无界自伴算子与 Schrödinger 方程的求解

叶胥达

北京大学

2020 年 12 月 21 日

目录

Schrödinger 方程

Schrödinger 方程是量子力学中最基本的动力学方程, 它描述了波函数 $\psi(x,t)$ 随时间演化的方式:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -iH\psi$$

其中 i 为虚数单位, H 是哈密顿算子, 它的表达式为

$$H = -\frac{1}{2m}\Delta + V$$

其中 $m > 0$ 是粒子的质量, Δ 是坐标空间 $\mathbb{R}^d$ 上的拉普拉斯算子, $V(x)$ 是 $\mathbb{R}^d$ 上的势能函数.

Schrödinger 方程

- 哈密顿算子 H 是波函数空间上的一个线性算子, 其定义为

$$H\psi(x) = -\frac{1}{2m}\Delta\psi(x) + V(x)\psi(x)$$

- 在量子力学中, 波函数 $\psi(x)$ 被解释为粒子出现位置的概率幅. 具体地说, $|\psi(x)|^2$ 是粒子出现在 $x \in \mathbb{R}^d$ 附近的概率密度, 因此 $\psi(x)$ 应满足归一化条件

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$$

Schrödinger 方程

- 哈密顿算子有许多有趣的数学性质. 物理学家们宣称, 哈密顿算子是一个自伴算子, 是因为

$$(H\psi, \phi)_{L^2} = (\psi, H\phi)_{L^2}, \qquad \forall \psi, \phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$$

这里 $(\cdot, \cdot)_{L^2}$ 是指 $L^2(\mathbb{R}^d)$ 中的内积, 即

$$(\psi, \phi)_{L^2} = \int_{\mathbb{R}^d} \psi(x)\overline{\phi(x)}\mathrm{d}x$$

- 实际上, 量子力学中假设所有可观测的物理量 (坐标, 动量, 角动量, 自旋, 哈密顿量等) 都必须是自伴算子.

Schrödinger 方程

由于哈密顿算子 H 是自伴算子, 归一性条件能始终被满足:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\mathbb{R}^d}|\psi(x,t)|^2\mathrm{d}x \equiv 1, \qquad t \geqslant 0$$

实际上, 容易验证

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\mathbb{R}^d}|\psi(x,t)|^2\mathrm{d}x &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\psi,\psi)_{L^2(\Omega)}\\ &= \left(\frac{\partial\psi}{\partial t},\psi\right)_{L^2(\Omega)} + \left(\psi,\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)_{L^2(\Omega)}\\ &= (-iH\psi,\psi)_{L^2(\Omega)} + (\psi,-iH\psi)_{L^2(\Omega)}\\ &= 0\end{aligned}$$

Schrödinger 方程

物理学家们把 Schrödinger 方程的解形式地表示为

$$\psi(x,t) = e^{-iHt}\psi_0(x)$$

在特殊的情况下, 可以直接计算出 H 的全部特征值和特征向量 (一维无限深势阱, 一维谐振子), 从而显式表达出 Schrödinger 方程的解.

Schrödinger 方程

- 在量子力学中, 波函数 $\psi(x)$ 的空间是 Hilbert 空间 $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, 算子的自伴性也在此空间下讨论.
- 我们将要讨论的哈密顿算子

$$H = -\frac{1}{2m}\Delta + V$$

  包含 $-\Delta$ 的部分, 因此其性质和研究方式和椭圆算子较为类似.
- 不过, 哈密顿算子与一般的椭圆算子有显著的不同之处:
  1. 哈密顿算子作用于 $\mathbb{R}^d$ 上的复值函数, 而椭圆算子主要考虑有界开区域 Ω 上的实值函数.
  2. 哈密顿的定义域主要由势能函数 $V(x)$ 决定.

Schrödinger 方程

- 物理学家有好的科学直觉, 但他们的数学理论是不可靠的. 他们感兴趣的几乎所有可观测量算子, 包括哈密顿算子, 都是无界的, 因此为它们建立严格的数学理论非常必要.

- 为了给 Schrödinger 方程建立严格的解表示, 报告将包含如下内容:
  1. 无界线性算子的自伴性理论;
  2. 哈密顿算子和其它量子力学观测量算子的自伴性;
  3. 利用单参数算子群表示 Schrödinger 方程的解.

闭算子和伴随算子

设 $\mathcal{H}$ 是一个 Hilbert 空间, 称 A 是 $\mathcal{H}$ 上的无界算子, 如果 A 是从 $\mathcal{H}$ 的一个子集 $D(A)$ 到 $\mathcal{H}$ 的线性映射.

定义 (闭算子, closed operator)

$\mathcal{H}$ 上的无界算子 A 称为**闭的**, 如果 A 在 $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ 中的图像

$$\{(\psi, A\psi) : \psi \in D(A)\}$$

是闭集.

当 A 是闭算子时, 只要 $D(A)$ 中的序列 $\{\psi_n\}_{n\geqslant 1}$ 和 $\mathcal{H}$ 中的元素 ψ, ϕ 满足

$$\lim_{n\to\infty} \psi_n = \psi, \qquad \lim_{n\to\infty} A\psi_n = \phi$$

就有 $\psi \in D(A)$ 且 $A\psi = \phi$.

闭算子和伴随算子

- 在大部分情况下, 我们感兴趣的无界算子都在 $\mathcal{H}$ 的一个稠密集上有定义, 即 $D(A)$ 是 $\mathcal{H}$ 的稠密集. 这样的算子称为**稠定算子**. 下面的讨论均假设 A 为稠定算子.

- 当 A 是一个无界算子时, 对任意 $\phi \in \mathcal{H}$,

$$\psi \mapsto \langle \phi, A\psi \rangle, \qquad \psi \in D(A)$$

是 $D(A)$ 上的一个线性泛函. 如果这个线性泛函是有界的, 则根据 $D(A)$ 的稠密性, 它可以连续地延拓到 $\mathcal{H}$ 上. 由 Riesz 表示定理, 存在唯一的 $\chi \in \mathcal{H}$ 使得

$$\langle \phi, A\psi \rangle = \langle \chi, \psi \rangle, \qquad \psi \in D(A)$$

闭算子和伴随算子

于是, 无界算子的伴随算子可定义如下:

定义 (伴随算子, adjoint operator)

设 $A : D(A) \subset \mathcal{H} \mapsto \mathcal{H}$ 是一个稠定算子. 令 $D(A^*)$ 是 $\mathcal{H}$ 的一个子空间, 它包含所有的 $\phi \in \mathcal{H}$ 使得

$$\psi \mapsto \langle \phi, A\psi \rangle, \qquad \psi \in D(A)$$

是一个有界线性泛函. 对 $\phi \in D(A^*)$, $A^*\phi \in \mathcal{H}$ 是使得

$$\langle \phi, A\psi \rangle = \langle A^*\phi, \psi \rangle, \qquad \psi \in D(A)$$

成立的唯一元素. $A^* : D(A^*) \mapsto \mathcal{H}$ 称为 A 的**伴随算子**.

闭算子和伴随算子

稠定算子的伴随不一定稠定, 但它一定是闭算子.

定理 (伴随算子是闭算子)

设 $A : D(A) \subset \mathcal{H} \mapsto \mathcal{H}$ 是一个稠定算子, 则 A^* 是闭算子.

证明 设 $\phi_n \in D(A^*)$, $\psi_n = A^*\phi_n \in \mathcal{H}$ 满足 $\phi_n \to \phi$, $\psi_n \to \psi$. 下面希望证明: $\phi \in D(A^*)$ 且 $\psi = A^*\phi$. 为此, 考察线性泛函 $T : D(A) \mapsto \mathbb{R}$:

$$Tu = \langle \phi, Au \rangle, \qquad u \in D(A)$$

则 T 满足

$$Tu = \langle \phi - \phi_n, Au \rangle + \langle \psi_n, u \rangle \qquad u \in D(A)$$

令 $n \to \infty$, 得到 $Tu = \langle \psi, u \rangle$, 故 T 有界, $\phi \in D(A^*)$, 且 $\psi = A^*\phi$.

闭算子和伴随算子

定义 (算子的自伴性, self-adjoint)

$\mathcal{H}$ 上的无界算子 A 称为**自伴的**, 如果

$$D(A) = D(A^*)$$

且对所有的 $\phi \in D(A)$, 有 $A^*\phi = A\phi$.

自伴算子一定是闭算子. 此定义虽然简洁, 但应用并不方便, 因为 $D(A^*)$ 难以求出.

闭算子和伴随算子

定义 (算子的对称性, symmetry)

一个 $\mathcal{H}$ 上的无界算子 A 是**对称**的, 如果

$$\langle \phi, A\psi \rangle = \langle A\phi, \psi \rangle$$

对所有 $\phi, \psi \in D(A)$ 成立.

自伴算子一定是对称算子.

闭算子和伴随算子

称 $\mathcal{H}$ 上的无界算子 A 是无界算子 B 的**延拓**, 如果 $D(A) \supset D(B)$, 且在 $D(B)$ 上有 $A = B$.

定理 (对称算子的伴随)

$\mathcal{H}$ 上的无界算子 A 是对称的当且仅当 A^* 是 A 的延拓.

如果 A 是对称算子, 则对 $\phi \in D(A)$, Cauchy-Schwarz 不等式给出

$$|\langle \phi, A\psi \rangle| \leqslant \|A\phi\|\|\psi\|$$

因此线性泛函 $\langle \phi, A\cdot \rangle$ 是有界的, $\phi \in D(A^*)$. 由 A 的对称性可知 $\langle \phi, A\psi \rangle = \langle A\phi, \psi \rangle$, $\forall \psi \in D(A)$, 因此 A^* 在 $D(A)$ 上的作用与 A 相同.

自伴算子的判定准则

为了给出自伴算子的判定准则, 我们首先证明一些对称算子的性质.

定理 (对称算子的性质)

对 $\mathcal{H}$ 上的对称算子 A, 有如下结论成立:

1. $\|(A \pm iI)\psi\|^2 = \|A\psi\|^2 + \|\psi\|^2, \forall \psi \in D(A)$;
2. $\ker(A \pm iI) = \{0\}$;
3. $\ker(A^* \mp iI) = R(A \pm iI)^{\perp}$;
4. 若 A 还是闭算子, 则值域 $R(A \pm iI)$ 是闭集.

自伴算子的判定准则

证明 当 A 是对称算子时,

$$\begin{aligned}\|(A+iI)\psi\|^2 &= \|A\psi\|^2+\|\psi\|^2+\langle A\psi, i\psi\rangle+\langle i\psi, A\psi\rangle \\ &= \|A\psi\|^2+\|\psi\|^2\end{aligned}$$

同理 $\|(A-iI)\psi\|^2=\|A\psi\|^2+\|\psi\|^2$. 从上述等式可以看出, $A+iI$ 和 $A-iI$ 在 $D(A)$ 上均为单射, 即 $\ker(A\pm iI)=\{0\}$.

自伴算子的判定准则

任取 $\psi \in \ker(A^* - iI)$, 则 $\psi \in D(A^*)$, 且

$$\langle (A + iI)\phi, \psi\rangle = \langle \phi, (A^* - iI)\psi\rangle = 0, \qquad \forall \phi \in D(A)$$

因此 $\psi \in R(A + iI)^\perp$. 反过来, 任取 $\psi \in R(A + iI)^\perp$, 则

$$\langle \phi, (A^* - iI)\psi\rangle = \langle (A + iI)\phi, \psi\rangle = 0, \qquad \forall \phi \in D(A)$$

由于 $D(A)$ 在 $\mathcal{H}$ 中稠密, 故 $(A^* - iI)\psi = 0$, 即 $\psi \in \ker(A^* - iI)$. 综上,

$$\ker(A^* - iI) = R(A + iI)^\perp$$

同理有

$$\ker(A^* + iI) = R(A - iI)^\perp$$

自伴算子的判定准则

当 A 是闭算子时, 来证明 $R(A+iI)$ 是闭集. 设 $\psi_n \in R(A+iI)$ 且 $\psi_n \to \psi \in \mathcal{H}$, 则存在 $\phi_n \in D(A)$ 使得

$$\psi_n = (A+iI)\phi_n, \qquad \forall n \geqslant 1$$

由于 ψ_n 在 $\mathcal{H}$ 中为 Cauchy 列, 故

$$\|\phi_n - \phi_m\| \leqslant \|(A+iI)(\phi_n - \phi_m)\| = \|\psi_n - \psi_m\| \to 0$$

因此 $\phi_n \to \phi \in \mathcal{H}$. 由于 A 是闭算子, 故 $\phi \in D(A)$ 且

$$\psi = (A+iI)\phi \in R(A+iI)$$

因此 $R(A+iI)$ 是闭集. 同理 $R(A-iI)$ 是闭集.

自伴算子的判定准则

定理 (自伴算子的判定准则)

设 A 是 $\mathcal{H}$ 上的对称算子, 则 A 自伴当且仅当 $R(A+iI)=R(A-iI)=\mathcal{H}$.

证明 若 A 是自伴算子, 则 A 是对称算子且 $A^*=A$, 从而有

$$R(A+iI)^{\perp}=\ker(A^*-iI)=\ker(A-iI)=\{0\}$$

这意味着 $R(A+iI)$ 在 $\mathcal{H}$ 中稠密. 由于 $R(A+iI)$ 是闭集, 故 $R(A+iI)=\mathcal{H}$. 同理 $R(A-iI)=\mathcal{H}$.

自伴算子的判定准则

另一方面, 假设 $R(A+iI)=R(A-iI)=\mathcal{H}$, 则

$$\ker(A^*-iI)=R(A+iI)^{\perp}=\{0\}$$

由于 A 是对称的, 要证明 A 自伴, 仅需证明 $D(A^*)\subset D(A)$. 设 $y\in D(A^*)$, 则由 $R(A-iI)=\mathcal{H}$ 可知, 存在 $z\in D(A)$ 使得

$$(A^*-iI)y=(A-iI)z\Longrightarrow(A^*-iI)(y-z)=0$$

由于 A^*-iI 在 $D(A^*)$ 上为单射, 故 $y=z\in D(A)$.

自伴算子的判定准则

最后, 我们对自伴算子的性质做一总结.

$$\left.\begin{array}{r}\text{闭算子}\\ \sigma(A)\subset\mathbb{R}\end{array}\right\}\Longleftarrow \text{自伴算子}(A=A^*)\Longleftrightarrow\left\{\begin{array}{l}\text{对称算子}\\ R(A\pm iI)=\mathcal{H}\end{array}\right.$$

使用 $R(A\pm iI)=\mathcal{H}$ 判定自伴算子的好处是不需要显式计算 $D(A^*)$.

简单观测量：坐标，动量，动能

在量子力学中，波函数所在的空间是 Hilbert 空间 $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$，而所有的物理观测量都是 $\mathcal{H}$ 上的线性算子. 物理学家们感兴趣的观测量包括:

- 坐标算子: $(x\psi)(x) = x\psi(x)$, $x \in \mathbb{R}$
- 动量算子: $(p\psi)(x) = -i\frac{\partial\psi}{\partial x}$, $x \in \mathbb{R}$
- 动能算子: $(H_0\psi)(x) = -\frac{1}{2m}\Delta\psi(x)$, $x \in \mathbb{R}^d$
- 哈密顿算子: $(H\psi)(x) = -\frac{1}{2m}\Delta\psi(x) + V(x)\psi(x)$, $x \in \mathbb{R}^d$

我们下面的任务是，在合适的定义域上，验证这些算子都是自伴的.

简单观测量：坐标，动量，动能

定理 (坐标算子的自伴性)

令 $D = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) : x\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})\}$，则坐标算子 $x : D \mapsto L^2(\mathbb{R})$ 自伴.

证明 容易验证 x 是对称算子：对任何 $\phi, \psi \in D$，有

$$(\phi, x\psi)_{L^2} = (x\phi, \psi)_{L^2} = \int_{\mathbb{R}} x\phi(x)\overline{\psi(x)}\mathrm{d}x$$

为了证明 x 是自伴算子，只需证明：对任何 $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$，方程

$$(x \pm i)\psi(x) = f(x)$$

在 D 中有解.

简单观测量：坐标，动量，动能

- 对方程 $(x+i)\psi(x)=f(x)$，它的解是

$$\psi(x)=\frac{f(x)}{x+i}$$

故 $|x\psi(x)|\leqslant|f(x)|$. 由于 $f\in L^2(\mathbb{R})$，有 $x\psi(x)\in L^2(\mathbb{R})$，从而 $\psi\in D$.

- 类似地可以证明 $(x-i)\psi(x)=f(x)$ 在 D 中有解.

简单观测量：坐标，动量，动能

定理 (动量算子的自伴性)

动量算子 $p: H^1(\mathbb{R}) \mapsto L^2(\mathbb{R})$ 自伴.

证明 要证明 p 是对称算子，只需证：对任何 $\phi, \psi \in H^1(\mathbb{R})$,

$$\left(\phi, \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_{L^2(\mathbb{R})} = -\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}, \psi\right)_{L^2(\mathbb{R})}$$

在 Sobolev 空间 $H^1(\mathbb{R})$ 中取紧支光滑函数 $\psi_n \to \psi, \phi_n \to \phi$, 则

$$\left(\phi_n, \frac{\partial \psi_n}{\partial x}\right)_{L^2(\mathbb{R})} = -\left(\frac{\partial \phi_n}{\partial x}, \psi_n\right)_{L^2(\mathbb{R})}$$

令 $n \to \infty$ 即可得证.

简单观测量：坐标，动量，动能

下面证明：对任何 $f \in L^2(\mathbb{R})$，方程

$$\left(-i\frac{\partial}{\partial x} + i\right)\psi(x) = f(x)$$

在 $H^1(\mathbb{R})$ 中有解．利用 $L^2(\Omega)$ 上的 Fourier 变换，上式等价于

$$(k+i)\hat{\psi}(k) = \hat{f}(k)$$

对其取模长后，得到 $(k^2+1)^{\frac{1}{2}}|\hat{\psi}(k)| = |\hat{f}(k)|$，因此

$$\int_{\mathbb{R}}(k^2+1)|\hat{\psi}(k)|^2\mathrm{d}k = \int_{\mathbb{R}}|\hat{f}(k)|^2\mathrm{d}k = \int_{\mathbb{R}}|f(x)|^2\mathrm{d}x < +\infty$$

即 $\psi \in H^1(\mathbb{R})$．

简单观测量：坐标，动量，动能

定理 (动量算子的自伴性)

动能算子 $H_0 : H^2(\mathbb{R}) \mapsto L^2(\mathbb{R})$ 自伴.

证明 要证明对称性，只需证对 $\psi, \phi \in H^2(\mathbb{R}^d)$,

$$(\phi, \Delta\psi)_{L^2(\mathbb{R}^d)} = (\Delta\phi, \psi)_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

上述结果可以类似地利用紧支光滑函数在 $H^2(\mathbb{R}^d)$ 中的逼近进行证明.

简单观测量：坐标，动量，动能

下面证明：对任何 $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$，方程

$$\left(-\frac{1}{2m}\Delta + i\right)\psi(x) = f(x)$$

在 $H^2(\mathbb{R}^d)$ 中有解. 利用 Fourier 变换，上式等价于

$$\left(\frac{1}{2m}|k|^2 + i\right)\hat{\psi}(k) = \hat{f}(k)$$

利用

$$\int_{\mathbb{R}^d}\left(\frac{1}{4m^2}|k|^4 + 1\right)|\hat{\psi}(k)|^2 \mathrm{d}k < +\infty$$

可以得到 $\psi \in H^2(\mathbb{R}^d)$.

哈密顿算子的自伴性

对哈密顿算子

$$H = -\frac{1}{2m}\Delta + V$$

的讨论会更加复杂, 因为 H 的性质直接依赖于势能函数 $V(x)$ 的选择. 对于一些简单的情况, 例如 $V(x)$ 有界时, 容易得到 H 自伴的结果.

定理 (哈密顿算子自伴)

设势能函数 $V(x)$ 为实值函数且有界, 则 $H = -\frac{1}{2m}\Delta + V$ 作为定义在 $H^2(\mathbb{R}^d)$ 上的算子是自伴的.

哈密顿算子的自伴性

证明

- V 作为 $L^2(\mathbb{R}^d)$ 上的一个势能算子

$$(V\psi)(x) = V(x)\psi(x), \qquad \psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$$

  是有界的, 且 $\|V\|$ 不超过 $|V(x)|$ 的本性上界.

- 取定 $\lambda > \|V\|$, 只需证明: 对任何 $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$,

$$(H + i\lambda)\psi(x) = f(x)$$

  在 $H^2(\mathbb{R}^d)$ 中有解.

哈密顿算子的自伴性

- 由于 H_0 是自伴算子, 故 $(H_0 + i\lambda)^{-1} : L^2(\mathbb{R}^d) \mapsto H^2(\mathbb{R}^d)$ 是有界线性算子. 关于 ψ 的方程可改写为

$$\psi + K(\lambda)\psi = g$$

其中 $K(\lambda) = (H_0 + i\lambda)^{-1} V$, $g = (H_0 + i\lambda)^{-1} f \in H^2(\mathbb{R}^d)$.

- 由于 $\|K(\lambda)\| \leqslant \frac{1}{\lambda}\|V\| < 1$, 故 $I + K(\lambda)$ 可逆, 且

$$\begin{aligned}\psi &= (I + K(\lambda))^{-1} g \\ &= (I + K(\lambda))^{-1}(H_0 + i\lambda)^{-1} f\end{aligned}$$

最后我们来验证上式给出的 ψ 位于 $H^2(\mathbb{R}^d)$ 中.

哈密顿算子的自伴性

定义算子 $K(\lambda)^{\mathrm{T}} := V(H_0 + i\lambda)^{-1}$, 则可以验证

$$(H_0 + i\lambda)(I + K(\lambda)) = (I + K(\lambda)^{\mathrm{T}})(H_0 + i\lambda)$$

因此

$$\psi = (H_0 + i\lambda)^{-1}(1 + K(\lambda)^{\mathrm{T}})^{-1} f \in H^2(\mathbb{R}^d)$$

综上, $(H \pm i\lambda)\psi(x) = f(x)$ 在 $H^2(\mathbb{R}^d)$ 中有解, H 为自伴算子.

哈密顿算子的自伴性

对于某些无界的势能函数, 可用类似的方法证明哈密顿算子 H 的自伴性.

定理 (哈密顿算子自伴)

设实值势能函数 V 满足

$$\|V\psi\| \leqslant a\|H_0\psi\| + b\|\psi\|, \qquad \forall \psi \in H^2(\mathbb{R}^d)$$

对常数 $a \in (0,1)$ 和 $b > 0$ 成立, 则哈密顿算子 H 在 $H^2(\mathbb{R}^d)$ 上自伴.

可以验证, 库伦势 $V(x) = -\alpha/|x|$ 是满足上述不等式的函数.

哈密顿算子的自伴性

定理 (哈密顿算子自伴)

设 $V(x)$ 在 $\mathbb{R}^3$ 上连续, $V(x) \geqslant 0$, $\lim\limits_{x\to\infty} V(x) = +\infty$. 则哈密顿算子 H 在其定义域上自伴.

该定理的条件涵盖了许多重要的势能函数, 例如二次函数 $V(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2$. 但是该定理的证明较为复杂, 这里不再具体给出.

Schrödinger 方程的解表示

利用哈密顿算子 H 的自伴性，可以证明物理学家们提出的传播子

$$U(t) := e^{-itH}$$

是 $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ 一族有界线性算子，从而可以将 Schrödinger 方程

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -iH\psi$$

的解表示为

$$\psi(x, t) = U(t)\psi_0(x)$$

Schrödinger 方程的解表示

定理 (Schrödinger 方程的解表示)

设 H 是一个无界自伴算子, 则存在一族唯一的有界算子 $U(t) := e^{-iHt}$, 它使得对任意 $t, s \in \mathbb{R}$, 都有以下性质成立:

$$i\frac{\partial U}{\partial t} = HU(t) = U(t)H$$

$$U(0) = I, \quad U(t)U(s) = U(t+s), \quad \|U(t)\psi\| = \|\psi\|$$

并且 Schrödinger 方程的解可以唯一表示为

$$\psi(x, t) = U(t)\psi_0(x)$$

Schrödinger 方程的解表示

证明的梗概 证明的关键是如何对于无界算子 A 定义

$$e^{iA}$$

并且验证它是 $\mathcal{H}$ 上的有界线性算子. 由于 A 是自伴算子, 故对任何非零实数 λ, $(A+i\lambda)^{-1}$ 和 $(A-i\lambda)^{-1}$ 是 $\mathcal{H}$ 上的有界线性算子. 定义

$$A_\lambda := \frac{1}{2}\lambda^2[(A+i\lambda)^{-1}+(A-i\lambda)^{-1}]$$

则 A_λ 是 $\mathcal{H}$ 上的有界线性算子, 且

$$\lim_{\lambda\to\infty} A_\lambda\psi = A\psi, \qquad \forall\psi\in D(A)$$

Schrödinger 方程的解表示

由于 A_λ 是 $\mathcal{H}$ 上的有界线性算子, 故算子 e^{iA_λ} 可以按照幂级数的方式定义. 可以证明, $\{e^{iA_\lambda t}, \lambda > 0\}$ 是 Cauchy 序列, 即

$$\lim_{\lambda,\lambda'\to\infty} \|(e^{iA_\lambda} - e^{iA_{\lambda'}})\psi\| = 0, \qquad \forall\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$$

因此可以定义

$$e^{iA}\psi := \lim_{\lambda\to\infty} e^{iA_\lambda}\psi$$

由于 $\|e^{iA}\psi\| \leqslant \|\psi\|$, 故 e^{iA} 在 $D(A)$ 上是有界线性算子, 故 e^{iA} 可以对任何无界自伴线性算子 A 定义.

总结

为量子力学建立一套严格的数学理论是一项重要而艰巨的任务. 我们在本节仅仅简单介绍了无界算子的自伴性理论, 其它重要的问题还包括:

1. Dirac 符号系统的严格定义;
2. 无界自伴算子的谱理论;
3. Feymann 路径积分的数学表述;
4. ...

参考文献

Brian C. Hall.
Quantum theory for mathematicians.
Springer, 2013.

Stephen J. Gustafson and Israel Michael Sigal.
Mathematical concepts of quantum mechanics, volume 4.
Springer, 2003.

张恭庆, 林源渠, and 郭懋正.
泛函分析讲义.
北京大学出版社, 1990.

Robert A Adams and John JF Fournier.
Sobolev spaces.
Elsevier, 2003.