

Definicija. Neka je (M, Σ) izmjerljiv prostor, tada funkciju μ: $\Sigma \to [0, +\infty]$ zovemo *mjera na* (M, Σ), ako zadovoljava:
(M1) $\mu(\varnothing) = 0$
(M2) za bilo koji niz $\{A_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ u Σ t.d. $A_i \cap A_j = \varnothing$ za $i \neq j$ vrijedi: $\mu\left(\bigcup_n A_n\right) = \sum_n \mu(A_n)$
Uređenu trojku (M, Σ, μ) zovemo *prostor mjere.*

Definicija. Neka je M neprazan skup, a $\mathcal{E} \subseteq \mathscr{P}(M)$ podskup partitivnog skupa od M. *σ-algebru generiranu* $\mathcal{E}$ definiramo kao najmanju σ-algebru na M koja sadrži $\mathcal{E}$ i pišemo $\sigma(\mathcal{E})$.

Definicija. Neka je (M, T) topološki prostor, tada $\sigma(T)$ zovemo *Borelova σ-algebru*

Cilj svega ovoga jest uzeti standardnu topologiju otovrenih kugli na $\mathbb{R}$, $\mathcal{O}(\mathbb{R})$ (sve analogno i dobro funkcionira ako želimo raditi is$\mathbb{R}^d$) i preko nje generirati Borelovu σ-algebru, čiji će elementi onda biti podskupovi-kandidati kojima želimo (a i matematički to možemo konzistentno odraditi) dodijeliti volumen pomoću mjere, a mjeru koju planiramo koristiti biti će upravo:

Definicija. Funkciju μ_L: $\mathcal{O}(\mathbb{R}) \to [0, +\infty]$, $[a, b\rangle \mapsto b-a$ nazivamo *Lesebgueova mjera na* $\mathbb{R}$.[29]

Definicija. Neka su (M_1, Σ_1) te (M_2, Σ_2) izmjerljivi prostori. Preslikavanje f: $M_1 \to M_2$ zovemo *izmjerljivim* ako je praslika svakog izmjerljivog skupa u M_2 opet izmjerljiv skup u M_1, tj. za sve X $\in \Sigma_2$ vrijedi f^{-1}(X)$\in \Sigma_1$.

Definicija. Neka je (M, Σ, μ) prostor mjere te neka je zadana jednostavna nenegativna izmjerljiva funkcija s: $M \to \mathbb{R}$, $s = \sum_{i=1}^n a_i \chi_{A_i}$, $a_i > 0$, $A_i \cap A_j = \varnothing$ za $i \neq j$, χ_{A_i} karakteristika na A_i, njen *Lebesgueov integral* definiramo kao:

$$\int_M s\,\mathrm{d}\mu = \sum_{i=1}^n a_i \mu(A_i) \tag{60}$$

Definicija. Neka je (M, Σ, μ) prostor mjere, f: $M \to [0, +\infty]$ nenegativna, izmjerljiva funkcija te S skup svih

[29] Formalno, sada bi morao uslijediti dokaz da je μ_L zadovoljava svojstva mjere. Da radimo na $\mathbb{R}^d$ sve bi bilo isto uz to da bi počinjali od kartezijevog produkta intervala koji bi se preslikali u produkt udaljenosti njihovih rubova.

jednostavnih nenegativnih izmjerljivih funkcija s: $M \to \mathbb{R}$, t.d. za sve $x \in M$ $s \leqslant f$ tada je:

$$\int_M f \, \mathrm{d}\mu = \sup_{s \in S} \int_M s \, \mathrm{d}\mu \tag{61}$$

Neka je $g : M \to [-\infty, +\infty]$ izmjerljiva realna funkcija, koristeći pomoćne funkcija $g_\pm$ definiramo *Lebesgueov integral realne funkcije* kao:

$$\int_M g \, \mathrm{d}\mu = \int_M g_+ \, \mathrm{d}\mu - \int_M g_- \, \mathrm{d}\mu \tag{62}$$

gdje su $g_\pm = \pm g\big|_{A_\pm}$ $\quad A_\pm = \{x \in M \mid g(x) \gtrless 0\}$

Neka je $h : M \to \mathbb{C}$ izmjerljiva kompleksna funkcija, tada definiramo *Lebesgueov integral kompleksne funkcije* kao:

$$\int_M h \, \mathrm{d}\mu = \int_M \mathrm{Re}(h) \, \mathrm{d}\mu + i \int_M \mathrm{Im}(h) \, \mathrm{d}\mu \tag{63}$$

B. Konstrukcija prostora L^2

Definicija. Neka je (M, Σ, μ) prostor mjere[30] tada definiramo:

$$\mathscr{L}^2(M, \Sigma, \mu) = \Big\{ f : M \to \mathbb{C} \;\Big|\; \mathrm{Re(f)} \text{ i } \mathrm{Im(f)} \text{ izmjerljive funkcije te } \int_M |f|^2 \, \mathrm{d}\mu < \infty \Big\} \tag{64}$$

Definicija. Za relaciju $\sim$ kažemo da je *relacija ekvivalencije* na skupu X ako za sve $f, g, h \in X$ zadovoljava:
(simetričnost) $f \sim g \Rightarrow g \sim f$
(refleksivnost) $f \sim f$
(tranzitivnost) $f \sim g$ & $g \sim h \Rightarrow f \sim h$

Definicija. Neka je X skup i $\sim$ relacija ekvivalencije na njemu, tada definiramo *kvocijentni skup od X obzirom na* $\sim$ kao:

$$X/\sim \; = \big\{[x] \;\big|\; x \in X\big\} \tag{65}$$

Njegove elemente nazivamo *klase ekvivalencije* te su oni dobiveni na sljedeći način:

$$[x] = \big\{f \in X \;\big|\; f \sim x\big\} \tag{66}$$

Propozicija 15. Neka je (M, Σ, μ) prostor mjere i $\mathscr{L}^2(M, \Sigma, \mu)$ dan kao u definiciji s početka odjeljka. Onda je s $\sim$: $f, g \in \mathscr{L}^2$ $f \sim g \Leftrightarrow f =_{g.s.} g$ (tj. akko je f jednaka g na $M \backslash O$, za O skup mjere nula $\mu(O) = 0$) zadana relacija ekvivalencije na $\mathscr{L}^2$.

[30] Nama će specifično biti: $M = \mathbb{R}$, $\Sigma = \sigma(\mathcal{O}_\mathbb{R})$ Borelova σ-algebra na $\mathbb{R}$ te μ Lesesgueova mjera na $\mathbb{R}$. Dok su svi integrali koji se pojavljuju formalno Lebesgueovi (iako, ako je funkcija Riemann-integrabilna, onda se rezultati L-integrala i R-integrala poklapaju).

Definicija. Neka su (M, Σ, μ), $\mathscr{L}^2(M, \Sigma, \mu)$ i $\sim$ isti kao i u prethodnoj propoziciji. Kvocijentni skup $L^2 = \mathscr{L}^2/\sim$ nazivamo *prostor kvadratno-integrabilnih funkcija.*

I to je kako bi matematičari definirati L^2, a mi ćemo za potrebe QM (da bi došli do valnih funkcija tj. da bi bili u skladu s poznatim izrazom kako je *"kvantno stanje definirano do na globalnu fazu"*) izvest ćemo još jedno kvocijentiranje relacijom ekvivalencije $\sim_*$ gdje je

$$f \sim_* g \Leftrightarrow \exists \phi \in [0, 2\pi\rangle \text{ t.d. } \forall x \in M \;\; f(x) = g(x) e^{i\pi\phi} \tag{67}$$

Sada sve će sve "štimati" – L^2 je ostao vektorski prostor, ali nemamo više problema sa skalarnim produktom.

C. Ponašanje kvadratno-integrabilne funkcije u beskonačnosti

Još na primjeru 4. smo vidjeli kako kvadratna integrabilnost funkcije ne nameće niti postojanje njenog limesa u beskonačnosti (što je istina za navedeni protuprimjer funkcije smanjujućeg češlja), no onda se možemo zapitati koji je dovoljan uvjet da takva funkcija trne u beskonačnosti. Odgovor na to smo naveli u tekstu, a to je da dodatno nametnemo zahtjev postojanja prve derivacije (gotovo svugdje) te njene kvadrantne integrabilnosti.

Lema 1. Neka je $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ te ako je $\psi' \in L^2(\mathbb{R})$ tada slijedi: $\lim_{x \to +\infty} \psi(x) = 0 = \lim_{x \to -\infty} \psi(x)$.

Dokaz.

$$\frac{\mathrm{d}\,|\psi(x)|^2}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}\,(\psi^* \psi)}{\mathrm{d}x} = \psi'^* \psi + \psi^* \psi' \Big/ \int_a^b \mathrm{d}x, \;\; [a, b] \subseteq \mathbb{R}^+$$

$$\int_a^b \frac{\mathrm{d}\,|\psi|^2}{\mathrm{d}x} \mathrm{d}x = \int_a^b \left(\psi'^* \psi + \psi^* \psi'\right) \mathrm{d}x$$

$$|\psi(b)|^2 = |\psi(a)|^2 + \langle \psi'^*, \psi \rangle_{[a,b]} + \langle \psi^*, \psi' \rangle_{[a,b]} \Big/ \lim_{b \to +\infty}$$

$$\lim_{b \to +\infty} |\psi(b)|^2 = |\psi(a)|^2 + \langle \psi'^*, \psi \rangle_{[a,+\infty\rangle} + \langle \psi^*, \psi' \rangle_{[a,+\infty\rangle} = \text{const.} < \infty$$

Gdje smo u zadnjem redu iskoristili pretpostavku o kvadratnoj integrabilnosti na $\mathbb{R}$ ψ i njene derivacije što je povuklo su one i iz $L^2([a, +\infty\rangle)$ pa onda CSB nejednakost garantira konačnost dvaju skalarnih produkata. Sada konstruirajmo niz intervala $(\mathrm{I}_n)_n$ gdje je $\mathrm{I}_n = [nL, (n+1)L\rangle$ i promotrimo:

$$\sum_n \int_{I_n} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = \int_0^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = \|\psi\|^2_{[0,+\infty\rangle} < \infty$$

Ali onda je redslijeve strane jednakosti konvergentan, za kojega po konstrukciji vidimo da je pozitivan i rastuć, iz čega slijedi zaključak da njegovi elementi trnu, a dodatno kako su intervali I_n su po duljini jednaki imamo sljedeće:

$$0 = \lim_{n\to+\infty} \int_{I_n} |\psi(x)|^2 \,\mathrm{d}x \geqslant \min_{x\in I_n} |\psi(x)|^2 \cdot L \geqslant 0$$
$$\Rightarrow \lim_{n\to+\infty} \left(\min_{x\in I_n} |\psi(x)|^2 \right) = 0$$

Sada isti postupak možemo ponoviti za bilo koju širinu intervala $\epsilon > 0$ te bilo koju početnu točku intervala $a > 0$, konačan je zaključak:

$$\lim_{x\to+\infty} |\psi(x)|^2 = \text{const.}$$
$$\lim_{a\to+\infty} \left(\min_{x\in[a,a+\epsilon\rangle} |\psi(x)|^2 \right) = 0$$

Druga jednakost nam govori kako je jedno gomilište funkcije $|\psi(x)|^2$ u beskonačnosti nula, dok prvi uvjet dovori kako ta funkcija ima samo jedno gomilište u beskonačnosti, stoga imamo samo jedno gomilište i ono je u nuli, tj. konačno dolazimo do traženog rezultata:

$$\lim_{x\to+\infty} |\psi(x)|^2 = 0 \Rightarrow \lim_{x\to+\infty} \psi(x) = 0$$

Drugi dio dokaza za limes u $-\infty$ ide analogno.

□

D. Fréchetov prostor i Gelfandov triplet

Lako se provjeri da je Schwartzov prostor vektorski prostor, ali želimo li od njega napraviti normirani prostor javit će nam se isti problem s nul-funkcijom i uvjetom strogosti ($\|v\|=0 \Leftrightarrow v=0$) u normi koji nas je već prije primorao na konstrukciju prostora L^2. No, za naše potrebe, nećemo se morati ponovno upuštati u taj postupak, nego ćemo samo prestati nametati uvjet strogosti tako dolazeći do pojmova seminorme, Fréchetovog prostora i njegovog (anti)duala:

Definicija. Neka je V vektorski prostor nad poljem $\mathbb{C}$, preslikavanje $p : V\to\mathbb{R}^+$ nazivamo *seminorma* ako ono za sve $u, v\in V$ te $\lambda\in\mathbb{C}$ zadovoljava:
(homogenost) $p(\lambda v) = |\lambda| p(v)$
(relacija trokuta) $p(u + v) \leqslant p(u) + p(v)$

Definicija. Neka je V vektorski prostor i p_j, $j\in\mathbb{N}$ prebrojivo beskonačna familija seminormi na njemu. V zajedno s njegovim seminormama p_j nazivamo *Fréchetov prostor* ako je zadovoljeno:
(Fr1) $v\in V$ je 0 akko $\forall j\in\mathbb{N}$: $p_j(v)=0$
(Fr2) ako je niz $(v_n)_{n\in\mathbb{N}}$ Cauchyjev za sve seminorme p_j onda postoji $v\in V$ t.d. v_n konvergira ka njemu po svim seminormama p_n.

Definicija. Neka je V Fréchetov prostor, skup svih neprekidnih (anti)linearnih funkcionala $g: V\to\mathbb{C}$ nazivamo *(anti)dual Fréchetovog prostora* i označavamo ga s V' ($V^\times$).

Propozicija 16. Schwartzov prostor funkcija $\mathcal{S}$ zajedno sa svojim seminormama $\|\cdot\|_{n,m}$ čini Fréchetov prostor.

Sada smo konačno u stanju precizno i općenito konstruirati Gelfandov triplet prostora:

Definicija. Neka je $\mathcal{H}$ Hilbertov prostor, V Fréchetov prostor te $i: V\to\mathcal{H}$ neprekidno linearno preslikavanje s gustom slikom. Ono tada inducira neprekidno injektivno antilinearno preslikavanje $i^*: \mathcal{H}\to V'$ koje djeluje prema pravilu:

$$\psi\in\mathcal{H} : \quad (i^*(\psi))(v) = \langle\psi, i(v)\rangle \quad \forall v\in V \tag{68}$$

Gdje je konačni rezultat djelovanja jednostavni skalarni produkt na $\mathcal{H}$ (obzirom da je $i(v)\in\mathcal{H}$). Vrijedi inkluzija: $V \subseteq \mathcal{H} \subseteq V'$. Uređenu trojku $(V, \mathcal{H}, i)$ zovemo *Gelfandov triplet prostora* (što se referira na prethodnu inkluziju), a triplet s antidualom $V^\times$ analogno se definira.

E. Spektralni teorem

Definicija. Neka je $\Sigma(X)$ σ-algebra na X. Preslikavanja $\Sigma(X)\supseteq E \mapsto P_E\subset\mathcal{L}(\mathcal{H})$ nazivamo *projektivne mjere* (skraćeno PVM) ako zadovoljavaju:
(PM 1) $P_X = \mathbb{1}$
(PM 2) $P_E P_F = P_{E\cup F}$
(MP 3) za po parovima disjunktan niz $\{E\}_{n\in\mathbb{N}} \subset \Sigma(X)$:
$\sum_{j\in\mathcal{I}\subset\mathbb{N}} P_{E_j}(\psi) = P_{\bigcup_{j\in\mathcal{I}\subset\mathbb{N}} E_j}(\psi)$, $\psi\in\mathcal{H}$

Propozicija 17. Neka je dan PVM P te izmjerljiva funkcija f: $X \to \mathbb{C}$, tada je:

$$\Delta_f = \left\{ \psi\in\mathcal{H} \,\middle|\, \int_X |f(E)|^2 \mu^{(P)}_{\psi,\psi}(E) < \infty \right\} \tag{69}$$

gust podskup od $\mathcal{H}$, za $\mu^{(P)}_{\psi,\phi}(E) = \langle\psi, P_E\phi\rangle$. Dodatno, postoji jedinstven operator $\int_X f(E)\mathrm{d}P(E)$: $\Delta_f \to \mathcal{H}$ t.d.

$$\langle\psi, \big(\int_X f(E)\mathrm{d}P(E)\big)\phi\rangle = \int_X f(E)\mu^{(P)}_{\psi,\phi}(E) \tag{70}$$

Teorem 10. (Spektralni teorem)
Neka je A SA operator na $\mathcal{H}$, tada postoji jedinstven PVM $P^{(A)}$: $\Sigma(\mathcal{O}_\mathbb{R}) \to \mathcal{L}(\mathcal{H})$ t.d.

$$A = \int_{\sigma(A)} E \,\mathrm{d}P^{(A)}(E), \quad \mathcal{D}(A) = \Delta_{f(E)=E} \tag{71}$$

te se funkcije operatora mogu zadati preko:

$$g(A) = \int_{\sigma(A)} g(E) \,\mathrm{d}P^{(A)}(E) \tag{72}$$

[1] M. Porta, (2019.); *Mathematical Quantum Theory*; https://www.math.uni-tuebingen.de/de/forschung/maphy/lehre/ss-2019/quantumtheory/dateien/notes.pdf

[2] F. Schuller, (2016.); *Lectures on Quantum Theory*; http://mathswithphysics.blogspot.com/2016/07/lectures-on-geometric-anatomy-of.html

[3] K. Ranade, S. Fackler (2015.); *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*; https://www.uni-ulm.de/en/mawi/iaa/teaching/archive/ss15/mathqm15/

[4] D. Gitman, I. Tyutin, B. Voronov (2012.) *Self-adjoint Extensions in Quantum Mechanics*; Springer

[5] T. Jurić, (2021.); *Observables in Quantum Mechanics and the importance of self-adjointness*; u vrijeme pisanja još neobjavljeni rad; https://arxiv.org/abs/2103.01080

[6] F. Gieres, (2000.); *Mathematical surprises and Dirac's formalism in quantum mechanics*; Rep. Prog. Phys. 63 1893

[7] A. Cintio, A. Michelangeli, (2021.); *Self-adjointness in quantum mechanics: a pedagogical path*; Quantum Stud.: Math. Found. 8, 271–306

[8] P. Blanchard, E. Brüning (2015.); *Mathematical Methods in Physics (2nd edition)*; Springer

[9] M. Reed, B. Simon, (1980.); *Methods of Modern Mathematical Physics, volume I: Functional Analysis, revised and enlagred edition*; Academic Press

[10] M. Reed, B. Simon, (1975.); *Methods of Modern Mathematical Physics, volume II: Fourier Analysis, Self-Adjointness*; Academic Press

[11] N. Dunford, J Schwartz (1963.); *Linear operators, part II: Spectral theory*; Interscience Publishers

[12] S. Kurepa, (1981.); *Funkcionalna Analiza*; Školska knjiga Zagreb

[13] F. Strocchi, (2008.); *Mathematical Structure of Quantum Mechanics*; World Scientific

[14] V. Moretti, (2017); *Spectral Theory and Quantum Mechanics*; Springer

[15] K. Horvatić (1995.); *Linearna algebra, II. dio i III. dio*; Sveučilište u Zagrebu

[16] R. de la Madrid, (2002.); *Quantum Mechanics in Rigged Hilbert Space Language*; doktorska teza pri Departamento de Fisica Teorica Facultat de Ciencias, Universidad de Valladolid

[17] R. de la Madrid, (2005.); *The role of the rigged Hilbert space in quantum mechanics*; Eur. J. Phys. 26 287

[18] R. de la Madrid, (2002.); *The Rigged Hilbert Space of the Free Hamiltonian*; Int. J. Theor. Phys. 42