Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Gyúró Noémi

Határozatlansági relációk

BSc szakdolgozat
Alkalmazott matematika szakirány

Témavezető:

Dr. Kovács Sándor, adjunktus
Numerikus Analízis Tanszék

Budapest, 2020.

Bevezetés

Határozatlansági relációkkal az (alkalmazott) matematika több területén is találkozhatunk. A modern fizikában a dinamikai változók (fizikai mennyiségek) elmosódottságát (szórását) a fizikai rendszernek valamely hullámfüggvénnyel leírt állapotában a dinamikai változókhoz rendelt önadjungált operátorok négyzetes közepes eltéréseivel definiálják. A határozatlansági elv azt állítja, hogy két fizikai mennyiség operátorai közepes eltérésének szorzata alulról becsülhető a két operátor kommutátorából képzett várható érték abszolút értékének felével. Következésképpen két, egymással nem felcserélhető operátorral reprezentált fizikai mennyiség mérése egyidejűleg nem végezhető el tetszőleges pontossággal. A harmonikus analízisben a határozatlansági elv szerint pedig a négyzetesen integrálható függvények és Fourier- vagy Gábor-transzformáltjuk nem lokalizálhatók egyszerre élesen (pl. tartójuk nem lehet egyszerre „kicsi"). A határozatlansági elvnek a klasszikus fizikában is megtalálható a megfelelője. Ha pl. valamely függvény értéke egy jel (pl. hang- vagy fényhullám) amplitúdóját reprezentálja egy adott időpillanatban, akkor a függvény Fourier-transzformáltja arról ad információt, hogy miként épül fel a függvény grafikonja különböző frekvenciájú szinuszos hullámokból, a határozatlansági elv pedig korlátot ad arra, hogy milyen mértékben lehet egy jel egyszerre időkorlátozott és sávkorlátozott. Az önéletrajzi írások tanúsága szerint ez a gondolat már Norbert Wienernek, a kibernetika megalkotójának egyik 1925-ben megtartott göttingai előadásán is elhangzott. Két évvel később látott napvilágot Werner Heisenberg úttörő cikke, amelynek absztrakt változatát először Howard P. Robertson, majd ennek élesített formáját később (1930-ban) Erwin Schrödinger publikálta: a két operátor kommutátorából képzett várható érték felének a négyzetét a két operátor kovariancia-mátrixának determinánsával becsülte felül. A fizika tankönyvek túlnyomó többsége azonban ezt vagy nem említette vagy pedig „elfelejtette idézni" a valódi szerzőt. Ennek az eredménynek a háttérbe szorulása részben magyarázható azzal, hogy ez az eredmény nem egy széles körben ismert folyóiratban, hanem a Porosz Tudományos Akadémia fizika-matemaika szekciójának egy kiadványában lett publikálva. Másrészt pedig azzal, hogy a korabeli tudományos közéletben lefolytatott viták inkább a határozatlansági reláció fizikai interpretációjáról szóltak, mintsem annak matematikai tartalmáról.

A dolgozat első fejezetének első részében összefoglaljuk a funkcionálanalízis azon alapvető fogalmait, amelyekre a későbbiekben hivatkozás történik. A második rész pedig a gyorsan lecsengő függvények terének, az ún. Schwartz-térnek azon tulajdonságairól szól, amelyeket a továbbiakban felhasználunk. A második fejezetben először levezetjük a Schwartz-téren értelmezett függvényekre a Heisenberg-Pauli-Weyl-egyenlőtlenséget, majd a kvantummechanikai abszorpciós és emissziós operátorokat felhasználva alternatív bizonyítást adunk erre az egyenlőtlenségre. Ezután bemutatunk két valószínűségelméletbeli határozatlansági relációt, amelyek közül az egyik a később levezetendő Robertson-féle reláció egy élesítése, a másik pedig a Schrödinger-féle reláció kommutáló mennyiségekre vonatkozó speciális esete. Végül az absztrakt határozatlansági relációk tárgyalására térünk rá. Megmutatjuk a Robertson-féle határozatlansági relációnak egy szokásostól eltérő levezetését, amely a Cauchy-Bunyakovszkij-egyenlőtlenség bizonyításából veszi az ötletet, de arra közvetlenül nem hivatkozik. A Schrödinger-féle határozatlansági reláció levezetése után rátérünk dolgozatunk fő eredményére: a kovariancia-mátrix determinánsának és a Robertson-féle tagnak négyzetösszegére bizonyítunk egy felső becslést, aminek eredményeként egy, a helyzet-, ill. a momentum-operátorra vonatkozó egyenlőtlenség adódik.

A jelen dolgozat lényegében megegyezik a 2018. évi XXXIV. Országos Tudományos Diákköri Konferencia Fizika Földtudományok és Matematika szekciójába Dr. Kovács Sándor témavezetésével benyújtott, majd ott III. díjat nyert dolgozatommal.

Budapest, 2020. május 27.

Gyúró Noémi

Tartalomjegyzék

1. Előismeretek

1.1. Lineáris operátorok

Ebben a fejezetben összefoglaljuk a funkcionálanalízis azon fogalmait, ill. tételeit, amelyekre a későbbiekben hivatkozunk, ill. amelyeket a határozatlansági relációk tárgyalása folyamán felhasználunk. A jelölés-, ill. szimbólumrendszert illetően alapvetően a [11] jegyzetre támaszkodunk. A $\mathbb{K}$ szimbólum vagy a valós számok $\mathbb{R}$ halmazát vagy a komplex számok $\mathbb{C}$ halmazát jelöli.

Adott $\mathcal{H}$ lineáris tér esetén a $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ párt **Hilbert-tér**nek nevezzük, ha

1. bármely $\alpha, \beta \in \mathbb{K}$, ill. bármely $u, v, w \in \mathcal{H}$ esetén
   a) $\langle \alpha u + \beta v, w\rangle = \alpha\langle u, w\rangle + \beta\langle v, w\rangle$;
   b) $\langle u, v\rangle = \overline{\langle v, u\rangle}$;
   c) $0 \neq u \in \mathcal{H} \quad \Longrightarrow \quad \langle u, u\rangle \in (0, +\infty)$.
2. $\|\cdot\| = \sqrt{\langle\cdot,\cdot\rangle}$, akkor bármely $x_n \in \mathcal{H}$ $(n \in \mathbb{N})$ Cauchy-sorozat konvergens, azaz

$$\|x_m - x_n\| \longrightarrow 0 \quad (m, n \to \infty) \qquad \Longrightarrow \qquad \exists\, h \in \mathcal{H} : \ \lim(\|h - x_n\|) = 0.$$

A $\|\cdot\|$ és a $\langle\cdot,\cdot\rangle$ kapcsolatára világít rá a **Cauchy-Bunyakovszkij-egyenlőtlenség**, miszerint bármely $u, v \in \mathcal{H}$ esetén

$$|\langle u, v\rangle| \leq \|u\| \cdot \|v\|$$

teljesül, és egyenlőség pontosan akkor áll fenn, ha $u = 0$ vagy $v = 0$, vagy pedig alkalmas $\lambda \in \mathbb{K}$ számmal $u = \lambda v$ teljesül.
A $\mathcal{H}$ Hilbert-téren értelmezett **lineáris operátor**ok terének jelölésére az

$$\mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H}) := \{A \in \mathcal{H} \to \mathcal{H} : \ A \text{ lineáris}\},$$

ill. az

$$\mathfrak{L}(\mathcal{H}) := \mathfrak{L}(\mathcal{H}, \mathcal{H}) := \{A : \mathcal{H} \to \mathcal{H} : \ A \text{ lineáris}\}$$

szimbólumot használjuk.
Az

$$[A, B] := AB - BA, \quad \{A, B\} := AB + BA \qquad (A, B \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H}),\ \mathcal{D}(AB) \cap \mathcal{D}(BA) \neq \{0\})$$

operátorokat az A és B operátorok **kommutátor**ának, ill. **antikommutátor**ának nevezzük.[1]

Ha valamely $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ Hilbert-tér esetén az $A \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ (lineáris) operátor **sűrűn értelmezett**, azaz $\overline{\mathcal{D}(A)} = \mathcal{H}$, úgy (vö. [28]) azt mondjuk, hogy az A operátor

1. **szimmetrikus**, ha bármely $u, v \in \mathcal{D}(A)$ esetén $\langle Au, v\rangle = \langle u, Av\rangle$;
2. **ferdén szimmetrikus**, ha bármely $u, v \in \mathcal{D}(A)$ esetén $\langle Au, v\rangle = -\langle u, Av\rangle$;
3. **önadjungált** (**hermitikus**), ha $A^* = A$, azaz ha A szimmetrikus, továbbá bármely $v, w \in \mathcal{H}$ vektor esetén az
$$\langle Au, v\rangle = \langle u, w\rangle \qquad (u \in \mathcal{D}(A))$$
egyenlőségből $v \in \mathcal{D}(A)$ és $w = Av$ következik;
4. **ferdén önadjungált**, ha $A^* = -A$;
5. **lényegében önadjungált**, ha A szimmetrikus és $\overline{A}$ (A lezártja) önadjungált.

Ha A szimmetrikus operátor és $\mathcal{D}(A) = \mathcal{H}$, úgy

– az A operátor önadjungált, ui. ekkor $A^* = A$.

– a Hellinger-Toeplitz-tétel következtében (vö. [11], 742. old.) A korlátos is.

Ha az $A, B \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ operátorok sűrűn értelmezettek, úgy

– A pontosan akkor önadjungált, ha bármely $\lambda \in \mathbb{C}$, $\mathfrak{I}(\lambda) \neq 0$ esetén $\mathcal{R}(A - \lambda I) = \mathcal{H}$ (vö. [5], 202. old.), ahol I jelöli a $\mathcal{H}$-beli identikus operátort.

– A pontosan akkor ferdén önadjungált, ha valamely $0 \neq \alpha \in \mathbb{R}$ számra $\alpha\imath A$ önadjungált.

– abból, hogy A és B önadjungált következik, hogy alkalmas $P \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ öndajungált operátor esetén $[A, B] = \imath P$, hiszen ekkor
$$\begin{aligned}[A,B]^* &= (AB - BA)^* = (AB)^* - (BA)^* = B^*A^* - A^*B^* = BA - AB = \\ &= -(AB - BA) = -[A, B],\end{aligned}$$
azaz $[A, B]$ ferdén önadjungált.

Adott $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ Hilbert-tér, továbbá $A \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ önadjungált operátor, ill. $u \in \mathcal{D}(A)$ esetén az
$$\mathfrak{A} := \langle A\rangle_u := \langle u, Au\rangle, \qquad \text{ill. a} \qquad \Delta\mathfrak{A} := \|Au - \mathfrak{A}u\|$$
számot az A operátor (u vektorhoz tartozó) **várható** (**átlag**-, **közép**-) **érték**ének, ill. **szórás**ának nevezzük.

[1] Szokásos a **Lie-zárójel**, ill. a **Dirac-Poisson-zárójel** elnevezés is.

Ha A önadjungált operátor, akkor bármely $u \in \mathcal{D}(A)$ esetén

$$\langle A\rangle_u = \langle u, Au\rangle = \langle A^*u, u\rangle = \langle Au, u\rangle = \overline{\langle u, Au\rangle} = \overline{\langle A\rangle_u},$$

azaz $\langle A\rangle_u \in \mathbb{R}$, és ez a feltétel elégséges is az önadjungáltságra (vö. [11], 766. old). Ha A önadjungált, akkor bármely $u \in \mathcal{D}(A)$ esetén az

$$\widetilde{A} := A - \langle A\rangle_u I = A - \mathfrak{A}I$$

operátor is önadjungált, így a szórásnégyzetre igaz a

$$\begin{aligned}\Delta\mathfrak{A}^2 &= \|\widetilde{A}u\|^2 = \langle (A-\mathfrak{A}I)u, (A-\mathfrak{A}I)u\rangle = \left\langle u, (A-\mathfrak{A}I)^2u\right\rangle = \\ &= \left\langle u, (A^2 - 2\mathfrak{A}A + \mathfrak{A}^2I)u\right\rangle = \left\langle u, A^2u\right\rangle - 2\mathfrak{A}\left\langle u, Au\right\rangle + \mathfrak{A}^2\left\langle u, u\right\rangle = \\ &= \left\langle A^2\right\rangle_u - 2\mathfrak{A}^2 + \mathfrak{A}^2 = \left\langle A^2\right\rangle_u - 2\langle A\rangle_u^2 + \langle A\rangle_u^2 = \left\langle A^2\right\rangle_u - \langle A\rangle_u^2\end{aligned}$$

összefüggés, feltéve, hogy $\|u\| = 1$ és $u \in \mathcal{D}(A^2)$, azaz $u \in \mathcal{D}(A)$ és $Au \in \mathcal{D}(A)$.

Ha A önadjungált operátor, akkor bármely $u \in \mathcal{D}(A)$, $\|u\| = 1$ esetén $\Delta\mathfrak{A} = 0$ pontosan akkor teljesül, ha u sajátvektora A-nak, hiszen

- $\Delta\mathfrak{A} = 0$, azaz $Au - \langle A\rangle_u u = 0$ esetén u az A sajátvektora az $\langle A\rangle_u$ sajátértékkel;
- ha u sajátvektora A-nak, akkor alkalmas $\lambda \in \mathbb{K}$ számmal $Au = \lambda u$, ahonnan

  $$\langle u, Au\rangle = \langle Au, u\rangle = \langle \lambda u, u\rangle = \lambda\langle u, u\rangle = \lambda,$$

  és így

  $$(A - \langle A\rangle_u I)u = Au - \langle A\rangle_u u = 0, \qquad \text{azaz} \qquad \Delta\mathfrak{A} = 0$$

  következik.

Ha $A, B \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ önadjungált operátor és valamely $u \in \mathcal{D}(AB) \cap \mathcal{D}(BA)$ sajátvektora A-nak és B-nek, akkor $[A, B]u = 0$, hiszen ekkor alkalmas $\lambda, \mu \in \mathbb{K}$ esetén $Au = \lambda u$ és $Bu = \mu u$, ennélfogva

$$\begin{aligned}[A, B]u &= (AB)u - (BA)u = A(Bu) - B(Au) = A(\mu u) - B(\lambda u) = \mu(Au) - \lambda(Bu) = \\ &= \mu(\lambda u) - \lambda(\mu u) = 0.\end{aligned}$$

Ha $A, B \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ önadjungált operátor és valamely $u \in \mathcal{D}(AB) \cap \mathcal{D}(BA)$ sajátvektora A-nak vagy B-nek, akkor $\langle [A, B]\rangle_u = 0$, hiszen ha alkalmas $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ esetén $Au = \lambda u$ vagy $Bu = \mu u$, akkor a fentiek következtében

$$\begin{aligned}\langle [A, B]\rangle_u &= \langle u, (AB)u - (BA)u\rangle = \langle u, A(Bu) - B(Au)\rangle = \langle u, A(Bu) - B(\lambda u)\rangle = \\ &= \langle u, (A - \lambda I)(Bu)\rangle = \langle (A - \lambda I)u, Bu\rangle = \langle 0, Bu\rangle = 0\end{aligned}$$

vagy

$$
\begin{aligned}
\langle [A,B]\rangle_u &= \langle u, (AB)u - (BA)u\rangle = \langle u, A(Bu) - B(Au)\rangle = \langle u, A(\mu u) - B(Au)\rangle = \\
&= \langle u, (\mu I - B)(Au)\rangle = \langle (\mu I - B)u, Au\rangle = \langle 0, Au\rangle = 0.
\end{aligned}
$$

A várható érték lineáris, azaz ha $A, B \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ önadjungált operátorok, továbbá $\mathcal{D} := = \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B) \neq \{0\}$, akkor bármely $\alpha \in \mathbb{K}$ esetén

$$
\langle A + B\rangle_u = \langle A\rangle_u + \langle B\rangle_u, \quad \langle \alpha A\rangle_u = \overline{\alpha}\langle A\rangle_u \qquad (u \in \mathcal{D}).
$$

Könnyen belátható, hogy ha $A, B \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ önadjungált operátor, akkor egyrészt

$$
\langle u, \widetilde{A}^2 u\rangle = \langle \widetilde{A}u, \widetilde{A}u\rangle = \|\widetilde{A}u\|^2 = \Delta\mathfrak{A}^2 \qquad (u \in \mathcal{D}(A)),
$$

másrészt pedig igaz az

$$
[\widetilde{A}, \widetilde{B}] = [A, B]
$$

egyenlőség, hiszen ha $u \in \mathcal{D}(AB) \cap \mathcal{D}(BA) \neq \{0\}$, akkor

$$
\begin{aligned}
[\widetilde{A}, \widetilde{B}] &= (A - \langle A\rangle_u I)\,(B - \langle B\rangle_u I) - (B - \langle B\rangle_u I)\,(A - \langle A\rangle_u I) = \\
&= (AB - \langle A\rangle_u B - \langle B\rangle_u A + \langle A\rangle_u \langle B\rangle_u I) - (BA - \langle B\rangle_u A - \langle A\rangle_u B + \\
&\quad + \langle A\rangle_u \langle B\rangle_u I) = [A, B],
\end{aligned}
$$

ill.

$$
\begin{aligned}
\{\widetilde{A}, \widetilde{B}\} &= (A - \langle A\rangle_u I)\,(B - \langle B\rangle_u I) + (B - \langle B\rangle_u I)\,(A - \langle A\rangle_u I) = \\
&= (AB - \langle A\rangle_u B - \langle B\rangle_u A + \langle A\rangle_u \langle B\rangle_u I) + (BA - \langle B\rangle_u A - \langle A\rangle_u B + \\
&\quad + \langle A\rangle_u \langle B\rangle_u I) = AB + BA - 2\langle B\rangle_u A - 2\langle A\rangle_u B + 2\langle A\rangle_u \langle B\rangle_u I,
\end{aligned}
$$

továbbá az $\widetilde{A}$ operátor $\Delta\widetilde{\mathfrak{A}} := \|\widetilde{A}u - \langle \widetilde{A}\rangle_u u\|$-val jelölt szórására $\Delta\widetilde{\mathfrak{A}}^2 = \Delta\mathfrak{A}^2$, hiszen

$$
\widetilde{A} - \langle \widetilde{A}\rangle_u I = A - \langle A\rangle_u I - \langle A - \langle A\rangle_u I\rangle_u I = A - \langle A\rangle_u I - (\langle A\rangle_u I - \langle A\rangle_u I) = A - \langle A\rangle_u I.
$$

A továbbiakban a teljesség kedvéért néhány kvantummechanikai operátor önadjungáltságának kérdésével foglalkozunk.

1.0.1. tétel. Ha $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R})$, $\|\cdot\|_{\mathcal{H}} := \|\cdot\|_{L^2}$, akkor az

$$
Au := u(-\cdot) \qquad (u \in \mathcal{H})
$$

olyan lineáris operátor (**a kvantummechanika paritás-operátora**), amely korlátos és önadjungált.

Biz.

1. lépés. Az A operátor korlátos, ui. minden $u \in \mathcal{H}$ esetén

$$\|Au\|_{\mathcal{H}}^2 = \langle Au, Au\rangle_{\mathcal{H}} = \int_{-\infty}^{+\infty} u(-x)\overline{u(-x)}\,dx = -\int_{+\infty}^{-\infty} u(t)\overline{u(t)}\,dt =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} u(t)\overline{u(t)}\,dt = \|u\|_{\mathcal{H}}^2.$$

2. lépés. Az A operátor önadjungált, hiszen szimmetrikus: bármely $u, v \in \mathcal{H}$ esetén

$$\langle Au, v\rangle_{\mathcal{H}} = \int_{-\infty}^{+\infty} u(-x)\overline{v(x)}\,dx = -\int_{+\infty}^{-\infty} u(t)\overline{v(-t)}\,dt =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} u(t)\overline{v(-t)}\,dt = \langle u, Av\rangle_{\mathcal{H}}. \quad \blacksquare$$

1.0.2. tétel. Ha $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R})$, $\|\cdot\|_{\mathcal{H}} := \|\cdot\|_{L^2}$ és

$$u_*(x) := x \cdot u(x) \qquad (x \in \mathbb{R}),$$

akkor az

$$Au := u_* \qquad (u \in \mathcal{D}(A) := \{u \in \mathcal{H} : \|u_*\|_{\mathcal{H}} < +\infty\})$$

lineáris operátor (**a kvantummechanika helyzet-operátora**) önadjungált.

Biz. Megjegyezzük, hogy

$$\mathcal{D}(A) = \left\{u\colon \mathbb{R} \to \mathbb{C} \text{ mérhető}, \int_{\mathbb{R}} (1 + x^2)|u(x)|^2\,dx < +\infty\right\}.$$

1. lépés. Megmutatjuk, hogy A sűrűn definiált. Bármely $f \in \mathcal{H}$ esetén

$$f_n := f \cdot \chi_{[-n,n]} \in \mathcal{D}(A) \qquad (n \in \mathbb{N}),$$

ui.

$$|xf_n(x)|^2 = |xf(x)\chi_{[-n,n]}(x)|^2 \le n^2|f(x)|^2 \qquad (x \in \mathbb{R},\ n \in \mathbb{N}),$$

így $(f_n)_*$-nak van integrálható majoránsa $(n \in \mathbb{N})$, következésképpen maga is integrálható. A Lebesgue-tétel következtében pedig

$$\lim_{n\to\infty} \|f_n - f\|_{\mathcal{H}} = 0.$$

2. lépés. Az A operátor szimmetrikus, hiszen

$$\langle Au, v\rangle_{\mathcal{H}} = \int_{\mathbb{R}} xu(x)\overline{v(x)}\,dx = \int_{\mathbb{R}} u(x)\overline{xv(x)}\,dx = \langle u, Av\rangle_{\mathcal{H}} \qquad (u, v \in \mathcal{D}(A)).$$

3. lépés. Az A operátor önadjungált, ui. bármely, az $\lambda \in \mathbb{C}$, $\Im(\lambda) \neq 0$ feltételeknek eleget tévő számra

$$u \in \mathcal{D}(A) \qquad \Longrightarrow \qquad \left(v := \frac{u}{\mathrm{id} - \lambda} \in \mathcal{D}(A) \quad \text{és} \quad (A - \lambda I)v = u\right),$$

ami azt jelenti, hogy $\mathcal{R}(A - \lambda I) = \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$. $\blacksquare$

1.0.3. tétel. Ha $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R})$, $\|\cdot\|_{\mathcal{H}} := \|\cdot\|_{L^2}$, akkor az

$$Au := -\imath\hbar u'$$

$$\left(u \in \mathfrak{W}_{1,2}(\mathbb{R}) := \left\{f \in L^2(\mathbb{R}) : \text{ f lokálisan abszolút folytonos, } f' \in L^2(\mathbb{R})\right\}\right)$$

lineáris operátor (**a kvantummechanika momentum-operátora**) önadjungált.

Biz.

1. lépés. Az A operátor sűrűn definiált, hiszen bármely $n \in \mathbb{N}_0$ esetén az

$$\varphi_n(x) := x^n e^{-x^2} \qquad (x \in \mathbb{R})$$

függvények $\mathcal{D}(A)$-beliek, továbbá

$$\operatorname{span}\{\varphi_n : n \in \mathbb{N}_0\} = L^2(\mathbb{R}),$$

(vö. [7], 69. old.).

2. lépés. Az A operátor szimmetrikus, hiszen bármely $u, v \in \mathcal{D}(A)$ esetén $uv' \in L^1(\mathbb{R})$ és $u'v \in L^1(\mathbb{R})$, továbbá (vö. [7] 328. old.)

$$\langle Au, v\rangle_{\mathcal{H}} = -\imath\hbar \int_{\mathbb{R}} u'(x)\overline{v(x)}\, dx = \imath\hbar \int_{\mathbb{R}} u(x)\overline{v'(x)}\, dx = \langle u, Av\rangle_{\mathcal{H}}.$$

3. lépés. Az A operátor önadjungált (vö. [28], 207-208. old., ill. [24], 198. old.) ■

Megjegyezzük, hogy a momentum-operátor értelmezési tartományában lévő derivált általános értelemben értendő, azaz az $u \in \mathcal{D}(A)$ tartalmazás pontosan akkor áll fenn, ha alkalmas $w \in L^2(\mathbb{R})$ függvény esetében

$$\int_{\mathbb{R}} u(x)v'(x)\, dx = -\int_{\mathbb{R}} w(x)v(x)\, dx \qquad (u \in \mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})), \tag{1.0.1}$$

ahol $\mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ jelöli a végtelen sokszor differenciálható, kompakt tartójú függvények terét:

$$\mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R}) := \mathfrak{C}_c^\infty(\mathbb{R}) := \{f \in \mathfrak{C}^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \operatorname{supp}(f) \text{ kompakt}\}.$$

Ha az (1.0.1) egyenlőség teljesül, akkor azt mondjuk, hogy általánosított értelemben

$$w = u'.$$

1.2. Az $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ függvénytér

Ebben a fejezetben összefoglaljuk az $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ függvénytérnek azon alapvető tulajdonságait, amelyek vagy amelyek következményei a későbbiekben hasznosak lehetnek.

Megmutatható (vö. [20]), hogy tetszőleges $p \in [1, +\infty)$ esetén $\mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ az $L^p(\mathbb{R})$ egy sűrű altere. Az

$$f_n \in \mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R}) \qquad (n \in \mathbb{N})$$

függvénysorozat, ill. valamely $f \in \mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ függvény esetén

$$f_n \xrightarrow{\mathfrak{D}} f \quad (n \to \infty) \qquad :\Longleftrightarrow \qquad \begin{cases} \text{i)}\ \ \exists\, K \subset \mathbb{R},\ K \text{ kompakt} : \operatorname{supp}(f_n) \subset K\ (n \in \mathbb{N}), \\ \\ \text{ii)}\ \ f_n^{(k)} \rightrightarrows f^{(k)} \qquad (k \in \mathbb{N}_0). \end{cases}$$

Bevezetjük a **gyorsan lecsengő függvény**ek osztályát:

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) := \left\{ f \in \mathcal{D}^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{K}) :\ \|f\|_{k,l} := \sup_{x \in \mathbb{R}} \left| x^k f^{(l)}(x) \right| < +\infty\ (k, l \in \mathbb{N}_0) \right\}.$$

Belátható, hogy

– $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \neq \emptyset$, ui. az

$$f(x) := e^{-x^2} \qquad (x \in \mathbb{R})$$

függvényre $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$;

– $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ vektortér a $\mathbb{K}$ testre vonatkozóan, sőt bármely $p \in [1, +\infty]$ esetén

$$\mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R}) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R}) \subset L^p(\mathbb{R}).$$

A második tartalmazás nyilvánvalóan valódi, az első pedig azért az, mert az

$$\mathbb{R} \ni x \mapsto e^{-|x|^2}$$

függvény az $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \backslash \mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ különbségnek eleme.

– ha az $f_n \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ $(n \in \mathbb{N})$ függvénysorozat, ill. valamely $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ függvény esetén

$$f_n \xrightarrow{\mathcal{S}(\mathbb{R})} f \quad (n \to \infty) \qquad :\Longleftrightarrow \qquad \|f_n - f\|_{k,l} \longrightarrow 0 \quad (n \to \infty) \quad (k, l \in \mathbb{N}_0),$$

akkor az $\mathcal{S}(\mathbb{R})$-beli konvergencia erősebb, mint az L^p-beli konvergencia:

$$f_n \xrightarrow{\mathcal{S}(\mathbb{R})} f \quad (n \to \infty) \qquad \Longrightarrow \qquad \lim_{n \to \infty} \|f_n - f\|_{L^p} = 0.$$

– a $\mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$-beli konvergencia erősebb, mint az $\mathcal{S}(\mathbb{R})$-beli konvergencia:

$$f_n \xrightarrow{\mathfrak{D}} f \quad (n \to \infty) \qquad \Longrightarrow \qquad f_n \xrightarrow{\mathcal{S}(\mathbb{R})} f \quad (n \to \infty).$$

– $\mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ sűrű altere $\mathcal{S}(\mathbb{R})$-nek, hiszen ha $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ és $\phi \in \mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ olyan függvény, amelyre $\phi|_{[-1,1]} = 1$, akkor az

$$f_n(x) := \phi\left(\frac{x}{n}\right) f(x) \qquad (n \in \mathbb{N},\ x \in \mathbb{R})$$

sorozatra $f_n \in \mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ $(n \in \mathbb{N})$ és $f_n \xrightarrow{\mathcal{S}(\mathbb{R})} f$ $(n \to \infty)$.

– Ha $p \in [1, +\infty)$, akkor $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ sűrű altere L^p-nek (vö. [20]), ezért bármely $f \in L^p$ függvény esetén van olyan $f_n \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ $(n \in \mathbb{N})$ függvénysorozat, amelyre

$$\|f_n - f\|_{L^p} \longrightarrow 0 \qquad (n \to \infty).$$

Valamely $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ függvény **Fourier-transzformált**jának nevezzük az

$$(\mathcal{F}f)(\xi) := \widehat{f}(\xi) := \int_{\mathbb{R}} f(x)e^{-2\pi\imath x\xi}\, dx \qquad (\xi \in \mathbb{R})$$

hozzárendelési utasítással értelmezett $\widehat{f}\colon \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ leképezést. Az

$$\mathcal{F}\colon \mathcal{S}(\mathbb{R}) \to \mathcal{S}(\mathbb{R})$$

leképezés bijekció, így értelmezhető az f függvény **inverz Fourier-transzformáció**ja:

$$(\mathcal{F}^{-1}f)(\xi) := f^{\vee}(\xi) := \widehat{f}(-\xi) = \int_{\mathbb{R}} f(\xi)e^{2\pi\imath x\xi}\, d\xi.$$

Az elemi analízis eszközeivel nem nehéz utánaszámolni annak, hogy igazak az alábbi állítások.

– Ha $f_* := \mathrm{id} \cdot f$ és

$$Mf := 2\pi\imath f_* \qquad (f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})),$$

akkor $Mf \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ és bármely $k \in \mathbb{N}$ esetén

$$\widehat{f^{(k)}} = M^k\widehat{f}, \qquad (\widehat{f})^{(k)} = (-1)^k\widehat{M^k f}. \tag{1.0.2}$$

– Az $L^2(\mathbb{R})$-beli skaláris szorzatra, ill. az abból származó normára nézve igaz a **Cauchy-Bunyakovszkij-egyenlőtlenség**:

$$|\langle f, g\rangle_{L^2}| \le \langle |f|, |g|\rangle_{L^2} \le \|f\|_{L^2} \cdot \|g\|_{L^2} \qquad (f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R})),$$

azaz

$$\int_{\mathbb{R}} \left|f(x)\overline{g(x)}\right| dx \le \sqrt{\left(\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2\, dx\right)\left(\int_{\mathbb{R}} |g(x)|^2\, dx\right)} \qquad (f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R})),$$

és egyenlőség pontosan akkor van, ha $f = 0$ vagy $g = 0$ vagy alkalmas $\lambda \in \mathbb{R}$ esetén $f = \lambda g$.

– Bármely $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ függvényre

$$\|\widehat{f}\|_{L^2} = \|f\|_{L^2}$$

(**Plancherel**-formula).

2. Határozatlansági relációk

2.1. A határozatlansági reláció az $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ téren

2.1.3. tétel (Heisenberg-Pauli-Weyl.) Legyen $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, $\|f\|_{L^2} = 1$. Ekkor

$$\left(\int_{\mathbb{R}} x^2 |f(x)|^2 \, dx\right) \cdot \left(\int_{\mathbb{R}} \xi^2 |\widehat{f}(\xi)|^2 \, d\xi\right) \geq \frac{1}{16\pi^2}, \tag{2.1.3}$$

és egyenlőség pontosan akkor van, ha alkalmas $\alpha \in \mathbb{C}$, $0 < \beta \in \mathbb{R}$ esetén

$$f(x) := \alpha e^{-\beta x^2} \qquad (x \in \mathbb{R}).$$

Biz. Mivel $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ esetén $f' \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, ezért parciálisan integrálva, ill. az $|f|^2 = f\overline{f}$ egyenlőséget felhasználva azt kapjuk, hogy

$$1 = \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 \, dx = -\int_{\mathbb{R}} x \frac{d}{dx} |f(x)|^2 \, dx = -\int_{\mathbb{R}} \left(x f'(x)\overline{f(x)} + x\overline{f'(x)} f(x)\right) \, dx.$$

Így egy, az integrálra vonatkozó elemi becslés és a Cauchy-Bunyakovszkij-egyenlőtlenség felhasználásával

$$\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 \, dx \leq 2 \int_{\mathbb{R}} |x| \cdot |f(x)| \cdot |f'(x)| \, dx \leq 2 \sqrt{\left(\int_{\mathbb{R}} x^2 |f(x)|^2 \, dx\right) \left(\int_{\mathbb{R}} |f'(x)|^2 \, dx\right)}$$

adódik. A Plancherel-formula, ill. a Fourier-transzformáció (1.0.2) tulajdonságának következményeként

$$\int_{\mathbb{R}} |f'(x)|^2 \, dx = \|f'\|_2^2 = \|\widehat{f'}\|_2^2 = 4\pi^2 \int_{\mathbb{R}} \xi^2 |\widehat{f}(\xi)|^2 \, d\xi$$

adódik. Ez pedig a fentiek figyelembevételével azt jelenti, hogy

$$1 = \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 \, dx \leq 2 \sqrt{\left(\int_{\mathbb{R}} x^2 |f(x)|^2 \, dx\right) \left(4\pi^2 \int_{\mathbb{R}} \xi^2 |\widehat{f}(\xi)|^2 \, d\xi\right)}, \tag{2.1.4}$$

ahonnan a bizonyítandó egyenlőtlenség nyilvánvaló. Egyenlőség pedig f normáltsága következtében láthatóan az

$$f'(x) = \lambda x f(x) \qquad (x \in \mathbb{R})$$

esetben van. Az iménti differenciálegyenletet integrálva azt kapjuk, hogy alkalmas $\alpha \in \mathbb{C}$ esetén

$$f(x) = \alpha e^{\lambda x^2/2} \qquad (x \in \mathbb{R}).$$

Ahhoz, hogy $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ legyen $\lambda =: -2\beta < 0$-nak kell teljesülnie. Így f normáltságának felhasználásával azt kapjuk, hogy $\alpha^2 = \sqrt{2\beta/\pi}$. ■

Ha az $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ függvény valamely jelet ír le, akkor a

$$\sigma_f := \|f_*\|_{L^2}, \qquad \sigma_{\widehat{f}} := \|\widehat{f}_*\|_{L^2}, \qquad E_f := \|f\|_{L^2}^2$$

mennyiségek jelentése rendre a következő: az f reprezentálta jel energiadiszperziója az időtartományban, az energiadiszperziója a frekvenciatartományban, ill. a jel energiája. Ekkor a 2.1.3. tétel azt jelenti, hogy az f függvény reprezentálta jel

$$\Delta t := \frac{\sigma_f}{\sqrt{E_f}}$$

effektív időtartamának, ill. a

$$\Delta\lambda := \frac{\sigma_{\widehat{f}}}{\sqrt{E_f}}$$

effektív sávszélesség szorzatára alsó korlát adható:

$$\Delta t \cdot \Delta\lambda \geq \frac{1}{4\pi}, \qquad \text{azaz} \qquad \sigma_f \cdot \sigma_{\widehat{f}} \geq \frac{E_f}{4\pi}.$$

A 2.1.3. tétel egyik fontos következménye a kvantummechanikai **harmonikus osszcillátor** (harmonikus rezgést végző tömegpont) **energiaoperátor**ával kapcsolatos. Vezessük be az $\mathcal{S}(\mathbb{R})$-en a

$$\mathfrak{H}(f) := -f'' + (f_*)_* \qquad (f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}))$$

ún. **Hermite-operátor**t.

2.1.4. tétel. A $\mathfrak{H}$ operátorra fennáll az $\mathfrak{H} \geq I$ egyenlőtlenség, azaz a

$$\langle \mathfrak{H}(f), f \rangle_{L^2} \geq \|f\|_{L^2}^2 \qquad (f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}))$$

becslés.

Biz. Parciálisan integrálva azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \langle \mathfrak{H}(f), f \rangle_{L^2} &= \int_{\mathbb{R}} (-f''(x) + x^2 f(x))\overline{f(x)}\, dx = \int_{\mathbb{R}} (f'(x)\overline{f'(x)} + x^2|f(x)|^2)\, dx = \\ &= \int_{\mathbb{R}} |f'(x)|^2\, dx + \int_{\mathbb{R}} x^2|f(x)|^2\, dx \geq \|f\|_{L^2}^2, \end{aligned}$$

hiszen (2.1.4)-ból az elemi

$$a^2 + b^2 \geq 2ab \qquad (a, b \in \mathbb{R})$$

egyenlőtlenséget felhasználva, az

$$a := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\int_{\mathbb{R}} \xi^2 |\widehat{f}(\xi)|^2\, d\xi} = \sqrt{\int_{\mathbb{R}} |f'(x)|^2\, dx}, \qquad \text{ill.} \qquad b := \sqrt{\int_{\mathbb{R}} x^2|f(x)|^2\, dx}$$

választással azt kapjuk, hogy

$$\int_{\mathbb{R}} |f'(x)|^2\, dx + \int_{\mathbb{R}} x^2|f(x)|^2\, dx \geq \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2\, dx. \quad \blacksquare$$

Az alábbiakban egy [23]-beli feladatot megoldva alternatív bizonyítást adunk a Heisenberg-Pauli-Weyl-egyenlőtlenségre. Tetszőleges $t \in \mathbb{R}$ esetén legyen

$$A_t(f) := f' + tf_*, \quad \text{ill.} \quad A_t^*(f) := -f' + tf_* \qquad (f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})).$$

A $t = 1$ esetben A_t, ill. A_t^* operátorok kvantummechanikai megfelelője az ún. **eltüntető** (**abszorpciós**), illetve **keltő** (**emissziós**) **operátor**ok.

2.1.1. állítás. A fent értelmezett A_t, ill. A_t^* operátorokra bármely $f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ esetén igazak az alábbi állítások.

$$1.\ \langle A_t f, g\rangle_{L^2} = \langle f, A_t^* g\rangle_{L^2}, \qquad 2.\ \langle A_t^* A_t f, f\rangle_{L^2} \geq 0.$$

Biz.

1. Világos, hogy bármely $f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ esetén

$$\begin{aligned}\langle A_t f, g\rangle_{L^2} &= \int_{\mathbb{R}} \{f'(x) + txf(x)\}\overline{g(x)}\,dx = \int_{\mathbb{R}} f'(x)\overline{g(x)}\,dx + t\int_{\mathbb{R}} xf(x)\overline{g(x)}\,dx = \\ &= 0 - \int_{\mathbb{R}} f(x)\overline{g'(x)}\,dx + t\int_{\mathbb{R}} xf(x)\overline{g(x)}\,dx,\end{aligned}$$

ill.

$$\langle f, A_t^* g\rangle_{L^2} = \int_{\mathbb{R}} f(x)\overline{(-g'(x) + txg(x))}\,dx = -\int_{\mathbb{R}} f(x)\overline{g'(x)}\,dx + t\int_{\mathbb{R}} xf(x)\overline{g(x)}\,dx.$$

2. Tetszőleges $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ függvényre

$$\langle A_t^* A_t f, f\rangle_{L^2} = \langle A_t f, A_t f\rangle_{L^2} = \|A_t f\|^2 \geq 0. \quad \blacksquare$$

Így tehát bármely $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ esetén

$$\begin{aligned}A_t^* A_t f &= A_t^*(f' + tf_*) = -(f' + tf_*)' + t(f' + tf_*)_* = \\ &= -f'' - tf - tf_*' + tf_*' + t^2(f_*)_* = -f'' - tf + t^2(f_*)_*,\end{aligned}$$

ahonnan az

$$1 = \|f\|_{L^2} = \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2\,dx = \int_{\mathbb{R}} f(x)\overline{f(x)}\,dx$$

egyenlőség felhasználásával tetszőleges $t \in \mathbb{R}$ esetén

$$\begin{aligned}0 &\leq \langle A_t^* A_t f, f\rangle_{L^2} = \langle -f'' - tf + t^2(f_*)_*, f\rangle_{L^2} = \int_{\mathbb{R}} \{-f''(x) - tf(x) + t^2x^2f(x)\}\overline{f(x)}\,dx = \\ &= -\int_{\mathbb{R}} f''(x)\overline{f(x)}\,dx - t\int_{\mathbb{R}} f(x)\overline{f(x)}\,dx + t^2\int_{\mathbb{R}} x^2f(x)\overline{f(x)}\,dx = \\ &= 0 + \int_{\mathbb{R}} f'(x)\overline{f'(x)}\,dx - t\int_{\mathbb{R}} f(x)\overline{f(x)}\,dx + t^2\int_{\mathbb{R}} x^2f(x)\overline{f(x)}\,dx = \\ &= \int_{\mathbb{R}} |f'(x)|^2\,dx - t + t^2\int_{\mathbb{R}} x^2|f(x)|^2\,dx =: \phi(t)\end{aligned}$$

következik. Lévén, hogy a ϕ főegyütthatója pozitív és bármely $t \in \mathbb{R}$ esetén $\phi(t) \geq 0$, ezért a diszkriminánsra vonatkozó egyenlőtlenségből azt kapjuk, hogy

$$1 - 4\left(\int_{\mathbb{R}} x^2|f(x)|^2\,dx\right)\left(\int_{\mathbb{R}} |f'(x)|^2\,dx\right) \leq 0,$$

azaz

$$\left(\int_{\mathbb{R}} x^2|f(x)|^2\,dx\right)\left(\int_{\mathbb{R}} |f'(x)|^2\,dx\right) \geq \frac{1}{4}. \quad \blacksquare$$

2.2. Határozatlansági relációk a valószínűségelméletben

Az alábbiakban egy [14]-beli gondolatmenetet pontosítunk, illetve teszünk teljessé, majd Schrödinger ötletét (vö. [1]) felhasználva fejlesztünk tovább.

Legyen (X, Ω, μ) **Kolmogorov-mező**, $\xi, \eta: X \to \mathbb{R}$ **valószínűségi változó**, továbbá $\xi, \eta \in L(\mu)$. Ekkor (vö. [15])

- ξ **várható értéke**:
$$\langle \xi \rangle := M(\xi) := \int \xi\,d\mu,$$
- ξ **varianciája**, ill. **szórása** (határozatlansága):
$$\mathrm{Var}(\xi) := \|\xi - \langle \xi \rangle\|_{L^2}^2 = \left\langle |\xi - \langle \xi \rangle|^2 \right\rangle = M((\xi - M(\xi))^2), \qquad \text{ill.} \qquad \Delta\xi := \sqrt{\mathrm{Var}(\xi)},$$
  feltéve, hogy az
$$F_\xi(x) := \xi(x) - \langle \xi \rangle \qquad (x \in X)$$
  függvényre $0 < \|F_\xi\|_{L^2} < +\infty$ teljesül;
- ξ és η **kovarianciája**:
$$\sigma_{\xi,\eta} := \mathrm{Cov}(\xi, \eta) := \langle (\xi - \langle \xi \rangle)(\eta - \langle \eta \rangle) \rangle,$$
  feltéve, hogy $0 < \|F_\xi\|_{L^2}, \|F_\eta\|_{L^2} < +\infty$.

Világos (vö. [15]), hogy

$$\sigma_{\xi,\eta} = \langle \xi\eta \rangle - \langle \xi \rangle\langle \eta \rangle = \langle \eta\xi \rangle - \langle \eta \rangle\langle \xi \rangle = \sigma_{\eta,\xi}, \qquad \text{és} \qquad \mathrm{Var}(\xi) = \langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2 = \sigma_{\xi,\xi} = (\Delta\xi)^2.$$

2.1.1. példa. Legyen $\vartheta \in \mathbb{R}$, $0 < A, m, \omega \in \mathbb{R}$, $X := [0, 2\pi/\omega]$, Ω az X Lebesgue-mérhető részhalmazainak a szigma-algebrája, λ pedig a számegyenesen értelmezett Lebesgue-mérték leszűkitése Ω-ra. Az (X, Ω, λ) mértéktér, ill.

$$\xi(t) := A\sin(\omega t + \vartheta) \qquad (t \in [0, 2\pi/\omega])$$

valószínűségi változó (**harmonikus osszcillátor**) esetén kiszámítjuk ξ és $\eta := m\xi'$ szórását, ill. kettejük kovarianciáját. Mivel

$$\langle \xi \rangle = \int_0^{2\pi/\omega} A\sin(\omega t + \vartheta)\,dt = 0, \qquad \langle \xi^2 \rangle = \int_0^{2\pi/\omega} A^2\sin^2(\omega t + \vartheta)\,dt = \frac{A^2\pi}{\omega},$$

ill.

$$\langle \eta \rangle = \int_0^{2\pi/\omega} Am\omega\cos(\omega t + \vartheta)\,dt = 0, \qquad \langle \eta^2 \rangle = \int_0^{2\pi/\omega} A^2m^2\omega^2\cos^2(\omega t + \vartheta)\,dt = A^2m^2\omega\pi,$$

ezért

$$\Delta\xi = \sqrt{\langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2} = A\sqrt{\frac{\pi}{\omega}}, \qquad \Delta\eta = \sqrt{\langle \eta^2 \rangle - \langle \eta \rangle^2} = Am\sqrt{\omega\pi},$$

továbbá

$$\sigma_{\xi,\eta} = \langle \xi\eta \rangle = \int_0^{2\pi/\omega} A^2m\omega\sin(\omega t + \vartheta)\cos(\omega t + \vartheta)\,dt = 0.$$

Nyilvánvaló (vö. [15]), hogy a

$$\widetilde{\xi} := \xi - \langle \xi \rangle, \qquad \text{ill. a} \qquad \widetilde{\eta} := \eta - \langle \eta \rangle$$

valószínűségi változóra:

- $\langle \widetilde{\xi} \rangle = \langle \xi - \langle \xi \rangle \rangle = \langle \xi \rangle - \langle \xi \rangle = 0$;
- $\langle (\widetilde{\xi})^2 \rangle = \langle (\xi - \langle \xi \rangle)(\xi - \langle \xi \rangle) \rangle = \left\langle \xi^2 - 2\langle \xi \rangle \xi + \langle \xi \rangle^2 \right\rangle = \langle \xi^2 \rangle - 2\langle \xi \rangle^2 + \langle \xi \rangle^2 = (\Delta\xi)^2$;
- $\langle \widetilde{\xi}\widetilde{\eta} \rangle = \langle (\xi - \langle \xi \rangle)(\eta - \langle \eta \rangle) \rangle = \langle \xi\eta \rangle - 2\langle \xi \rangle\langle \eta \rangle + \langle \xi \rangle\langle \eta \rangle = \sigma_{\xi,\eta}$.

Ha tehát $\lambda \in \mathbb{R}$, akkor a

$$\phi(\lambda) := \left\langle (\widetilde{\xi} + \lambda\widetilde{\eta})^2 \right\rangle = \langle (\widetilde{\xi})^2 \rangle + 2\lambda\langle \widetilde{\xi}\widetilde{\eta} \rangle + \lambda^2\langle (\widetilde{\eta})^2 \rangle$$

valószínűségi változóra $\phi(\lambda) \geq 0$. Ez pedig pontosan akkor teljesül, ha

$$4\langle \widetilde{\xi}\widetilde{\eta} \rangle^2 - 4\langle (\widetilde{\xi})^2 \rangle\langle (\widetilde{\eta})^2 \rangle \leq 0,$$

ahonnan

$$(\Delta\xi)^2(\Delta\eta)^2 \geq (\sigma_{\xi,\eta})^2,$$

azaz

$$\Delta\xi\Delta\eta \geq |\sigma_{\xi,\eta}|$$

következik. Ez azt jelenti, hogy két valószínűségi változó szorásának szorzata nem kisebb, mint a változók kovarianciájának abszolút értéke.

A várható érték elemi tulajdonságainak felhasználásával azt kapjuk, hogy

$$\mathrm{Cov}(\xi,\eta)=\left\langle\frac{\xi\eta+\eta\xi}{2}\right\rangle-\langle\xi\rangle\langle\eta\rangle=\frac{1}{2}\langle\xi\eta+\eta\xi\rangle-\langle\xi\rangle\langle\eta\rangle.$$

Ismeretes (vö. [15]), hogy a

$$\Sigma:=\begin{bmatrix}\mathrm{Var}(\xi) & \mathrm{Cov}(\xi,\eta)\\ \mathrm{Cov}(\eta,\xi) & \mathrm{Var}(\eta)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(\Delta\xi)^2 & \mathrm{Cov}(\xi,\eta)\\ \mathrm{Cov}(\eta,\xi) & (\Delta\eta)^2\end{bmatrix}$$

kovariancia-mátrix szimmetrikus, sőt pozitív szemidefinit, következésképpen

$$\det(\Sigma)\geq 0=\frac{1}{4}|\langle\xi\eta-\eta\xi\rangle|^2,$$

azaz

$$(\Delta\xi)^2(\Delta\eta)^2-[\mathrm{Cov}(\xi,\eta)]^2=(\Delta\xi)^2(\Delta\eta)^2-\left[\frac{1}{2}\langle\{\xi,\eta\}\rangle-\langle\xi\rangle\langle\eta\rangle\right]^2\geq\frac{1}{4}|\langle[\xi,\eta]\rangle|^2,$$

ahol

$$\{\xi,\eta\}:=\xi\eta+\eta\xi,\qquad \text{ill.}\qquad [\xi,\eta]:=\xi\eta-\eta\xi.$$

Ezzel beláttuk, hogy igaz a

2.1.1. állítás.

$$\Delta\xi\Delta\eta\geq\sqrt{\left[\frac{1}{2}\langle\{\xi,\eta\}\rangle-\langle\xi\rangle\langle\eta\rangle\right]^2+\frac{1}{4}|\langle[\xi,\eta]\rangle|^2}.$$

A következő fejezetben a 2.1.1. tételbeli egyenlőtlenség nem kommutáló operátotokra vonatkozó változatát, ill. annak általánosítását tárgyaljuk.

2.3. Absztrakt határozatlansági relációk

2.1.4. tétel (**Robertson**, [17]). Ha $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ (szeparábilis) Hilbert-tér, $A, B \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ önadjungált operátorok, továbbá az $u \in \mathcal{H}$ vektorra

$$u \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B): \qquad Au \in \mathcal{D}(B), \quad Bu \in \mathcal{D}(A), \quad \|u\| = 1$$

teljesül, akkor a $\mathcal{C} := \langle [B, A] \rangle_u$ számmal fennáll a

$$\Delta\mathfrak{A}\Delta\mathfrak{B} \geq \frac{1}{2}|\mathcal{C}| \tag{2.1.5}$$

becslés.

Biz. Legyen

$$\phi(\lambda) := \|(\widetilde{B} + \imath\lambda\widetilde{A})u\|^2 \qquad (\lambda \in \mathbb{R}).$$

Ekkor a tételbeli u vektor, ill. bármely $\lambda \in \mathbb{R}$ esetén

$$\begin{aligned}
\phi(\lambda) &= \langle(\widetilde{B} + \imath\lambda\widetilde{A})u, (\widetilde{B} + \imath\lambda\widetilde{A})u\rangle = \langle u, (\widetilde{B} + \imath\lambda\widetilde{A})^*(\widetilde{B} + \imath\lambda\widetilde{A})u\rangle = \\
&= \langle u, (\widetilde{B} - \imath\lambda\widetilde{A})(\widetilde{B} + \imath\lambda\widetilde{A})u\rangle = \langle u, (\widetilde{B}^2 + \lambda^2\widetilde{A}^2 - \imath\lambda(\widetilde{A}\widetilde{B} - \widetilde{B}\widetilde{A})u\rangle = \\
&= \langle u, (\widetilde{B}^2 + \lambda^2\widetilde{A}^2 - \imath\lambda[\widetilde{B}, \widetilde{A}])u\rangle = \langle u, \widetilde{B}^2 u\rangle + \lambda^2\langle u, \widetilde{A}^2 u\rangle + \imath\lambda\langle u, [\widetilde{B}, \widetilde{A}]u\rangle = \\
&= \Delta\mathfrak{B}^2 + \lambda^2\Delta\mathfrak{A}^2 + \imath\lambda\langle[B, A]\rangle_u = \Delta\mathfrak{B}^2 + \lambda^2\Delta\mathfrak{A}^2 - \imath\lambda\langle[A, B]\rangle_u.
\end{aligned}$$

Mivel bármely $\lambda \in \mathbb{R}$ esetén $\phi(\lambda) \geq 0$, ezért

$$(-\imath\langle[A, B]\rangle_u)^2 - 4\Delta\mathfrak{B}^2\Delta\mathfrak{A}^2 \leq 0,$$

azaz

$$\Delta\mathfrak{A}\Delta\mathfrak{B} \geq \frac{1}{2}|\imath\langle[A, B]\rangle_u|. \quad \blacksquare$$

A Robertson-féle határozatlansági relációban, pontosabban a (2.1.5) egyenlőtlenségben pontosan akkor áll fenn egyenlőség, ha az alábbi esetek valamelyike teljesül:

1. eset.. az u sajátvektora A-nak, hiszen ekkor $\Delta\mathfrak{A} = 0$ és $\langle[A, B]\rangle_u = 0$;

2. eset.. az u sajátvektora B-nek, hiszen ekkor $\Delta\mathfrak{B} = 0$ és $\langle[A, B]\rangle_u = 0$;

3. eset.. valamely $0 \neq \lambda \in \mathbb{K}$ esetén u sajátvektora a $B + \imath\lambda A$ operátornak, hiszen

$$\phi(\lambda) = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad (\widetilde{B} + \imath\lambda\widetilde{A})u = 0,$$

ez utóbbi pedig azt jelenti, hogy

$$Bu - \langle B\rangle_u u + \imath\lambda(Au - \langle A\rangle_u u) = 0, \qquad \text{azaz} \qquad (B + \imath\lambda A)u = (\langle B\rangle_u + \imath\lambda\langle A\rangle_u)u.$$

Megjegyezzük, hogy a Robertson-féle határozatlansági relációban az

$$u \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B): \qquad Au \in \mathcal{D}(B), \quad Bu \in \mathcal{D}(A) \tag{2.1.6}$$

feltétel lényeges. Az

$$A : L^2[0,1] \to L^2[0,1], \qquad Au := u_*,$$

ill.

$$B \in L^2[0,1] \to L^2[0,1], \qquad \mathcal{D}(B) := \left\{ f \in L^2[0,1] : \ f \in \mathfrak{AC}[0,1],\ f' \in L^2[0,1],\ f(0) = f(1) \right\},$$

$$Bu := -\imath\hbar u'.$$

operátorok önadjungáltak (vö. pl. [11], [8]), továbbá az

$$\{u_n \in L^2[0,1] : \ n \in \mathbb{Z}\}$$

függvényrendszer a B operátor normált sajátfüggvény-rendszere, ahol

$$u_n(x) := \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(\pi \imath n x) \qquad (n \in \mathbb{Z},\ x \in [0,1]),$$

hiszen bármely $n \in \mathbb{Z}$-re

$$u_n \in \mathcal{D}(B) \qquad \text{és} \qquad Bu_n(x) = \pi\hbar n \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(\pi \imath n x) = \pi\hbar n u_n(x) \quad (x \in [0,1]).$$

Következésképpen ezekre a sajátfüggvényekre $\Delta\mathfrak{B} = 0$, így

$$\Delta\mathfrak{A} \cdot \Delta\mathfrak{B} = 0,$$

hiszen az A operátor korlátos volta következtében $\Delta\mathfrak{A} \in \mathbb{R}$, továbbá bármely $n \in \mathbb{Z}$ esetén ugyan $u_n \in \mathcal{D}(B)$, de $Au_n \notin \mathcal{D}(B)$, hiszen

$$Au_n(0) = \frac{x}{\sqrt{2}} \exp(\pi \imath n x)\Big|_{x=0} = 0 \neq \frac{x}{\sqrt{2}} \exp(\pi \imath n x)\Big|_{x=1} = Au_n(1).$$

A (2.1.6) feltétel így nem teljesül, tehát a 2.1.5. tétel nem alkalmazható.

Ha $\mathcal{X}$, ill. $\mathcal{P}$ jelöli a kvantummechanika helyzet-, ill. momentum-operátorát (vö. 1.0.2., ill. 1.0.3. tétel), akkor bármely $u \in \mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ függvényre

$$[\mathcal{X}, \mathcal{P}]u = (\mathcal{X}\mathcal{P})u - (\mathcal{P}\mathcal{X})u = -\imath\hbar\{(u')_* - (u_*)'\} = -\imath\hbar\{(u')_* - u - (u')_*\} = \imath\hbar u.$$

Látható, hogy az $[\mathcal{X}, \mathcal{P}]$ operátor korlátos, így a $\mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ térnek az $L^2(\mathbb{R})$-beli sűrű volta következtében elmondható, hogy van az egész térre való egyértelmű kiterjesztése. Következésképpen írhatjuk azt, hogy $[\mathcal{X}, \mathcal{P}] \subset \imath\hbar I$, ahonnan a

$$\Delta\mathfrak{X}\Delta\mathfrak{P} \geq \frac{\hbar}{2} \tag{2.1.7}$$

Heisenberg-féle határozatlansági reláció Kennard és Weyl által pontosított formája következik (vö. [10], [27]). Ha $\mathcal{X}$ és $\mathcal{P}$ értelmezési tartományát leszűkítjük a $\mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ sűrű altérre, akkor a fentiek nyomán elmondható, hogy (2.1.7)-ben pontosan akkor van egyenlőség, ha valamely $0 \neq \lambda \in \mathbb{R}$, ill. $\kappa \in \mathbb{R}$ esetén

$$(\mathcal{X} + \imath\lambda\mathcal{P})u = \kappa u, \qquad \text{azaz} \qquad xu(x) + \lambda\hbar u'(x) = \kappa u(x) \qquad (x \in \mathbb{R}).$$

Az iménti differenciálegyenletet megoldva

$$u(x) = c \exp\left(-\frac{(x-\kappa)^2}{2\lambda\hbar}\right) \qquad (x, c \in \mathbb{R})$$

adódik.

2.1.4. tétel (Schrödinger, [19]). Ha $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ (szeparábilis) Hilbert-tér, $A, B \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ önadjungált operátorok, és az $u \in \mathcal{H}$ vektorra

$$u \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B): \qquad Au \in \mathcal{D}(B), \quad Bu \in \mathcal{D}(A), \quad \|u\| = 1$$

teljesül, akkor a

$$\mathcal{C} := \sqrt{\left[\frac{1}{2}\langle\{A,B\}\rangle_u - \langle A\rangle_u\langle B\rangle_u\right]^2 + \left[\frac{1}{2}|\langle[A,B]\rangle_u|\right]^2} \tag{2.1.8}$$

számmal fennáll a

$$\Delta\mathfrak{A}\Delta\mathfrak{B} \geq |\mathcal{C}|$$

egyenlőtlenség.

Biz.

1. lépés. Felbontjuk az AB és a BA operátorokat szimmetrikus és antiszimmetrikus operátorok összegére. Ha

$$\mathcal{S} := \frac{1}{2}\{A,B\} = \frac{1}{2}(AB + BA) \qquad \text{és} \qquad \mathcal{A} := \frac{1}{2}[A,B] = \frac{1}{2}(AB - BA),$$

akkor nyilvánvaló, hogy

$$AB = \mathcal{S} + \mathcal{A} \qquad \text{és} \qquad BA = \mathcal{S} - \mathcal{A}.$$

2. lépés. Ha

$$\langle u, Au\rangle = 0 = \langle u, Bu\rangle, \qquad \text{azaz} \qquad \langle A\rangle_u = 0 = \langle B\rangle_u,$$

akkor az

$$a := Au \qquad \text{és} \qquad b := Bu$$

vektorokra alkalmazva a Cauchy-Bunyakovszkij-egyenlőtlenséget azt kapjuk, hogy

$$\langle a, b\rangle \cdot \langle b, a\rangle = |\langle a, b\rangle|^2 \leq \|a\|^2 \cdot \|b\|^2 = \langle a, a\rangle \cdot \langle b, b\rangle.$$

Mivel A és B önadjungált, ezért

$$\begin{array}{rclclcl} \langle a, a\rangle &=& \langle Au, Au\rangle &=& \langle u, A^2u\rangle &=& \langle A^2\rangle_u, \\ \langle b, b\rangle &=& \langle Bu, Bu\rangle &=& \langle u, B^2u\rangle &=& \langle B^2\rangle_u, \\ \langle a, b\rangle &=& \langle Au, Bu\rangle &=& \langle u, ABu\rangle &=& \langle AB\rangle_u, \end{array}$$

ennélfogva

$$\langle A^2\rangle_u \cdot \langle B^2\rangle_u \geq \langle AB\rangle_u \cdot \langle BA\rangle_u.$$

Így

$$\begin{aligned} \Delta\mathfrak{A}^2 \cdot \Delta\mathfrak{B}^2 &= \left(\left\langle A^2\right\rangle_u - \langle A\rangle_u^2\right) \cdot \left(\left\langle B^2\right\rangle_u - \langle B\rangle_u^2\right) = \\ &= \left\langle A^2\right\rangle_u \cdot \left\langle B^2\right\rangle_u - \left\langle A^2\right\rangle_u \cdot \langle B\rangle_u^2 - \langle A\rangle_u^2 \cdot \left\langle B^2\right\rangle_u + \langle A\rangle_u^2 \cdot \langle B\rangle_u^2 = \\ &= \left\langle A^2\right\rangle_u \cdot \left\langle B^2\right\rangle_u - \left\langle A^2\right\rangle_u \cdot 0 - 0 \cdot \left\langle B^2\right\rangle_u + 0 \cdot 0 \geq \\ &\geq \langle AB\rangle_u \cdot \langle BA\rangle_u. \end{aligned}$$

Az **1. lépés**beli felbontással így azt kapjuk, hogy

$$\Delta\mathfrak{A}^2 \cdot \Delta\mathfrak{B}^2 \geq \langle \mathcal{S} + \mathcal{A}\rangle_u \cdot \langle \mathcal{S} - \mathcal{A}\rangle_u = \langle \mathcal{S}\rangle_u^2 - \langle \mathcal{A}\rangle_u^2 = \frac{1}{4}\left(\langle\{A, B\}\rangle_u\right)^2 - \frac{1}{4}\left(\langle[A, B]\rangle_u\right)^2.$$

Lévén, hogy A és B önadjungált, ezért alkalmas $P \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ önadjungált operátor esetén $[A, B] = \imath P$, ahonnan

$$-\frac{1}{4}\left(\langle[A, B]\rangle_u\right)^2 = -\frac{1}{4}\left(\langle \imath P\rangle_u\right)^2 = \frac{1}{4}\left(\langle P\rangle_u\right)^2 = \frac{1}{4}\left|\langle[A, B]\rangle_u\right|^2$$

következik.

3. lépés. Ha

$$\langle A\rangle_u \neq 0 \qquad \text{és} \qquad \langle B\rangle_u \neq 0,$$

akkor az u vektor normáltsága következtében

$$\langle\widetilde{A}\rangle_u = \langle A - \langle A\rangle_u I\rangle_u = \langle A\rangle_u - \langle A\rangle_u \langle I\rangle_u = 0$$

és hasonlóan $\langle\widetilde{B}\rangle_u = 0$, ezért az előző lépés végén kapott egyenlőtlenséget alkalmazva az $\widetilde{A}$ és $\widetilde{B}$ szintén önadjungált operátorokra azt kapjuk, hogy egyrészt

$$[\widetilde{A}, \widetilde{B}] = [A, B], \qquad \text{ill.} \qquad \Delta\widetilde{\mathfrak{A}}^2 = \Delta\mathfrak{A}^2,$$

másrészt pedig

$$\begin{aligned} \langle\{\widetilde{A}, \widetilde{B}\}\rangle_u &= \left\langle AB + BA - 2\langle B\rangle_u A - 2\langle A\rangle_u B + 2\langle A\rangle_u\langle B\rangle_u I\right\rangle_u = \\ &= \langle AB\rangle_u + \langle BA\rangle_u - 2\langle B\rangle_u\langle A\rangle_u - 2\langle A\rangle_u\langle B\rangle_u + 2\langle A\rangle_u\langle B\rangle_u = \\ &= \langle\{A, B\}\rangle_u - 2\langle A\rangle_u\langle B\rangle_u. \end{aligned}$$

4. lépés. Végül, ha

$$\langle A\rangle_u \neq 0 \quad \text{és} \quad \langle B\rangle_u = 0 \qquad \text{vagy} \qquad \langle A\rangle_u = 0 \quad \text{és} \quad \langle B\rangle_u \neq 0,$$

akkor az előző lépés végén lévő becslésből $\langle\{\widetilde{A}, \widetilde{B}\}\rangle_u = \langle\{A, B\}\rangle_u$ adódik. ■

Megjegyezzük, hogy ha $u \in \mathcal{H}$, $\|u\| = 1$ sajátvektora az A vagy a B operátornak, akkor (2.1.8)-ban egyenlőség áll fenn, hiszen, ha pl. valamely $\lambda \in \mathbb{R}$ szám esetén $Au = \lambda u$, akkor nyilvánvalóan $\Delta\mathfrak{A} = 0$, ill. $\langle[A, B]\rangle_u = 0$, továbbá $\langle\{A, B\}\rangle_u = 2\langle A\rangle_u\langle B\rangle_u$, azaz

$$\langle u, ABu + BAu\rangle = 2\langle u, Au\rangle\langle u, Bu\rangle,$$

pontosan akkor teljesül, ha

$$\langle u, ABu\rangle + \langle u, B\lambda u\rangle = \boxed{\langle u, ABu + B\lambda u\rangle = 2\langle u, \lambda u\rangle\langle u, Bu\rangle} = 2\lambda\|u\|^2\langle u, Bu\rangle,$$

azaz

$$\langle\lambda u, Bu\rangle + \langle u, B\lambda u\rangle = \langle Au, Bu\rangle + \langle u, B\lambda u\rangle = \boxed{\langle u, ABu\rangle + \langle u, B\lambda u\rangle = 2\lambda\|u\|^2\langle u, Bu\rangle},$$

ami u normáltságának figyelembevételével nem más, mint

$$\lambda\langle u, Bu\rangle + \lambda\langle u, Bu\rangle = 2\lambda\langle u, Bu\rangle.$$

2.4. A Schrödinger-becslés egy változata

Az alábbiakban levezetjük dolgozatunk fő eredményét: a Schrödinger-féle határozatlansági relációbeli $\mathcal{C}$-t becsüljük meg felülről. Felhasználva, hogy A és B önadjungált operátorok, azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\langle[A, B]\rangle_u &= \langle u, [A, B]u\rangle = \langle u, AB\rangle - \langle u, BAu\rangle = \langle A^*u, Bu\rangle - \langle B^*u, Au\rangle = \\ &= \langle Au, Bu\rangle - \langle Bu, Au\rangle,\end{aligned}$$

így a háromszög-, ill. a Cauchy-Bunyakovszkij-egyenlőtlenség alkalmazásával azt kapjuk, hogy

$$|\langle[A, B]\rangle_u| \leq |\langle Au, Bu\rangle| + |\langle Bu, Au\rangle| \leq \|Au\| \cdot \|Bu\| + \|Bu\| \cdot \|Au\| = 2 \cdot \|Au\| \cdot \|Bu\|,$$

ill.

$$\begin{aligned}\langle\{A, B\}\rangle_u &= \langle u, \{A, B\}u\rangle = \langle u, AB\rangle + \langle u, BAu\rangle = \langle A^*u, Bu\rangle + \langle B^*u, Au\rangle = \\ &= \langle Au, Bu\rangle + \langle Bu, Au\rangle,\end{aligned}$$

következtében

$$|\langle\{A, B\}\rangle_u| \leq |\langle Au, Bu\rangle| + |\langle Bu, Au\rangle| \leq \|Au\| \cdot \|Bu\| + \|Bu\| \cdot \|Au\| = 2 \cdot \|Au\| \cdot \|Bu\|,$$

továbbá u normáltsága következtében

$$|\langle A\rangle_u\langle B\rangle_u| = |\langle u, Au\rangle \cdot \langle u, Bu\rangle| \leq \|u\|\cdot\|Au\|\cdot\|u\|\cdot\|Bu\| = \|u\|^2\cdot\|Au\|\cdot\|Bu\| = \|Au\|\cdot\|Bu\|.$$

Az A és B operátor önadjungáltságának következtében

$$\frac{1}{2}\langle\{A, B\}\rangle_u - \langle A\rangle_u\langle B\rangle_u \in \mathbb{R},$$

így a

$$\mathcal{C}^2 = \left|\frac{1}{2}\langle\{A, B\}\rangle_u - \langle A\rangle_u\langle B\rangle_u\right|^2 + \frac{1}{4}\,|\langle[A, B]\rangle_u|^2$$

mennyiség – az u vektor normáltságát figyelembe véve – a következő módon becsülhető felülről

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}^2 &\leq \left(\frac{1}{2}\,|\langle\{A, B\}\rangle_u| + |\langle A\rangle_u\langle B\rangle_u|\right)^2 + \frac{1}{4}\,|\langle[A, B]\rangle_u|^2 = \\
&= \frac{1}{4}|\langle\{A, B\}\rangle_u|^2 + |\langle\{A, B\}\rangle_u||\langle A\rangle_u\langle B\rangle_u| + |\langle A\rangle_u\langle B\rangle_u|^2 + \frac{1}{4}\,|\langle[A, B]\rangle_u|^2 \leq \\
&\leq \|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2 + 2\|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2\cdot\|u\|^2 + \|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2\cdot\|u\|^2 + \|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2 = \\
&= \|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2 + 2\|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2 + \|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2 + \|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2 = \\
&= 5\|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2.
\end{aligned}$$

Bebizonyítható tehát a

2.1.1. tétel. Ha $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ (szeparábilis) Hilbert-tér, $A, B \in \mathfrak{L}(\mathcal{H} \curvearrowright \mathcal{H})$ önadjungált operátorok, és az $u \in \mathcal{H}$ vektorra

$$u \in \mathcal{D}(A)\cap\mathcal{D}(B): \qquad Au \in \mathcal{D}(B), \quad Bu \in \mathcal{D}(A), \quad \|u\| = 1,$$

akkor a (2.1.8)-ban értelmezett $\mathcal{C}$ állandóra a

$$\mathcal{C} \leq \sqrt{5}\cdot\|Au\|\cdot\|Bu\|. \tag{2.1.9}$$

becslés teljesül.

Következésképpen a helyzet- és az impulzusoperátor felhasználásával az alábbi becslés kapható meg.

2.1.5. tétel. Legyen $f \in \mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})$: $\|f\|_{L^2} = 1$. Ekkor az

$$\langle f'\rangle_* := \langle f_*, f'\rangle_{L^2}, \qquad \text{ill.} \qquad \langle f_*, f, f'\rangle := \langle f_*, f\rangle_{L^2}\cdot\langle f, f'\rangle_{L^2}$$

rövidítéssel

$$\langle f, f_*, f'\rangle\,\{2\langle f'\rangle_* + 1 - \langle f, f_*, f'\rangle\} \leq \langle f'\rangle_*\,\{\langle f'\rangle_* + 1\} + 5\|f_*\|_{L^2}^2\cdot\|f'\|_{L^2}^2.$$

Biz. Ha

$$Af := f_*, \quad \text{ill.} \quad Bf := -\imath\hbar f' \qquad (f \in \mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})),$$

akkor

$$\|Af\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}} x^2 |f(x)|^2 \, dx$$

és

$$\|Bf\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}} -\imath\hbar f'(x) \overline{(-\imath\hbar f'(x))} \, dx = \hbar^2 \int_{\mathbb{R}} |f'(x)|^2 \, dx,$$

ill.

$$[A, B]f = \imath\hbar \left\{ (f_*)' - f_*' \right\} = \imath\hbar \left\{ f + f_*' - f_*' \right\} = \imath\hbar f \quad (f \in \mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R}))$$

és

$$\{A, B\}f = -\imath\hbar \left\{ f_*' + (f_*)' \right\} = -\imath\hbar \left\{ f_*' + f + f_*' \right\} = -\imath\hbar \left\{ 2f_*' + f \right\} \quad (f \in \mathfrak{C}_0^\infty(\mathbb{R})).$$

Így közvetlen számolással azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
(\langle\{A, B\}\rangle_f)^2 &= \left(\int_{\mathbb{R}} f(x) \overline{(-\imath\hbar(2xf'(x) + f(x))} \, dx \right)^2 = \left(\int_{\mathbb{R}} f(x) \imath\hbar \overline{(2xf'(x) + f(x))} \, dx \right)^2 = \\
&= -\hbar^2 \left(\int_{\mathbb{R}} xf(x) 2\overline{f'(x)} \, dx + \int_{\mathbb{R}} |f|^2 \, dx \right)^2 = \\
&= -\hbar^2 \left\{ \left(2 \int_{\mathbb{R}} xf(x) \overline{f'(x)} \, dx \right)^2 + 4 \int_{\mathbb{R}} xf(x) \overline{f'(x)} \, dx + 1 \right\}
\end{aligned}$$

és

$$\begin{aligned}
\langle\{A, B\}\rangle_f \langle A\rangle_f \langle B\rangle_f &= \imath\hbar \left(2 \int_{\mathbb{R}} xf(x) \overline{f'(x)} \, dx + \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 \, dx \right) \cdot \\
&\quad \cdot \left(\int_{\mathbb{R}} x|f(x)|^2 \, dx \right) \left(\int_{\mathbb{R}} \imath\hbar f(x) \overline{f'(x)} \, dx \right) = \\
&= -\hbar^2 \left\{ 2 \left(\int_{\mathbb{R}} xf(x) \overline{f'(x)} \, dx \right) \cdot \left(\int_{\mathbb{R}} x|f(x)|^2 \, dx \right) \left(\int_{\mathbb{R}} f(x) \overline{f'(x)} \, dx \right) + \right. \\
&\quad \left. + \left(\int_{\mathbb{R}} x|f(x)|^2 \, dx \right) \left(\int_{\mathbb{R}} f(x) \overline{f'(x)} \, dx \right) \right\},
\end{aligned}$$

$$\langle A\rangle_f^2 \langle B\rangle_f^2 = \left(\int_{\mathbb{R}} x|f(x)|^2 \, dx \right)^2 \left(\int_{\mathbb{R}} \imath\hbar f(x) \overline{f'(x)} \, dx \right)^2 = -\hbar^2 \left(\int_{\mathbb{R}} x|f(x)|^2 \, dx \right)^2 \left(\int_{\mathbb{R}} f(x) \overline{f'(x)} \, dx \right)^2$$

ill.

$$|\langle[A, B]\rangle_f|^2 = \left| \int_{\mathbb{R}} f(x) \overline{(\imath\hbar f(x))} \, dx \right|^2 = \left| -\imath\hbar \int_{\mathbb{R}} f(x) \overline{f(x)} \, dx \right|^2 = \hbar^2 \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 \, dx = \hbar^2.$$

Így $\mathcal{C}$-be helyettesítve a kívánt állítást kapjuk. ■

Az alábbiakban megvizsgáljuk, hogy mely feltétel teljesülése esetén kapunk a Schrödinger-becslésnél nagyobb alsó korlátot. Világos, hogy ez pontosan akkor teljesül, ha

$$\sqrt{5}\cdot\|Au\|\cdot\|Bu\|\le\Delta\mathfrak{A}\cdot\Delta\mathfrak{B},\qquad\text{azaz}\qquad 5\|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2\le\Delta\mathfrak{A}^2\cdot\Delta\mathfrak{B}^2.$$

Az u vektor normáltságát és a

$$\Delta\mathfrak{A}^2=\langle A^2\rangle_u-\langle A\rangle_u^2$$

egyenlőséget figyelembe véve ekkor

$$5\cdot\|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2\le\left\{\langle A^2\rangle_u-\langle A\rangle_u^2\right\}\cdot\left\{\langle B^2\rangle_u-\langle B\rangle_u^2\right\},$$

ill.

$$5\cdot\|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2\le\langle A^2\rangle_u\cdot\langle B^2\rangle_u-\langle A^2\rangle_u\cdot\langle B\rangle_u^2-\langle A\rangle_u^2\cdot\langle B^2\rangle_u+\langle A\rangle_u^2\cdot\langle B\rangle_u^2$$

adódik. Mivel A önadjungált, ezért

$$\langle A^2\rangle_u=\|Au\|^2,$$

így a fenti egyenlőtlenség

$$5\cdot\|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2\le\|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2-\|Au\|^2\cdot\langle B\rangle_u^2-\langle A\rangle_u^2\cdot\|Bu\|^2+\langle A\rangle_u^2\cdot\langle B\rangle_u^2,$$

ill.

$$4\cdot\|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2\le-\|Au\|^2\cdot\langle B\rangle_u^2-\langle A\rangle_u^2\cdot\|Bu\|^2+\langle A\rangle_u^2\cdot\langle B\rangle_u^2\tag{2.1.10}$$

alakú.

2.1.2. tétel. Legyen $(\mathcal{H},\langle\cdot,\cdot\rangle)$ (szeparábilis) Hilbert-tér, $A, B\in\mathfrak{L}(\mathcal{H}\curvearrowright\mathcal{H})$ önadjungált operátor, és tegyük fel, hogy az $u\in\mathcal{H}$ vektorra

$$u\in\mathcal{D}(A)\cap\mathcal{D}(B):\qquad Au\in\mathcal{D}(B),\quad Bu\in\mathcal{D}(A),\quad \|u\|=1.$$

Ha fennáll a (2.1.10) egyenlőtlenség, akkor a szórások szorzatára a

$$\sqrt{5}\|Au\|\cdot\|Bu\|\le\Delta\mathfrak{A}\cdot\Delta\mathfrak{B}$$

becslés adható.

Megjegyezzük, hogy az

$$\|Au\|^2\ll\langle A\rangle_u^2\qquad\text{és}\qquad\|Bu\|^2\ll\langle B\rangle_u^2$$

esetben fennáll az (2.1.10) egyenlőtlenség, ugyanis (2.1.10) azzal egyenértékű, hogy

$$0\le-4\cdot\|Au\|^2\cdot\|Bu\|^2-\|Au\|^2\cdot\langle B\rangle_u^2-\langle A\rangle_u^2\cdot\|Bu\|^2+\langle A\rangle_u^2\cdot\langle B\rangle_u^2,\tag{2.1.11}$$

ami az

$$x:=\|Au\|,\qquad y:=\|Bu\|,\qquad w:=\langle A\rangle_u=\langle u,Au\rangle,\qquad z:=\langle B\rangle_u=\langle u,Bu\rangle$$

jelölések bevezetésével (2.1.11) nem más, mint

$$0\le-4\cdot x^2\cdot y^2-x^2\cdot z^2-w^2\cdot y^2+w^2\cdot z^2,$$

ami elegendően nagy w^2-x^2 és z^2-y^2 esetén nyilvánvalóan teljesül.

Irodalomjegyzék

[1] ANGELOW, A.; BATONI, M. C.: *About Heisenberg Uncertainty Relation (by E. Schrödinger).*, Bulg. J. Phys. **26**(5-6) (1999), 193–203.

[2] GASQUET, C.; WITOMSKI, P.: *Fourier Analysis and Applications*, Springer, 1999.

[3] FEICHTINGER, H. G.; STOHMER, TH.: *Advances in Gábor Analysis*, Springer, 2003.

[4] GOH, S.S.; MICCHELLI, CH. A.: *Uncertainty principles in Hilbert spaces.*, J. Fourier Anal. Appl. **8**(4) (2002), 335–373.

[5] HAROSKE, D.D.; TRIEBEL, H.: *Distributions, Sobolev Spaces, Elliptic Equations*, European Mathematical Society, 2008.

[6] HEISENBERG, W.: *Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik*, Zeitschrift für. Physik **43**(3-4) (1927), 172–198.

[7] HELMBERG, G.: *Introduction to Spectral Theory in Hilbert Space*, North-Holland Publishing Company, 1969.

[8] HEUSER, H.: *Funktionalanalysis*, B.G. Teubner Stuttgart, 1992.

[9] JAUCH, J. M.: *Foundations of Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, New York, 1968.

[10] KENNARD, E.: *Zur Quantenmechanik einfacher Bewegungstypen*, Zeitschrift für. Physik **44**(3-4) (1927), 326–352.

[11] KOVÁCS, S.: *Funkcionálanalízis feladatokban, egyetemi jegyzet*, Budapest, 2013.
ISBN: 978-963-284-445-9
(http://numanal.inf.elte.hu/~alex/hu/anyag/PROGINF/FunkAnal/FunkAnalKS.pdf)

[12] KOVÁCS, S.: *Alkalmazott analízis gyakorlat*, Budapest, 2018.
ISBN 978-963-489-032-4
(http://numanal.inf.elte.hu/~alex/AlkAnalGyak/AlkAnalGyakKS.pdf)

[13] PERINA, J.; HRADIL, Z.; JURCO, B.: *Quantum Optics and Fundamentals of Physics*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1994.

[14] PESLAK, J.: *Comparison of classical and quantum mechanical uncertainties*, Am. J. Phys. 47 (1979) doi: 10.1119/1.11661.

[15] RÉNYI, A.: *Valószínűségszámítás*, Tankönyvkiadó, Budapest, 1954.

[16] RIGOLIN, G.: *A simple derivation of the Schrödinger uncertainty relation*, Eur. J. Phys. 36 (2015) 065007 (3pp).

[17] ROBERTSON, H. P.: *The uncertainty principle.*, Physical Review **34** (1929), 163–163.

[18] SCHRÖCK, F.; FRANKLIN E.: *Quantum mechnaics on phase space*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996.

[19] SCHRÖDINGER, E.: *Zum Heisenbergschen Unschärfeprinzip.*, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften, Physikalisch-mathematische Klasse **14** (1930), 296–303.

[20] SIMON, L.; BADERKO, E. A.: *Másodrendű lineáris parciális differenciálegyenletek*, Tankönyvkiadó, Budapest, 1983.

[21] SIMON, P.: *A funkcionálanalízis alapjai*, ELTE Eötvös Kiadó, 2017.

[22] SIMON, P.: *Fourier-transzformáció*, ELTE Eötvös Kiadó, 2019.

[23] STEIN, E.M.; SHAKARCHI, R.: *Fourier Analysis: an Introduction*, Princeton University Press, 2003.

[24] YOSIDA, K.: *Functional analysis*, Springer Verlag, 1980.

[25] WIENER, N.: *I Am a Mathematician*, MIT Press, Cambridge 1956.

[26] WEISZ, F.: *Wavelet- és Gábor-transzformációk*, egyetemi jegyzet, Budapest, 2014.

[27] WEYL, H.: *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, Hirzel, 1928.

[28] ZEIDLER, E.: *Applied Functional Analysis, Applications to Mathematical Physics*, Springer Verlag, 1995.