9. Својствени проблем оператора

У применама теорије оператора у апстрактним просторима, проблем решења формуле, **својствени проблем**

$$\hat{A}|v\rangle = \lambda|v\rangle$$

проблем је од суштинског значаја, јер с једне стране омогућава да се у квантну теорију укључе квантне особине изучаваног система (стационарна енергија, стални момент импулса и уопште сталне величине које генеришу квантне бројеве), а с друге омогућава одређивање најједноставнијег могућег облика матрице $\mathscr{A}$ којом се представља оператор $\hat{A}$.

9.1. Дијагонална форма матрице ермитских и унитарних оператора

Да би се својствени проблем могао појмовно уопште формулисати, неопходно је поћи од појма инваријантног потпростора, који ће бити помињан и касније, у **поглављу 12**.

Дефиниција 9.1. Потпростор $\mathbb{W}$ простора $\mathbb{U}$ у односу на деловање оператора $\hat{A} \in \mathbb{L}(\mathbb{U},\mathbb{U})$ је *инваријантан* ако $\forall|v\rangle \in \mathbb{W}$ важи да је $\hat{A}|v\rangle \in \mathbb{W}$. Тада се оператор $\hat{A}$ редукује у инваријантном потпростору $\mathbb{W}$ на новодефинисан, редукован оператор $\hat{A}_{\text{red}} \in \mathbb{L}(\mathbb{U},\mathbb{U})$, такав да је $\hat{A}_{\text{red}}|v\rangle = \hat{A}|v\rangle$, $\forall|v\rangle \in \mathbb{W}$, при чему је $\mathbb{D}(\hat{A}_{\text{red}}) = \mathbb{V}$.

Ако се унитарни простор $\mathbb{U}$ разложи на директну суму два потпростора $\mathbb{U}_1$ и $\mathbb{U}_2$, оба инваријантна под деловањем посматраног оператора $\hat{A} \in \mathbb{L}(\mathbb{U},\mathbb{U})$ (у случају да два таква потпростора уопште постоје), могуће је разделити базис $\mathbb{S}$ простора $\mathbb{U}$ на скупове $\mathbb{S}_1$ и $\mathbb{S}_2$: $\mathbb{S} = \mathbb{S}_1 \cup \mathbb{S}_2$, који припадају потпросторима $\mathbb{U}_1$ и $\mathbb{U}_2$, редом.[1]

[1] Овде је потребно нагласити да овакав базис увек постоји, премда није увек адаптиран.

Такав базис представља базис адаптиран на декомпозицију $\mathbb{U}=\mathbb{U}_1\dot{+}\,\mathbb{U}_2$ (у коначно-димензионалном случају је $\dim\mathbb{U}=\dim\mathbb{U}_1+\dim\mathbb{U}_2$, или $n=n_1+n_2$, где је ознаком $\dim$ означена димензија одговарајућег простора). Матрица оператора $\hat{A}$ у поменутом адаптираном базису биће *квази-дијагонална*

$$\mathscr{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,n_1} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,n_1} & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ a_{n_1,1} & a_{n_1,2} & \cdots & a_{n_1,n_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{pq} & a_{p,q+1} & a_{p,n_2} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{p+1,q} & a_{p+1,q+1} & a_{p+1,n_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{n_2,q} & a_{n_2,q+1} & a_{n_2,n_2} \end{bmatrix}.$$

На дијагонали поменуте матрице налазе се подматрице типа $n_1\times n_1$ и $n_2\times n_2$ у коначно-димензионалном случају, док је у бесконачно-димензионалном случају барем једна од подматрица бесконачно-димензионална. У оба случаја нуле се налазе на свим осталим местима, пошто су потпростори $\mathbb{U}_1$ и $\mathbb{U}_2$ инваријантни, те деловање оператора $\hat{A}$ на елементе тих потпростора не избацује ликове из њих.

Горњи поступак се лако уопштава на случај кад се простор $\mathbb{U}$ разлаже на директну суму више инваријантних потпростора (наравно ако је тако нешто уопште могуће; за детаље погледати **теорему 9.2**), те је замислив случај када су сви такви инваријантни потпростори једнодимензионални - тада би матрица $\mathscr{A}$ у адаптираном базису била *дијагонална*. А дијагонални облик матрице је најпростији могући облик матрице, и управо онај који је потребно добити.

Нека је сада $\mathbb{W}$ једнодимензионални потпростор простора $\mathbb{U}$, који је образован ненултим вектором $|v\rangle$: $\mathbb{W}=\mathbb{L}\big(|v\rangle\big)=\big\{\alpha|v\rangle:\alpha\in\ \big\}$. Потпростор $\mathbb{W}$ је инваријантан ако важи

$$\hat{A}\left(\alpha|v\rangle\right) \in \mathbb{W}\,, \quad \alpha \in \mathbb{F}$$

а за то је потребно и довољно да је важи $\hat{A}|v\rangle$ умножак од $|v\rangle$

$$\hat{A}|v\rangle = \lambda|v\rangle. \tag{9.1}$$

Дефиниција 9.2. Формула (9.1) представља *својствени проблем* оператора $\hat{A}$, скалар λ је *својствена вредност* оператора $\hat{A}$, ненулти вектор $|v\rangle$ је *својствени вектор* оператора $\hat{A}$.[2]

Нека је $\hat{A}$ линеарни оператор, λ његова својствена вредност и $\mathbb{U}_\lambda$ скуп свих својствених вектора који јој припадају, плус придодат нулти елемент $|0\rangle$. Ако је $|v_1\rangle, |v_2\rangle \in \mathbb{U}_\lambda$ онда је и $\alpha_1|v_1\rangle + \alpha_2|v_2\rangle \in \mathbb{U}_\lambda$, будући да је

$$\hat{A}\left(\alpha_1|v_1\rangle + \alpha_2|v_2\rangle\right) = \alpha_1\hat{A}|v_1\rangle + \alpha_2\hat{A}|v_2\rangle = \alpha_1\lambda|v_1\rangle + \alpha_2\lambda|v_2\rangle = \lambda\left(\alpha_1|v_1\rangle + \alpha_2|v_2\rangle\right),$$

што значи да $\mathbb{U}_\lambda$ јесте линеал, а у коначно-димензионалном случају је аутоматски и потпростор, док би у бесконачно-димензионалном случају оператор $\hat{A}$ морао да буде затворен (**дефиниција 7.6**).

Скуп $\mathbb{U}_\lambda$ је својствени потпростор својствене вредности λ. Број димензија својственог потпростора назива се *геометријски мултиплицитет* својствене вредности λ. Ако је геометријски мултиплицитет већи од 1, одговарајућа својствена вредност је дегенерисана, у противном је недегенерисана.

---

[2] Ова дефиниција важи и када је потпростор $\mathbb{W}$ дефинисан над више линеарно независних вектора, јер је лако замислити случај у коме се поједине од својствених вредности више пута понављају у наведеном дијагоналном облику матрице (видети дискусију која следи), само што је тада $\mathbb{W}$ вишедимензионалан својствени потпростор.

Теорема 9.1. У унитарном простору $\mathbb{U}$ над комплексним пољем $\mathbb{C}$ сваки оператор $\hat{A} \in \mathbb{L}(\mathbb{U}, \mathbb{U})$ има бар један својствени вектор, тј барем један једнодимензионални својствени потпростор.

Доказ.

Нека је $\{|v_i\rangle\}$ базис у простору $\mathbb{U}$, док је $\mathscr{A} = [a_{ij}]$ матрица којом је представљен линеарни оператор $\hat{A}$ у датом базису. Из Фуријеовог развоја (друга дефиниција базиса, после **дефиниције 2.5**) $|v\rangle = \sum_i \xi_i |\mathrm{e}_i\rangle$ следи да се својствени вектор налази решавањем израза

$$\mathscr{A}\,\xi = \lambda\,\xi\,, \tag{9.1a}$$

где је ξ матрица-колона чији су матрични елементи Фуријеови коефицијенти (координате) ξ_i, што се у координатном запису своди на решавање система једначина

$$\sum_i a_{ij}\,\xi_i = \lambda\,\xi_i\,, \quad (i = \overline{1,n})$$

или, експлицитно записано

$$\begin{aligned} (a_{11}-\lambda)\,\xi_1 + a_{12}\,\xi_2 + \ldots + a_{1n}\,\xi_n &= 0 \\ a_{21}\,\xi_1 + (a_{22}-\lambda)\,\xi_2 + \ldots + a_{2n}\,\xi_n &= 0 \\ \ldots \\ a_{n1}\,\xi_1 + a_{n2}\,\xi_2 + \ldots + (a_{nn}-\lambda)\,\xi_n &= 0 \end{aligned}\,. \tag{9.2}$$

У коначно-димензионалном случају, када је $\mathbb{U} \equiv \mathbb{U}^n(\mathbb{C})$, што ће се од сада подразумевати, систем (9.2) састоји се од n једначина (број димензија простора $\mathbb{U}$), док промењљивих има $n+1$ (јер је и λ непознато). Матрична формула (9.1a) може се записати у облику који највише одговара систему једначина (9.2)

$$(\mathscr{A} - \lambda\mathscr{I})\,\xi = 0 \tag{9.2a}$$

где је I јединична матрица.

Систем (9.2а) је хомоген систем линеарних једначина по непознатим ξ_1, ξ_2, …, ξ_n који има ненулта решења ако и само ако је његова детерминанта једнака нули

$$\det(\mathscr{A} - \lambda \mathscr{I}) = 0 \tag{9.3}$$

Формула (9.3) је алгебарска једначина $n-$тог степена по λ, позната као *својствена* (*карактеристична, секуларна*) *једначина* (*полином*) оператора $\hat{A}$. Основна теорема алгебре каже да свака алгебарска једначина има увек бар један корен у пољу комплексних бројева. Смењивањем тог корена λ' у систем (9.2) добијамо бар једно ненулто решење ξ_1', ξ_2', …, ξ_n'. Тада је вектор $|v'\rangle = \sum_i \xi_i' |e_i\rangle$ својствени вектор оператора $\hat{A}$ за својствену вредност λ': $\hat{A}|v'\rangle = \lambda'|v'\rangle$.

Q.E.D.

Королар. Ако се оператор $\hat{A}$ редукује на оператор $\hat{A}_{\text{red}}$ из неког инваријантног потпростора, онда и у том инваријантном потпростору важи **теорема 9.1**, те у сваком инваријантном потпростору оператора $\hat{A}$ у простору $\mathbb{U}(\mathbb{C})$ постоји барем један својствени вектор поменутог оператора.

Детерминанта која се јавља у својственој једначини (9.3) једнака је

$$\det(\mathscr{A} - \lambda \mathscr{I}) = (-\lambda)^n + p_1(-\lambda)^{n-1} + p_2(-\lambda)^{n-2} + \ldots + p_{n-1}(-\lambda)^1 + p_n$$

где је $p_1 = \operatorname{Tr} A$, $p_n = \det A$, док су остали коефицијенти p_i суме главних кофактора реда i матрице A.

Ако се сада преко несигуларне матрице $\mathscr{T}$ (репрезентација несингуларног оператора $\hat{T}$ у ортонормираном базису $\{|e_i\rangle\}$) пређе из базиса $\{|e_i\rangle\}$ у $\{|\bar{e}_i\rangle = \hat{T}|e_i\rangle\}$ (видети **поглавље 8** и **потпоглавље 13.1**), матрица $\mathscr{A}$ (репрезентација оператора $\hat{A}$ у базису $\{|e_i\rangle\}$) прелази трансформацијом сличности у матрицу $\bar{\mathscr{A}}$ (репрезентација оператора $\hat{A}$ у базису $\{|e_i\rangle\}$): $\bar{\mathscr{A}} = \mathscr{T}\mathscr{A}\mathscr{T}^{-1}$. Тада је

$$\det(\overline{\mathcal{A}} - \lambda\mathcal{I}) = \det(\mathcal{T}\mathcal{A}\mathcal{T}^{-1} - \lambda\mathcal{I}) = \det\left[\mathcal{T}(\mathcal{A} - \lambda\mathcal{I})\mathcal{T}^{-1}\right] = \det(\mathcal{A} - \lambda\mathcal{I}),$$

на основу познатих особина детерминанти (видети дискусију испод **теореме 8.1**).

Све горе изнето само значи да својствена једначина не зависи од избора базиса, те да ни њени корени нити коефицијенти не зависе од избора базиса; стога ни Tr нити $\det$ *не зависе од избора базиса*.

Ако λ као корен својствене једначине (9.3) има више решења, број тих решења представља *алгебарски мултиплицитет* својствене вредности.

Без доказа: геометријски мултиплицитет одређене својствене вредности увек је мањи или једнак њеном алгебарском мултиплицитету.

Нека оператор $\hat{A}$ има *својствени базис* $\{|v_i\rangle\}$ што значи да скуп својствених вектора образује простор, при чему поменути вектори образују једнодимензионалне својствене потпросторе $\mathbb{L}(|v_i\rangle)$, $i = \overline{1,n}$. Последица је да се простор $\mathbb{U} \equiv \mathbb{U}^n(\mathbb{C})$ може разложити на директну суму својствених једнодимензионалних потпростора

$$\mathbb{U} = \mathbb{L}(|v_1\rangle) \dotplus \mathbb{L}(|v_2\rangle) \dotplus \ldots + \quad (|v_n\rangle).$$

Лема 9.1. Ма која два оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ из $\mathbb{L}(\mathbb{U},\mathbb{U})$ који *комутирају* (чији је комутатор једнак нули) имају *заједничке својствене векторе*.

Доказ.

Нека је $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. На основу **теореме 9.1**, оператор $\hat{A}$ има барем један својствени вектор из својственог потпростора $\mathbb{U}_\lambda$ који одговара својственој вредности λ. Тада ће $\forall|v\rangle \in \mathbb{U}_\lambda$ бити

$$\hat{A}\left(\hat{B}|v\rangle\right) = \hat{A}\hat{B}|v\rangle = \hat{B}\hat{A}|v\rangle = \hat{B}\lambda|v\rangle = \lambda\left(\hat{B}|v\rangle\right),$$

што значи да је $\hat{B}|v\rangle \in \mathbb{U}_\lambda$, те је $\mathbb{U}_\lambda$ инваријантни потпростор и оператора $\hat{B}$. Према **королару теореме 9.1**, оператор $\hat{B}$ има у својственом потпростору $\mathbb{U}_\lambda$

оператора $\hat{A}$ барем један својствени вектор који је такође својствени вектор и оператора $\hat{A}$, будући да је део својственог потпростора $\mathbb{U}_\lambda$.

Q.E.D.

Такође важи и обрнуто, ако је $|v\rangle$ заједнички својствени вектор оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$, онда они комутирају, што је лако уочљиво.

Из дефиниције унитарног и ермитског оператора у КДУП видимо да за њих важи

$$\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{A}\hat{A}^\dagger, \tag{9.4}$$

пошто за унитарне операторе важи: $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{I}$, а за ермитске: $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{A}^2$.

Дефиниција 9.3. Оператори који поседују особину (9.4) називају се *нормални оператори*. Они чине подскуп скупа $\mathbb{L}(\mathbb{U},\mathbb{U})$ који је аналоган скупу комплексних бројева, баш као што су ермитски оператори аналогни реалним бројевима.

Сада се може доказати кључна теорема теорије КДУП-а, која заједно са теоремом која јој следи даје основу и за решавање својственог проблема оператора у Хилбертовом простору.

Теорема 9.2. За дати оператор $\hat{A}$ који делује у коначно-димензионалном унитарном простору $\mathbb{U}^n$ постоји *ортонормиран својствени базис* онда и само онда када је оператор $\hat{A}$ *нормалан оператор*: $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{A}\hat{A}^\dagger$.

Доказ.

Довољност услова.

Полази се од тога да оператори $\hat{A}$ и $\hat{A}^\dagger$ комутирају. Према **леми 9.1.** такви оператори имају заједнички својствени вектор: $\hat{A}|v_1\rangle = \lambda|v_1\rangle$ и $\hat{A}^\dagger|v_1\rangle = \mu|v_1\rangle$ (није проблем показати да је $\lambda = \mu$). При томе вектор $|v_1\rangle$ образује једнодимензионални својствени потпростор $\mathbb{L}(|v_1\rangle)$.

Сада треба уобличити ортокомплемент као ортогоналну разлику скупова $\mathbb{U}$ и $\mathbb{L}(|v_1\rangle)$: $\mathbb{L}^{\perp}(|v_1\rangle) = \mathbb{U} - \quad (|v_1\rangle)$. Поред тога, нека је $|\overline{v}\rangle \in \mathbb{L}^{\perp}(|v_1\rangle)$, што значи да је скаларни производ $\langle \overline{v} | v_1 \rangle = 0$. Следи

$$\left\langle \hat{A}\overline{v} \middle| v_1 \right\rangle = \left\langle \overline{v} \middle| \hat{A}^{\dagger} v_1 \right\rangle = \langle \overline{v} | \mu v_1 \rangle = \mu \langle \overline{v} | v_1 \rangle = 0,$$

те $\hat{A}|\overline{v}\rangle \in \mathbb{L}^{\perp}(|v_1\rangle)$, те $\mathbb{L}^{\perp}(|v_1\rangle)$ представља инваријантан потпростор оператора $\hat{A}$.

Слично се доказује да је потпростор $\mathbb{L}^{\perp}(|v_1\rangle)$ инваријантан на деловање оператора $\hat{A}^{\dagger}$.

Сад, редуковани оператори $\hat{A}_{\text{red}}$ и $\hat{A}^{\dagger}_{\text{red}}$ у $\mathbb{L}^{\perp}(|v_1\rangle)$, према **леми 9.1**, пошто комутирају, имају заједнички својствени вектор $|v_2\rangle \in \mathbb{L}^{\perp}(|v_1\rangle)$, те је очигледно да је $\mathbb{L}(|v_2\rangle) \perp \mathbb{I}\,(|v_1\rangle)$.

Сада треба уобличити ортокомплемент $\mathbb{L}(|v_2\rangle)$ од $\mathbb{L}^{\perp}(|v_1\rangle)$: $\mathbb{L}^{\perp}(|v_1\rangle) - \mathbb{I}\,(|v_2\rangle)$, па се тако настави са $\mathbb{L}(|v_3\rangle)$, итд. На овај начин добија се $n = \dim \mathbb{U}^n$ узајамно ортогоналних једнодимензионалних својствених потпростора $\mathbb{L}(|v_1\rangle)$, …, $\mathbb{L}(|v_n\rangle)$. Након нормирања, вектори $|v_1\rangle$, …, $|v_n\rangle$ дају својствени ортонормирани базис у коме је матрица оператора $\hat{A}$ *дијагонална*, са комплексним бројевима[3] на дијагонали који представљају својствене вредности оператора $\hat{A}$.

[3] У случају ермитских (ауто-адјунгованих) оператора на дијагонали ће се налазити *реални бројеви* (**лема 8.1**). Опет, за унитарне је операторе $\langle v|v\rangle = \left\langle \hat{U}v \middle| \hat{U}v \right\rangle = \langle \lambda v | \lambda v \rangle = \lambda^{*}\lambda \langle v|v\rangle = |\lambda|^2 \langle v|v\rangle$,

Потребност услова.

Нека сада оператор $\hat{A}$ има својствени базис у коме је, према претпоставци, представљен дијагоналном матрицом $\mathscr{A}$. Како је према **теореми 9.2.** базис ортонормиран, оператор $\hat{A}^\dagger$ биће у њему представљен адјунгованом матрицом $\mathscr{A}^\dagger$, која се будући дијагонална своди на $\mathscr{A}^*$, јер транспоновање не може променити дијагоналне матрице.

Дијагоналне матрице $\mathscr{A}$ и $\mathscr{A}^\dagger$ (којима су представљени оператори $\hat{A}$ и $\hat{A}^\dagger$) очигледно комутирају: $\mathscr{A}\mathscr{A}^\dagger = \mathscr{A}^\dagger\mathscr{A}$, а на основу разматрања изложеног након **теореме 8.1**, јасно је да поменуте матрице комутирају и у свим осталим ортонормираним базисима (наиме, трансформација сличности одржава комутирање); на основу тога се закључује да и сами оператори $\hat{A}$ и $\hat{A}^\dagger$ комутирају: $\hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{A}$.

Q.E.D.

те је $|\lambda|^2 = 1$, што значи да су својствене вредности комплексни бројеви јединичног модула, те се као такви налазе на дијагонали приликом дијагонализовања унитарног оператора.

У литератури се уместо синтагме »решавање својственог проблема« често користи израз »дијагонализација«, из очигледних разлога.

Теорема 9.3. Сваком нормалном оператору $\hat{A}$ у коначно-димензионалном унитарном простору $\mathbb{U}_\lambda$ једнозначно одговарају *својствене вредности* $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ и њима одговарајући *својствени пројектори* $\hat{P}_{\lambda_1}, \ldots, \hat{P}_{\lambda_k}$ (где је k цео број који није већи од димензије n простора $\mathbb{U}^n$), на такав начин да важи

1) Својствене вредности $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ све су *међусобно различите*;

2) Својствени пројектори $\hat{P}_{\lambda_1}, \ldots, \hat{P}_{\lambda_k}$ међусобно су *ортогонални*;

3) $\sum_{i=1}^{k} \hat{P}_{\lambda_i} = \hat{P}_{\lambda_1} + \ldots + \hat{P}_{\lambda_k} = \hat{I}$ - *својствена декомпозиција јединице*;

4) $\hat{A} = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i \hat{P}_{\lambda_i} = \lambda_1 \hat{P}_{\lambda_1} + \ldots + \lambda_k \hat{P}_{\lambda_k}$ - *спектрална форм*а оператора $\hat{A}$.[4]

Доказ.

Из доказа ове теореме неопходно је одбацити све векторе својственог ортонормираног базиса који припадају истим (*дегенерисаним*) својственим вредностима; потом се ортогонално сабирају потпростори који одговарају таквим векторима, чиме се добијају својствени потпростори $\mathbb{U}_{\lambda_i}$ који сада одговарају својственим вредностима које су све различите (*недегенерисане*).

Овим поступком добијене су различите својствене вредности $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$, $k \leq n$, (из тачке 1) и својствени потпростори $\mathbb{U}_{\lambda_1}, \ldots, \mathbb{U}_{\lambda_k}$ (у општем случају они могу бити вишедимензионални, услед могуће дегенерације својствених вредности), који су узајамно ортогонални, а њихова ортогонална сума једнака је целом простору $\mathbb{U}^n$

$$\mathbb{U}^n = \mathbb{U}_{\lambda_1} \oplus \ldots \oplus \quad_{\lambda_k}, \qquad (9.5)$$

[4] Термин *спектрална* потиче од назива *спектар оператора* (**дефиниција 9.4**).

што су особине пренете са потпростора $\mathbb{L}\left(\left|v_1\right\rangle\right)$, ..., $\mathbb{L}\left(\left|v_k\right\rangle\right)$ на ове новоформиране потпросторе.

Ако се сада дефинишу својствени пројектори $\hat{P}_{\lambda_1}$, ..., $\hat{P}_{\lambda_k}$ на својствене потпросторе $\mathbb{U}_{\lambda_1}$, ..., $\mathbb{U}_{\lambda_k}$, јасно је да су они међусобно ортогонални (тачка 2), јер су им пројекциони потпростори узајамно ортогонални (**лема 9.1**). Поменути пројектори се према формули (9.5) сабирају у јединични оператор

$$\sum_{i=1}^{k} \hat{P}_{\lambda_i} = \hat{P}_{\lambda_1} + \ldots + \hat{P}_{\lambda_k} = \hat{I} \tag{9.6}$$

што одговара тврђењу у тачки 3.

За произвољан вектор $\left|v\right\rangle \in \mathbb{U}^n$ биће, на основу формуле (9.6)

$$\left|v\right\rangle = \hat{I}\left|v\right\rangle = \sum_{i=1}^{k} \hat{P}_{\lambda_i}\left|v\right\rangle = \hat{P}_{\lambda_1}\left|v\right\rangle + \ldots + \hat{P}_{\lambda_k}\left|v\right\rangle$$

те је

$$\hat{A}\left|v\right\rangle = \sum_{i=1}^{k} \hat{A}\hat{P}_{\lambda_i}\left|v\right\rangle = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i \hat{P}_{\lambda_i}\left|v\right\rangle = \left(\sum_{i=1}^{k} \lambda_i \hat{P}_{\lambda_i}\right)\left|v\right\rangle$$

што је операторска формула из тачке 4

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i \hat{P}_{\lambda_i} = \lambda_1 \hat{P}_{\lambda_1} + \ldots + \lambda_k \hat{P}_{\lambda_k} .$$

Q.E.D.

Овиме је окончан поступак доказивања теорема које леже у основи решавања својственог проблема у коначно-димензионалном случају.

9.2. Кратко о својственом проблему оператора у Хилбертовом простору. Диракова делта-функција

До сада је био разматран својствени проблем у случају коначно-димензионалног простора. Сада ће бити дефинисани одређени појмови неопходни за прелазак на бесконачно-димензионални простор.

Дефиниција 9.4. Скуп својствених вредности оператора $\hat{A}$ у КДУП $\mathbb{U}^n(\mathbb{F})$ је *спектар оператора* $\sigma(\hat{A})$, док се комплемент спектра у комплексној равни зове *резолвентни скуп* $\rho(\hat{A})$.

Начин дефинисања спектра преко резолвенте је погодан за дефинисање спектра оператора у бесконачно-димензионалном случају: Резолвента оператора $\hat{A}$ јесте $\hat{R}_\alpha(\hat{A}) \overset{\text{def}}{=} (\hat{A} - \lambda\hat{I})^{-1}$ ако је резолвента дефинисана: $\alpha \in \rho(\hat{A})$; ако то није случај, онда је α део спектра оператора: $\alpha \in \sigma(\hat{A})$.

У КДУП-у је домен резолвенте, ако је она дефинисана, читав простор $\mathbb{U}^n(\mathbb{F})$. Међутим, у бесконачно-димензионалном случају, као што се могло видети у **поглављу 7**, не мора бити тако, те се дефиниција спектра мора проширити.

Дефиниција 9.5. У Хилбертовом простору $\mathbb{H}$, резолвентни скуп $\rho(\hat{A})$ оператора $\hat{A}$ чине сви комплексни бројеви α за које је $\hat{R}_\alpha(\hat{A})$ ограничен оператор са свуда густим доменом у $\mathbb{H}$. Спектар оператора $\hat{A}$ је тада такође скуп $\sigma(\hat{A}) \overset{\text{def}}{=} \mathbb{C} \backslash \rho(\hat{A})$.

Дакле, у коначно-димензионалном унитарном простору спектар оператора коначан је скуп, међутим у Хилбертовом простору он је бесконачан, те стога постоје четири врсте спектра: *дискретан* (пребројиво бесконачан)[5], *континуиран*

[5] Треба обратити пажњу на чињеницу да дискретан спектар у Хилбертовом простору може бити и коначан, те садржавати само неколико тачака, нпр. 1 и 0.

(непребројиво бесконачан), *мешовит* (оператори који поседују и дискретан и континуиран спектар, нпр. оператор енергије водониковог атома) и четврти случај када постоји $\hat{R}_\alpha(\hat{A})$, али такав да му домен није свуда густ у $\mathbb{H}$.

Прелазећи на конкретне примере, додатни елементи спектралне теорије оператора биће представљени на мање строг начин - задржавајући Диракову делта функцију, као што се у већини квантних механика и ради. За строжи, а довољно сажети третман овог проблема видети Дамјановић [3], а за нешто обимнији Рихтмејер [2].

Пример 9.5.1. У простору $\mathbb{L}_2[0,2\pi]$, својствени проблем диференцијалног оператора гласи

$$-i\hbar\frac{d}{d\varphi}[\phi(\varphi)] = \lambda\,\phi(\varphi) \tag{9.7}$$

Решења горњег израза су функције

$$\phi(\varphi) = C\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\lambda\varphi}$$

где је C интеграциона константа. Како је домен датог оператора састављен од периодичних функција са периодом 2π, функције $\phi(\varphi)$ припадају простору $\mathbb{L}_2[0,2\pi]$ само за својствене вредности $\lambda = 0, \pm1, \pm2, \ldots$, те је спектар диференцијалног оператора *дискретан* будући да има пребројиво бесконачно много елемената.

Пример 9.5.2. У простору $\mathbb{L}_2(-\infty,\infty)$, својствени проблем диференцијалног оператора гласи

$$-i\hbar\frac{d}{dx}[f_{\lambda'}(x)] = \lambda' f_{\lambda'}(x) \tag{9.8}$$

Својствена вредност λ' је реална пошто је дати оператор ауто-адјунгован. Поред тога, згодније је увести својствене вредности облика $\lambda = \lambda'/\hbar$, те су дата решења својственог проблема облика

$$f_\lambda(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{i\lambda x} . \tag{9.9}$$

Она не припадају простору $\mathbb{L}_2(-\infty,\infty)$ ни за једно λ, јер

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_\lambda^*(x)\, f_\lambda(x)\, dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-i\lambda x}\, \mathrm{e}^{i\lambda x}\, dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx$$

будући да последњи интеграл сасвим очигледно дивергира.

Непосредан закључак био би да дати оператор уопште нема својствених вредности. Међутим, могуће је, а из физичких разлога и потребно, посматрати функције $f_\lambda(x)$ као својствене функције диференцијалног оператора у неком општем смислу. Наиме, могуће је за одређену функцију $f(x) \in \mathbb{L}_2(-\infty,\infty)$ формално израчунати Фуријеове коефицијенте њеног развоја по функцијама $f_\lambda(x)$

$$\xi(\lambda) = \langle f_\lambda \,|\, f \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \mathrm{e}^{-i\lambda x} dx \tag{9.10}$$

као и, такође формалан развој функције $f(x)$ по »базису« $f_\lambda(x)$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\lambda)\, f_\lambda(x)\, d\lambda = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\lambda)\, \mathrm{e}^{-i\lambda x} d\lambda , \tag{9.11}$$

при чему је у развоју сума замењена интегралом због континуираности индекса λ, упоредити са формулом (4.3), рецимо.

Управо на овом месту у разматрања експлицитно улазе расподеле из **потпоглавља 4.3**, пошто изрази (9.10) и (9.11) имају смисла само ако интеграли који се у њима појављују конвергирају.

Дакле, формално је добијена, заменом формуле (9.11) у формулу (9.10)

$$\xi(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \mathrm{e}^{-i\lambda x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{-i\lambda x} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, f_\lambda^*(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \xi(\lambda')\, f_{\lambda'}(x)\, d\lambda' \right] f_\lambda^*(x)\, dx$$

што се даље може формално записати као

$$\xi(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}\xi(\lambda')\left[\int_{-\infty}^{\infty} f_\lambda^*(x)\; f_{\lambda'}(x)\,d\lambda'\right]dx\,. \tag{9.12}$$

Да би израз (9.12) био тачан, интеграл у загради мора бити једнак »функцији« $\delta(\lambda-\lambda')$, односно расподели коју она дефинише, а која има следеће особине

$$\delta(\lambda-\lambda')=\int_{-\infty}^{\infty} f_\lambda^*(x)\; f_{\lambda'}(x)\,dx=\begin{cases}0, & \lambda'\neq\lambda\\ \infty, & \lambda'=\lambda\end{cases}, \tag{9.13}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(\lambda-\lambda')\,d\lambda'=1. \tag{9.14}$$

Формула (9.14) уствари представља израз (9.12) примењен на случај трансформисања јединице, за који она мора такође да важи.

Дефиниција 9.6. Објекат дефинисан формулама (9.13) и (9.14) јесте чувена *Диракова делта-функција*, коју треба схватити као расподелу коју она носи. Она представља уопштење Кронекеровог делта за случај континуираног спектра.

Из горње дефиниције непосредно следи

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda')\,\delta(\lambda-\lambda')\,d\lambda' = f(\lambda)\,. \tag{9.15}$$

Управо одавде следи да је израз (9.12) под поменутим условима тачан.

Формула (9.13), поред тога што је дефинициони израз за Диракову делта функцију, представља и уопштење особина ортонормираности елемената дискретног базиса, и те особине преводи на елементе $f_\lambda(x)$, $\lambda\in(-\infty,\infty)$ континуираног базиса, који такође представљају расподеле. Овиме се постиже да ермитски диференцијални оператор поседује и својствени базис, што га чини погодним за коришћење у квантној механици.

Пример 9.5.3. Мултипликативни оператор $\hat{X}$ у простору $\mathbb{L}_2(-\infty,\infty)$ такође на први поглед нема својствених решења, јер из $\hat{X}\, f(x) = x\, f(x) = \lambda\, f(x)$ следи да је $(x-\lambda)\, f(x) = 0$, те је решење својственог проблема мултипликативног оператора скоро свуда нула[6], стога и није решење у стандардном смислу. Отуда тај оператор има само континуиран спектар и може се дијагонализовати тек уз помоћ Диракове делта-функције.

У општем случају, за било који оператор који има само континуиран спектар важи

$$\xi(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} f_\lambda^*(x)\; f_\lambda(x)\, dx$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\lambda)\; f_\lambda(x)\, d\lambda$$

те ће бити, смењивањем првог у други израз

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_\lambda^*(x)\; f_{\lambda'}(x)\, dx = \delta(\lambda-\lambda'), \tag{9.16}$$

што је *релација затворености*, еквивалентна одговарајућој ортонормализационој формули за елементе базиса у случају дискретног спектра. Строго говорећи, она тврди да је резултат укључивања њене леве стране у интеграл с одговарајућом пробном функцијом из $\mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ исти као и резултат укључивања њене десне стране у исти такав интеграл, са том истом пробном функцијом.

Овим поступком су сви ауто-адјунговани оператори у просторима $\mathbb{L}_2(a,b)$ претворени у операторе који имају својствени базис.

Као што је већ истицано, функција са особинама (9.13) и (9.14) строго говорећи, у смислу класичне математичке анализе, и не постоји, али како се формализмом који је педесетих година прошлог века објединио у једну целину Л. Шварц и

[6] Две функције су скоро свуда једнаке ако се разликују у највише пребројиво много тачака.

који се зове *теорија расподела* (видети **потпоглавље 4.3**) могу строго засновати сви резултати добијени оперисањем са делта-функцијом која је најтипичнији пример расподеле, физичари је и даље користе у свом раду. Знатно пре Шварца, Јохан фон Нојман је својом спектралном теоријом оператора покушао да избаци Диракову делта-функцију из квантне механике, али је у томе само делимично успео.

9.3. Историјско-логичка дигресија

Фундаментални проблем квантне механике јесте својствени проблем.

У матричној механици, једној од две уобичајене репрезентације квантне механике, он се записује као

$$\sum_i h_{ji} v_i = \lambda v_j \,, \quad (j = 1, 2, \ldots) \tag{9.17}$$

а у таласној механици, другој уобичајеној репрезентацији, као

$$\hat{H}\,\psi(q_1, \ldots, q_k) = \lambda\,\psi(q_1, \quad , q_k)\,, \tag{9.18}$$

где је Хамилтонијан дат као

$$\hat{H} = \hat{H}\left(q_1, \ldots, q_k, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_1}, . \quad , -i \quad \frac{\partial}{\partial q_k}\right).$$

Први покушаји повезивања поменута два поступка оставили су по страни Шредингеров доказ еквивалентности две теорије и пошли од следеће аналогије.

Индекс i може се третирати као променљива и довести у везу са k променљивих $q_1, \ldots, q_k$; ово значи да се позитиван цео број повезује са тачком у $k-$димензионалном конфигурационом простору $\mathbb{R}^k$. Стога сума $\sum\limits_i$ прелази у интеграл $\int \underset{\Omega}{\ldots} \int dq_1 \, .. \; dq_n = \int\limits_{\Omega} dV$ по области Ω по којој се врши интеграција у конфигурационом простору.

Матричном елементу h_{ji} који зависи од две променљиве истог типа као што је индекс i одговара функција $h(q_1,\ldots,q_k;q'_1,\ldots,q'_k)$ чије променљиве $q_1,\ldots,q_k$ као и $q'_1,\ldots,q'_k$ пролазе кроз целу област Ω, независно једна од друге.

У том случају, трансформација

$$v_i \to \sum_{i'} h_{ii'} v_{i'}$$

прелази у

$$\psi(q_1,\ldots,q_k) \to \int_\Omega h(q_1,\ldots,q_k;q'_1,\ldots,q'_k)\,\psi(q'_1,\ldots,q'_k)\,dq'_1\ldots dq'_k$$

тако да својствени проблем (9.17), који ће бити преписан као

$$\sum_{i'} h_{ii'} v_{i'} = \lambda v_i$$

постаје интегрална једначина

$$\int_\Omega h(q_1,\ldots,q_k;q'_1,\ldots,q'_k)\,\psi(q'_1,\ldots,q'_k)\,dq'_1\ldots dq'_k = \lambda\,\psi(q_1,\ldots,q_k)\,. \qquad (9.19)$$

Нажалост, израз (9.18) нема такав облик, а у њега се може превести само под претпоставком да је за диференцијални оператор

$$\hat{H} = \hat{H}\left(q_1,\ldots,q_k,-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_1},\ldots,-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_k}\right)$$

могуће наћи функцију $h(q_1,\ldots,q_k;q'_1,\ldots,q'_k)$ такву да важи

$$\hat{H}\,\psi(q_1,\ldots,q_k) = \int_\Omega h(q_1,\ldots,q_k;q'_1,\ldots,q'_k)\,\psi(q'_1,\ldots,q'_k)\,dq'_1\ldots dq'_k\,,$$

за све $\psi(q_1,\ldots,q_k)$. Таква функција, ако постоји, назива се *кернелом* (*језгром*) диференцијалног (функционалног) оператора $\hat{H}$, те он постаје »интегрални оператор«.

Међутим, такву трансформацију могуће је у општем случају извести само уз помоћ Диракове делта-функције која се јавља већ при покушају трансформисања најпростијег функционалног оператора - јединичног, видети фон Нојман [7].

Уводећи Хилбертов простор, фон Нојман је отклонио потребу за коришћењем делта-функције на овом месту (видети **Увод**). Ипак, да би је избацио из употребе код третмана континуираног спектра користио је спектралну анализу оператора у Хилбертовом простору, која се није показала тако ефикасном. Стога је делта-функција остала у употреби у том делу квантно-механичке теорије, што је већ виђено у претходном потпоглављу.