Petz Dénes

Lineáris operátorok és a kvantummechanika matematikai alapjai

(készülőben lévő kézirat, ideiglenes oktatási segédanyag)

1999. március

Első fejezet

1. Hilbert-terek és korlátos operátoraik

Az absztrakt Hilbert-tér fogalma a kvantummechanikával egyidőben alakult ki, jelentős részben Neumann János munkáiban. A Hilber-tér lényeges eleme a belső szorzat, ami a vektorok skaláris szorzatára emlékeztet. A Hilbert-tér maga az euklideszi tér végtelen dimenziós általánosítása. A belső szorzat meghatároz egy metrikát a téren, az euklideszi esethez hasonlóan.

1.1 Nevezetes Hilbert-terek és nevezetes bázisok

Legyen $\mathcal{H}$ egy lineáris tér a komplex test felett. A kétváltozós $\langle\cdot\,,\cdot\rangle : \mathcal{H}\times\mathcal{H}\to\mathbb{C}$ függvényt *belső szorzatnak* nevezzük, ha

(1) $\langle x+y, z\rangle = \langle x, z\rangle + \langle y, z\rangle$ $(x, y, z \in \mathcal{H})$

(2) $\langle \lambda x, y\rangle = \overline{\lambda}\langle x, y\rangle$ $(\lambda\in\mathbb{C},\ x, y\in\mathcal{H})$

(3) $\langle x, y\rangle = \overline{\langle y, x\rangle}$ $(x, y\in\mathcal{H})$

(4) $\langle x, x\rangle \geq 0$ bármilyen $x\in\mathcal{H}$ esetén és az egyenlőség csak $x = 0$ mellett áll fenn.

Az (1–2) tulajdonságok azt jelentik, hogy a belső szorzat konjugált lineáris az első változóban. A (3) tulajdonság maga után vonja, hogy a második változóban pedig lineáris. A belső szorzat a

$$\|x\| := \sqrt{\langle x, x\rangle}$$

formulával normát határoz meg. Az

$$\|x+y\| \leq \|x\| + \|y\|$$

háromszögegyenlőtlenség teljesülése a belső szorzat $\langle x+ty, x+ty\rangle \geq 0$ tulajdonságából következik, $t\in\mathbb{R}$. Ha $\mathcal{H}$ teljes erre a normából adódó

$$d(x, y) =: \|x-y\|$$

távolságra nézve, akkor a $(\mathcal{H}, \langle\cdot\,,\cdot\rangle)$ párt *Hilbert-térnek* nevezzük. Ha úgy gondoljuk, hogy világos mi a belső szorzat, akkor rendszerint $\mathcal{H}$ Hilbert-térről beszélünk.

1. példa: A legegyszerűbb példa a komlex szám n-sek tere: $\mathbb{C}^n$. Itt a belső szorzat $\langle x, y\rangle = \sum_{i=1}^n \bar{x}_i y_i$ nem más mint a vektorok szokásos skaláris szorzata.

□

2. példa: Legyen (X, B, μ) egy mértéktér és $L^2(\mu)$ a megfelelő L^2-tér, a négyzetesen integrálható függvények tere. Az

$$\langle f, g\rangle = \int \overline{f(x)} g(x)\, d\mu(x)$$

belső szorzattal egy Hilbert-térhez jutunk. A belső szorzat tulajdonságai teljesülnek, a tér teljességét pedig az L^p-terek általános elméletéből tudjuk.

$\square$

Ha $\langle x, y\rangle = 0$ egy Hilbert-tér vektoraira, akkor x-et és y-t *ortogonálisnak* nevezzük és az $x \perp y$ jelölést használjuk. Ha $H \subset \mathcal{H}$, akkor $H^{\perp} := \{x \in \mathcal{H} : x \perp h$ minden $h \in H$-ra $\}$. Bármilyen $H \subset \mathcal{H}$ halmazra $H^{\perp}$ zárt altér. Vektorok egy $\{x_i\}$ családját *ortonormáltnak* nevezzük, ha $\langle x_i, x_i\rangle = 1$ és $\langle x_i, x_j\rangle = 0$, ha $i \neq j$. A maximális ortonormált rendszer neve *bázis*. A bázis számossága a tér *dimenziója*. (Bármely két bázis ugyanolyan számosságú.)

3. példa: $\mathbb{C}^n$-ben a szokásos bázis

$$\begin{aligned} e_1 &= (1,0,0,\dots,0,0), \\ e_2 &= (0,1,0,\dots,0,0), \\ \dots & \quad \dots \\ e_{n-1} &= (0,0,0,\dots,1,0), \\ e_n &= (0,0,0,\dots,0,1). \end{aligned}$$

$\mathbb{C}^n$ végtelen dimenziós analogonja az $\ell^2(\mathbb{N})$ tér. Ez azokból az $x = (x_1, x_2, \dots)$ komplex számsorozatokból áll, amelyekre $\sum_n |x_n|^2$ véges.

$$\langle x, x'\rangle := \sum_n \bar{x}_n x'_n$$

A tér *kanonikus bázisa* a

$$\delta_n = (0,0,\dots,1,0,\dots) \qquad \text{(az egyes az } n\text{–edik helyen van)}$$

vektorokból áll, $n \in \mathbb{N}$. Gondoljuk meg, hogy $\{\delta_n : n \in \mathbb{N}\}$. valóban bázis. A belső szorzás értelmezése szerint $\langle \delta_n, \delta_m\rangle = 0$, ha $n \neq m$ és $\|\delta_n\| = 1$. Tehát a δ_n vektorok egy ortonormált rendszert képeznek, és azt kell még megmutatni, hogy ez maximális, azaz nincs olyan $x = (x_1, x_2, \dots)$ egységvektor, amely minden δ_n-re merőleges. Mivel $\langle \delta_n, x\rangle = x_n$, csak a 0 vektor lehet merőleges mindegyik δ_n vektorra.

Maga Hilbert egyébként az $\ell^2(\mathbb{N})$ teret tekintette "Hilbert-térként", és sokáig a Hilbert-féle koordináta tér elnevezés is használatos volt a véges dimenziós euklideszi koordináta térrel való hasonlóságot hangsúlyozandó. A fenti absztrakt értelmezés valójában Neumann János érdeme.

Legyen $H := \{x \in \ell^2(\mathbb{N}) : x_n = 0$ ha n páros $\}$ és legyen $H_0 := \{x \in H : x_n = 0$ véges sok n kivételével $\}$. Ekkor

$$H_0^{\perp} = H^{\perp} = \{x \in \ell^2(\mathbb{N}) : x_n = 0 \text{ ha } n \text{ páratlan}\}\,.$$

A példában $H^{\perp\perp} = H$, de $H_0^{\perp\perp} \neq H_0$.

$\square$

4. példa: Ha G tetszőleges megszámlálható halmaz, akkor $\ell^2(G)$ jelöli azoknak a G-n értelmezett f függvényeknek a terét, amelyekre

$$\sum_{g \in G} |f(g)|^2 < \infty.$$

$\ell^2(G)$-n a belső szorzat $\ell^2(\mathbb{N})$ mintájára értelmezhető, és egy Hilbert-térhez jutunk.

$\square$

Bizonyos függvényterekben polinomokból álló bázist lehet kontsruálni. Erről szólnak a további példák, amelyek egyben bevezetik a leggyakrabban használt *ortogonális polinomrendszereket*, a Legendre-, a Hermite- és a Laguerre-polinomokat.

5. példa: Az $L^2[-1,1]$ térben a folytonos függvények sűrű halmazt alkotnak. Valóban, az egyik lehetséges út, amin eljuthatunk $L^2[-1,1]$-hez az folytonos függvények $C[-1,1]$ terén keresztül vezet. $f, g \in C[-1,1]$-re értelmezzük az

$$\langle f, g\rangle = \int \overline{f(x)} g(x)\, dx$$

belső szorzást egyszerű Riemann-integrál segítségével, majd a

$$\rho(f,g) := \sqrt{\langle f-g, f-g\rangle}$$

távolsággal kapott metrikus tér teljes burkát vesszük. Ez lesz $L^2[-1,1]$. A teljes burokkal való értelmezés miatt $C[-1,1]$ sűrű $L^2[-1,1]$-ben. Ugyanakkor a polinomok sűrű halmazt alkotnak a Weierstrass-féle approximációs tétel szerint a $C[-1,1]$-ben az egyenletes konvergenciára nézve: Ha $f \in C[-1,1]$, akkor van olyan p_n polinom sorozat, amelyre

$$\sup\{|f(x)-p_n(x)| : -1 \le x \le 1\} \to 0\,.$$

Azonban

$$\rho(f, p_n) = \sqrt{\int_{-1}^{1} |f(x)-p_n(x)|^2\, dx} \le \sqrt{2 \sup\{|f(x)-p_n(x)| : -1 \le x \le 1\}},$$

ezért $p_n \to f$ a Hilbert-térben. Ez azt jelenti, hogy a polinomok sűrű halmazt alkotnak a $C[-1,1]$-ben a Hilbert-tér metrikájára nézve is. Végeredményben a polinomok sűrűn vannak $L^2[-1,1]$-ben.

Az $1, x, x^2, \ldots$ sorozatra alkalmazhatjuk a Gram-Schmidt-féle ortogonalizációs eljárást: Megkeressük az a lineáris $x + a_1$ polinomot, amely merőleges $p_0(x) := 1$-re, ez maga $p_1(x) := x$ $(a_1 = 0)$. Ezután meghatározzuk azt a $x^2 + a_2 x + b_2$ kvadratikus polinomot, amely p_0-ra és p_1-re is ortogonális, és így tovább. Polinomoknak egy olyan p_n ortogonális sorozatához jutunk, amelynek n-edik tagja egy n-edfokú polinom. Mivel nincs olyan függvény, amely minden polinomra ortogonális, ez a rendszer alkalmas normálással egy bázis, amelynek elemei egy szorzófaktortól eltekintve a *Legendre-féle polinomok*. Az n-edfokú Legendre-polinom a

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2-1)^n \tag{1.1}$$

képlettel adható meg. A főegyüttható

$$\frac{n!}{2^n} \binom{2n}{n},$$

és ez az a szorzótényező, amiben P_n ś a főegyütthatóra normált p_n különböznek.

$\|P_n(x)\| \neq 1$, ugyanis

$$\int_{-1}^{1} |P_n(x)|^2\, dx = \frac{2}{2n+1}\,. \tag{1.2}$$

A fenti eljárás általánosítható. Induljunk ki a

$$(1-x^2)^{m/2} x^j \qquad (j = 0, 1, 2, \ldots)$$

sorozatból, aminek lineáris burka sűrű $L^2(-1,1)$-ben. Ha ezt a sorozatot ortogonalizáljuk, akkor a

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{1}{2^n n!} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n \tag{1.3}$$

függvényekhez jutunk. Rögzített m-re n értékei $m, m+1, m+2, \ldots$. Világos módon $m = 0$ adja vissza a Legendre-polinomokat. $P_n^m(x)$ neve *asszociált Legendre-függvény.* Tetszőleges $m \in \mathbb{Z}^+$-ra

$$\left\{ \left(\frac{2n+1}{2} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}\right)^{1/2} P_n^m(x) \quad : \quad n = m, m+1, m+2, \ldots \right\} \tag{1.4}$$

egy bázis.

Az asszociált Legendre-függvény $P_n^m(x)$ kielégíti az

$$(1-x^2)f'' - 2xf' + \left(n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right) f = 0 \tag{1.5}$$

differenciálegyenletet. $m = 0$-át véve kapjuk a Legendre-féle polinomok (Legendre-féle) differenciálegyenletét:

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + n(n+1)y = 0\,. \tag{1.6}$$

Ez egy másodrendű differenciálegyenlet, amelynek két lineárisan függetlem megoldsa van. Azonban az egyetlen polinom megoldás a a Legendre-féle polinom $P_n(x)$.

□

6. példa: Definiáljunk egy μ mértéket a számegyenesen a

$$\mu(B) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_B e^{-x^2}\, dx$$

képlettel. (μ-t *Gauss-mértéknek* hívják, és csak normáló tényezőben különbözik a valószínűségszámításban megszokott normális eloszlástól.) Mivel a mérték e^{-x^2} sűrűségfüggvénye gyorsan tart 0-hoz $\pm\infty$-ben, a polinomok sűrűn vannak az $L^2(\mu)$ térben. Most is alkalmazhatjuk az $1, x, x^2, x^3, \ldots$ sorozatra a Gram-Schmidt-féle ortogonalizációt, és egy ortogonális polinomrendszerhez jutunk.

Legyen

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}. \tag{1.7}$$

Teljes indukcióval könnyen igazolható, hogy $H_n(x)$ egy n-edfokú polinom, amelynek főegyütthatója 2^n. (1.7)-et differenciálva kapjuk a

$$H_n'(x) = 2xH_n(x) - H_{n+1}(x) \tag{1.8}$$

egyenletet. $f(x) := e^{-x^2}$ ismételt differenciálásával

$$\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} f(x) + 2x\frac{d^n}{dx^n} f(x) + 2n\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} f(x) = 0\,.$$

Ezt megszorozva a $(-1)^n e^{x^2}$ faktorral azt kapjuk, hogy

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0\,, \tag{1.9}$$

ami lehetővé teszi a $H_n(x)$ polinomok rekurzív kiszámolását. A rendelkezésre álló egyenletek kombinálásával kapjuk még a

$$H_n'(x) = 2nH_{n-1}(x)\,, \tag{1.10}$$

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0 \tag{1.11}$$

további összefüggéseket. Ismételt parciális integrálással jutunk a

$$\int e^{-x^2} H_n(x)v(x)\, dx = \int e^{-x^2} \frac{d^n}{dx^n} v(x)\, dx$$

formulához, amely bármilyen $v(x)$ polinomra érvényes. Nevezetesen, ha $v(x)$ fokszáma n-nél kisebb, akkor a jobb oldalon 0 áll, tehát $H_n(x)$ merőleges minden nála alacsonyabb fokszámú polinomra, azaz a $H_0(x), H_1(x), \ldots, H_{n-1}(x)$ polinomokra is. Ha $v(x)$ helyébe $H_n(x)$-et teszünk, akkor az adódik, hogy

$$\int e^{-x^2} H_n^2(x)\, dx = 2^n n! \int e^{-x^2}\, dx = 2^n n! \sqrt{\pi}\,.$$

Ezért a normalizált

$$\tilde{H}_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) \tag{1.12}$$

Hermite-féle polinomok az $L^2(\mu)$ tér bázisát alkotják.

□

7. példa: A polinomok sűrűn vannak az $L^2(\mathbb{R}^+, e^{-x}\,dx)$ térben, ezért a korábbiakhoz hasonlóan van a térnek polinomokból álló bázisa.

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$$

n-edfokú polinom, amelynek főegyütthatója $(-1)^n/n!$, neve *Laguerre-polinom.*

A továbbiakban az általánosabb $L^2(\mathbb{R}^+, e^{-x} x^\alpha\,dx)$ teret tekintjük, ahol $\alpha > -1$ egy paraméter. Az

$$x\frac{d^2 v}{dx^2} + (\alpha + 1 - x)\frac{dv}{dx} + nv = 0 \tag{1.13}$$

másodrendű differenciálegyenletnek $n \in \mathbb{N}$ esetén egyetlen polinom megoldása van, ez

$$L_n^{(\alpha)}(x) := \sum_{j=0}^{n} \binom{n+\alpha}{n-j} \frac{(-x)^j}{j!} \,,$$

ami a közönséges Laguerre-polinomok általánosítása, *asszociált Laguerre-polinomoknak* is hívják őket.

Mivel

$$\frac{d}{dx} L_n^{(\alpha)}(x) = -L_{n-1}^{(\alpha+1)}(x) \,,$$

az α paraméter egesz értékeire az asszociált polinomok a közönséges polinomok deriváltjai.

Az asszociált Laguerre polinomok normáját az

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha (L_n^{(\alpha)}(x))^2\,dx = \Gamma(\alpha+1)\binom{n+1}{n} \tag{1.14}$$

integrál adja meg.

A Laguerre-polinomokból az $L^2(\mathbb{R}^+)$ térben is kaphatunk egy bázist:

$$\Lambda_n^{(\alpha)} := L_n^{(\alpha)}(x) e^{-x/2} x^{\alpha/2} \Gamma(\alpha+1)^{-1/2} \binom{n+\alpha}{n}^{-1/2} . \tag{1.15}$$

Az ortogonalitási relációkat felírva, láthatjuk, hogy azok $L_n^{(\alpha)}(x)$ ortogonalitására mennek vissza az $L^2(\mathbb{R}^+, e^{-x} x^\alpha\,dx)$ térben.

□

A három polinomcsaládra vonatkozó képletek meglehetősen különbözőek, de némi hasonlóság is felfedezhető. Nevezetesen, van egy-egy másorendű differenciálegyenlet, egy-egy generátorfüggvény, amiből ismételt differenciálással a polinomok megkaphatók, és egy-egy rekurziós formula, amit csak a Hermite-polinomokra adtunk meg.

1.2 Bázis szerinti kifejtés

Egy Hilbert-tér bármely vektora sorba fejthető egy adott bázis szerint, és így a vektor az együtthatók sorozatával adható meg. A bázis koorditátarendszerként használható.

1. tétel: (Bessel-féle azonosság) *Legyen $\{x_n\}_{n=1}^N$ ortonormált rendszer a Hilbert-térben és x egy tetszőleges vektor. Ekkor*

$$\|x\|^2 = \sum_{n=1}^{N} |\langle x, x_n\rangle|^2 + \left\| x - \sum_{n=1}^{N} \langle x_n, x\rangle x_n \right\|^2 .$$

Bizonyítás: Induljunk ki a következő azonosságból:

$$x = \sum_{n=1}^{N} \langle x_n, x\rangle x_n + \left(x - \sum_{n=1}^{N} \langle x_n, x\rangle x_n \right) .$$

Ellenőrizzük, hogy a két tag merőleges egymásra, és ennek figyelembevételével számítsuk ki az $\langle x, x\rangle$ belső szorzatot.

$\square$

Az előző tétel feltételei mellett

$$\|x\|^2 \geq \sum_{n=1}^{N} |\langle x, x_n\rangle|^2 , \tag{1.16}$$

ami a *Bessel-egyenlőtlenség.*

2. tétel: *Legyen $\{x_i : i \in I\}$ egy bázisa a $\mathcal{H}$ Hilbert-térnek. Ekkor bármilyen $x \in \mathcal{H}$ vektor előáll*

$$x = \sum_i \langle x_i, x\rangle x_i$$

konvergens sor alakjában, és

$$\|x\|^2 = \sum_i |\langle x_i, x\rangle|^2 .$$

(A $\sum_i \langle x_i, x\rangle x_i$ sor x-nek az adott bázis szerinti kifejtése.)

Bizonyítás: Ha I véges halmaz, akkor az állítás következik az előző tételből. A lényeges eset $|I| = \infty$.

Tekintetbe kell vennünk azt a lehetőséget, hogy az I halmaz esetleg nem megszámlálható. A (1.16) egyenlőtlenség szerint

$$\sup\Big\{ \sum_{i\in I_0} |\langle x_i, x\rangle|^2 : I_0 \subset I \text{ véges}\Big\} = \sup\Big\{ \sum_{i\in I_0} |\langle x_i, x\rangle|^2 : I_0 \subset I \text{ megszámlálható}\Big\} < \infty$$

és $J := \{i \in I : |\langle x_i, x\rangle|^2 \neq 0\}$ egy megszámlálható halmaz. Ha szükséges, akkor $\mathcal{H}$ egy zárt alterére áttérve feltételezhetjük, hogy I megszámlálható, $I = \mathbb{N}$.

A fenti okoskodás azt is adta, hogy $\sum_i |\langle x_i, x\rangle|^2 < \infty$. Legyen $y_n = \sum_{i=1}^n \langle x_i, x\rangle x_i$. Ekkor

$$\|y_n - y_m\|^2 = \Big\| \sum_{i=m+1}^{n} \langle x_i, x\rangle x_i \Big\|^2 = \sum_{i=m+1}^{n} |\langle x_i, x\rangle|^2$$

ha $n > m$. Ez mutatja, hogy (y_n) Cauchy-sorozat, létezik egy y limesze. Mivel

$$\langle x - y, x_i \rangle = \lim_n \langle x - y_n, x_i \rangle = 0\,,$$

$x = y$. Ebből persze az is adódik, hogy $\|x\|^2 = \lim_n \|y_n\|^2 = \sum_i |\langle x_i, x \rangle|^2$.

□

A tétel mutatja, hogy a bázis jelentősége többek között abban van, hogy a tér tetszőleges vektora *sorbafejthető egy adott bázis szerint.* Ha van megszámlálható bázisa a térnek, akkor minden vektorhoz hozzárendelhetjük a bázis szerinti kifejtés együtthatóinak sorozatát. Ez a sorozat az négyzetesen összegezhető, tehát az $\ell^2(\mathbb{N})$ tér egy eleme. Így kapunk egy transzformációt az adott Hilber-térből $\ell^2(\mathbb{N})$-be, ami ráképezés is. Minden megszámlálható bázissal rendelkező, *szeparábilisnak* mondott, Hilbert-tér lényeg'eben azonos az $\ell^2(\mathbb{N})$ térrel. Ez a tény azonban nem teszi feleslegessé az egyéb terek használatát.

8. példa: Az $L^2(0,\pi)$ térben bázist alkotnak az

$$f_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin nx \tag{1.17}$$

függvények, és ennek megfelelően minden $g \in L^2(0,\pi)$ függvény $g = \sum_n a_n f_n$ ortogonális sorba fejthető. A sorfejtés L^2-normában konvergál az előző tétel szerint. (A Fourier-sorok elméletéből tudjuk azonban, hogy például egy folytonos g esetében a sorfejtés pontonként is konvergál.)

□

1.3 A Hilbert-tér geometriája

A következő lemma bizonyításában fel fogjuk használni a *paralelogramma azonosságot*:

$$\|x - y\|^2 + \|x + y\|^2 = 2\|x\|^2 + 2\|y\|^2\,, \tag{1.18}$$

ami egyszerűen következik, ha a normanégyzeteket kifejezzük a belső szorzat segítségével.

1. lemma: *(***Riesz-lemma***) Legyen K egy konvex zárt halmaz a $\mathcal{H}$ Hilbert-térben, $x \in \mathcal{H}$ és*

$$d = \inf\{\|x - y\| \;:\; y \in K\}\,.$$

Ekkor létezik egy és csakis egy $x_0 \in K$ pont, amelyre $\|x - x_0\| = d$. (Azt mondjuk, hogy x_0 K-nak x-hez legközelebb eső pontja.)

Bizonyítás: Feltehető, hogy $d > 0$. Válasszunk ki egy x_n sorozatot a K halmazból, amelyre $\lim_{n\to\infty} \|x - x_n\| = d$. Ekkor

$$\begin{aligned}
\|x_n - x_m\|^2 &= \|(x_n - x) - (x_m - x)\|^2 \\
&= 2\|x_n - x\|^2 + 2\|x_m - x\|^2 - \|(x_n - x) + (x_m - x)\|^2 \\
&= 2\|x_n - x\|^2 + 2\|x_m - x\|^2 - 4\left\|\frac{x_n + x_m}{2} - x\right\|^2 \\
&\le 2\|x_n - x\|^2 + 2\|x_m - x\|^2 - 4d^2\,.
\end{aligned}$$

(Itt a második egyenlőség a paralelogramma azonosság alkalmazása, az utolsó egyenlőtlenségben pedig azt használjuk, hogy $(x_n + x_m)/2 \in K$ a konvexitás miatt, és így $\|(x_n + x_m)/2 - x\| \ge d$.)

Becslésünk azt mutatja, hogy (x_n) egy Cauchy-sorozat, aminek van egy x_0 határértéke. Mivel K zárt halmaz, $x_0 \in K$ és nyilván $\|x - x_0\| = d$. Ezzel x_0 létezését beláttuk. Két különböző "legközelebbi" pont nem lehet, mert akkor az őket összekötő szakasz felezőpontja x-től d-nél kisebb távolságra lenne. (Ismét paralelogramma azonosság!)

$\square$

3. tétel: (Projekció tétel) *Legyen $\mathcal{M}$ a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér zárt altere. Ekkor egy tetszőleges $x \in \mathcal{H}$ vektor felírható $x = x_0 + y$ alakban úgy, hogy $x_0 \in \mathcal{M}$ és $y \perp \mathcal{M}$.*

Bizonyítás: Legyen x_0 az x-hez legközelebb eső pontja $\mathcal{M}$-nek, és $d = \|x - x_0\|$. ($\mathcal{M}$-re alkalmazzuk a megelőző lemmát.) Legyen $y = x - x_0$. Ekkor $y \perp \mathcal{M}$ igazolása van hátra. Ha $w \in \mathcal{M}$ és $t \in \mathbb{R}$, akkor

$$d^2 \leq \|x - (x_0 + tw)\|^2 = d^2 + t^2\|w\|^2 - 2t \operatorname{Re}\langle y, w\rangle \,.$$

Minden $t \in \mathbb{R}$ ez csak akkor teljesül, ha

$$\operatorname{Re}\langle y, w\rangle = 0 \,.$$

Mivel ez tetszőleges $w \in \mathcal{M}$ esetén fennáll, $y \perp \mathcal{M}$.

$\square$

Azt a hozzárendelést, amely a tetszőleges x vektorhoz, a tételben adott x_0-at rendeli, $\mathcal{M}$-re való *vetítés operátornak* nevezzük. Mivel az $x = x_0 \neq y$ felbontás egyértelmű, a vetítés egy lineáris operátor, amelynek képtere $\mathcal{M}$ és magtere $\mathcal{M}^\perp = \{x \in \mathcal{H} : \langle x, y\rangle = 0 \text{ minden } y \in \mathcal{M}\text{-re }\}$.

9. példa: Tekintsük a $\mathcal{H} = L^2(-1,1)$ Hilbert-teret, és legyen $\mathcal{M}$ a legfeljebb N-edfokú polinomok által kifeszített (zárt) altér. Ha $f \in L^2(-1,1)$, akkor legyen f_0 az f-hez legközelebb eső $\mathcal{M}$-beli vektor.

$L^2(-1,1)$-ben bázist alkotnak a normalizált Legendre-polinomok:

$$\tilde{P}_n := \sqrt{\frac{2n+1}{2}} P_n(x) \qquad (n = 0, 2, \dots)$$

f-nek van kifejtése ebben a bázisban, $f = \sum_n c_n \tilde{P}_n$. f_0 nem más, mint $\sum_{n=0}^N c_n \tilde{P}_n$.

Ez a minimum tulajdonsága nem csak a Legendre-sorfejtésnek, hanem általában a hasonló, néha *általánosított Fourier-sornak* nevezett, ortogonális kifejtéseknek is megvan.

$\square$

10. példa: Tekintsük a $\mathcal{H} = L^2(X, \mathcal{A}, \mu)$ Hilbert-teret egy $(X, \mathcal{A}, \mu)$ mértéktér felett. Ha $\mathcal{A}_0$ σ-részalgebrája $\mathcal{A}$-nak és $\mu_0 := \mu|\mathcal{A}_0$, akkor $\mathcal{M} := L^2(X, \mathcal{A}_0, \mu_0) \subset \mathcal{H}$ zárt altér. A projekció tétel biztosítja az $E : \mathcal{H} \to \mathcal{M}$ projekciót, amit a valószínűségelméletben $\mathcal{A}_0$-ra vonatkozó *feltételes várható érték* operációnak neveznek. Ha $f \in L^2(X, \mathcal{A}, \mu)$, akkor $E(f)$ f-nek a legjobb közelítése az $\mathcal{A}_0$-mérhető függvények között.

$\square$

A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér $H \subset \mathcal{H}$ részhalmazát *teljes rendszernek* mondjuk, ha $H^\perp = \{0\}$. Egy sűrű halmaz mindig teljes. (Ennek megfordítása nem igaz, viszont teljes halmaz lineáris burka sűrű.)

1.4 Operátorok, funkcionálok és formák

A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér egy A lináris operátorát *korlátosnak* mondjuk, ha van olyan C szám, hogy $\|Ax\| \le C\|x\|$ minden x vektorra. Az ilyen C számok infimuma

$$\|A\| := \sup\{\|Ax\| : x \in \mathcal{H}, \|x\| = 1\}\,,$$

az A operátor *normája.* Egy altérre való vetítés operátora korlátos, és normája 1. Azokat a lineáris operátorokat, amelyek normája legfeljebb 1, *kontrakcióknak* is szokták nevezni.

Emlékeztetünk arra a tényre, hogy egy lineáris operátor pontosan akkor korlátos, ha folytonos. A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér összes korlátos operátorainak halmazára a $B(\mathcal{H})$ jelölést használjuk.

11. példa: Tekintsük a $\mathcal{H} = L^2(0,a)$ Hilbert-teret és az

$$(Af)(x) = xf(x) \qquad\qquad (f \in L^2(0,a), \quad 0 \le x \le a)$$

lineáris operátort.

$$\|Af\|^2 = \int_0^a x^2|f(x)|^2\,dx \le a^2\int_0^a |f(x)|^2\,dx = a^2\|f\|^2$$

Ez a becslés mutatja, hogy $\|A\| \le a$. Legyen

$$f_n(x) = \begin{cases} \sqrt{n} & a - n^{-1} \le x \le a, \\ 0 & \text{különben.} \end{cases}$$

Ekkor $\|f_n\| = 1$, és

$$\|Af_n\|^2 = \int_{a-1/n}^a x^2 n\,dx = \frac{(a^3 - (a-1/n)^3)n}{3} \to a^2.$$

Ebből arra következtetünk, hogy $\|A\| \ge a$, tehát $\|A\| = a$.

$\square$

Egy normált tér duálisán folytonos lineáris funkcionáljai terét értjük. A következő tétel azt fejezi ki, hogy a Hilbert-tér esetében a duális tér magával a térrel van kölcsönösen egyértelmű kapcsolatban.

4. tétel: (**Riesz-Fischer-tétel**) *Minden $T \in \mathcal{H}^*$ lineáris funkcionálhoz egyértelműen található egy $y_T \in \mathcal{H}$ vektor, amelyre $T(x) = \langle y_T, x\rangle$ $(x \in \mathcal{H})$. Továbbá $\|y_T\|_{\mathcal{H}} = \|T\|_{\mathcal{H}^*}$.*

Bizonyítás: $\mathcal{M} = \{x \in \mathcal{H} : Tx = 0\}$ zárt altér. Az $\mathcal{M} = \mathcal{H}$ eset triviális, ekkor $T = 0$ és $y_T = 0$ megteszi. A továbbiakban feltesszük, hogy $\mathcal{M} \ne \mathcal{H}$. Ekkor a projekció-tétel szerint van $x_0 \perp \mathcal{M}$ vektor, $\|x_0\| \ne 0$. $\mathcal{H}$ bármely y eleme

$$y = \left(y - \frac{T(y)}{T(x_0)}x_0\right) + \frac{T(y)}{T(x_0)}x_0$$

alakban írható, azaz $\mathcal{M}$ és x_0 lineárisan kifeszítik $\mathcal{H}$-t. Az

$$y_T = \frac{\overline{T(x_0)}}{\|x_0\|^2}x_0$$

definícióval $T(y) = \langle y_T, y\rangle$ könnyen ellenőrizhető. A normák megegyezése:

$$\begin{aligned}
\|T\| &= \sup\{|T(x)| : \|x\| \le 1\} = \sup\{|\langle y_T, x\rangle| : \|x\| \le 1\} \\
&\le \sup\{\|y_T\| \cdot \|x\| : \|x\| \le 1\} = \|y_T\|\,. \\
\|T\| &= \sup\{|T(x)| : \|x\| \le 1\} \ge T\left(\frac{y_T}{\|y_T\|}\right) = \left\langle y_T, \frac{y_T}{\|y_t\|}\right\rangle = \|y_T\|\,.
\end{aligned}$$

$\square$

A tételben megkonstruált $T \mapsto y_T$ megfeleltetés nem lineáris, mert $y_{\lambda T} = \overline{\lambda} T$. (*Konjugált lineárisnak* mondjuk.)

A $B : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ alakú kétváltozós függvényt *korlátos formának* fogjuk nevezni, ha

(1) az első változóban konjugált lineáris

(2) a második változóban lineáris

(3) létezik egy olyan $C > 0$ szám, amelyre $|B(x, y)| \leq C\|x\| \cdot \|y\|$.

Legyen $A \in B(\mathcal{H})$ és $B(x, y) := \langle x, Ay \rangle$ $x, y \in \mathcal{H}$ esetén. Ekkor $B(x, y)$ egy korlátos forma, ugyanis $|B(x, y)| \leq \|x\| \cdot \|Ay\| \leq \|A\| \cdot \|x\| \cdot \|y\|$. Tehát minden korlátos operátorhoz tartozik egy korlátos forma. A Riesz-Fischer tétel következménye az a tény, hogy kölcsönösen egyértelmű megfeleltetés van a korlátos formák és a korlátos lineáris operátorok között. Legyen $B(x, y)$ egy tetszőleges korlátos forma. Ekkor rögzített $x \in \mathcal{H}$-ra $y \mapsto B(x, y)$ egy korlátos lineáris funkcionál és létezik egy y_A vektor amelyre $B(x, y) = \langle x, y_B \rangle$. Az $y \mapsto y_A$ megfeleltetés egy lineáis A operátort határoz meg. Hátra van még A korlátosságának meggondolása:

$$\begin{aligned} \|A\| &= \sup\{\|Ay\| : \|y\| \leq 1\} \\ &= \sup\{|\langle x, Ay \rangle| : \|y\| \leq 1, \|x\| \leq\} \\ &= \sup\{|B(x, y)| : \|y\| \leq 1, \|x\| \leq\} \end{aligned}$$

Megjegyezzük, hogy egy $B(x, y)$ formát egyérteműen meghatároznak a $B(x, x)$ értékek, ugyanis érényes a következő, úgynevezett *polarizációs azonosság*:

$$B(x, y) = \frac{1}{4}\big(B(x + y, x + y) - B(x - y, x - y) - \mathrm{i}\, B(x + \mathrm{i}\, y, x + \mathrm{i}\, y) + \mathrm{i}\, B(x - \mathrm{i}\, y, x - \mathrm{i}\, y)\big) \tag{1.19}$$

1.5 Kompakt tartójú sima függvények

12. példa: Jelöljük $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$-nel az $\mathbb{R}^n$-en értelmezett (komplex értékű) végtelen sokszor differenciálható kompakt tartójú függvények halmazát. Meg fogjuk mutatni, hogy $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ teljes $L^2(\mathbb{R}^n)$-ben. Mivel egy lineáris altérről van szó, a teljesség ekvivalens a sűrűséggel.

Ha f és g komplex értékű függvények $\mathbb{R}^n$-en, akkor az $f * g$ konvolúciójukat az

$$f * g(x) = \int f(x - y) g(y)\, dy$$

formula értelmezi. $f * g = g * f$ nyomban adódik a definícióból a változók helyettesítésével. Ha $f, g \in L^2$, akkor a Schwarz-egyenlőtlenség biztosítja az integrál létezését minden $x \in \mathbb{R}^n$-re. (Megjegyezzük, hogy ha $f \in L^p$, $g \in L^q$ és $p^{-1} + q^{-1} \geq 1$, akkor a az integrál majdnem minden $x \in \mathbb{R}^n$-re létezik, továbbá $f * g \in L^r$, $1 + r^{-1} = p^{-1} + q^{-1}$.)

Válasszunk egy olyan $j \in L^1$ függvényt, amelyre $j \geq 0$ és $\int j(x)\, dx = 1$. j nem más, mint egy valószínűségsűrűség, és gondolhatunk például a standard normális eloszlásra:

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\Big(-\frac{x^2}{2} \Big)$$

Legyen

$$j_\varepsilon(x) := \varepsilon^{-n} j(x/\varepsilon),$$

ami egy új sűrűségfggvény. A fenti példában

$$g_\varepsilon(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\varepsilon} \exp\Big(-\frac{x^2}{2\varepsilon^2}\Big)$$

szintén normális eloszlás, de szórása ε.

Megmutatjuk, hogy az $f_\varepsilon := j_\varepsilon * f$ értelmezéssel $J_\varepsilon : f \mapsto f_\varepsilon$ egy korlátos operátor az L^2 téren.

Az alábbiakban $F(x) := |f(x)|$.

$$\begin{aligned}
\int |f_\varepsilon(x)|^p\,dx &= \int \Big[\int j_\varepsilon(y)F(x-y)\,dy\Big]^p dx \\
&\le \int \Big[\Big(\int j_\varepsilon(y)\,dy\Big)^{p/q} \int j_\varepsilon(y)F(x-y)^p\,dy\Big]\,dx \\
&= \iint j_\varepsilon(y)F(x-y)^p\,dydx = \int\Big(\int j_\varepsilon(y)F(x-y)^p\,dx\Big)\,dy \\
&= \int F(x)^p\,dx
\end{aligned}$$

Itt először a Hölder-egyenlőtlenséget használtuk fel a $j_\varepsilon = (j_\varepsilon)^{1/p}(j_\varepsilon)^{1/q}$ faktorizálással, utána pedig a Fubini-tételre való hivatkozással megcseréltük az integrálokat. Becslésünk azt mutatja, hogy $\|J_\varepsilon(f)\|_p \le \|f\|_p$, ha $1 \le p < \infty$.

Bizonyítható, hogy

$$\|J_\varepsilon(f) - f\|_p \to 0\,, \quad \text{amint} \quad \varepsilon \to +0\,. \tag{1.20}$$

Ennek jelentősége akkor látszik számunkra, ha j-t C_0^∞-függvénynek válasszuk, például

$$j(x) = \begin{cases} C\exp\Big(-\dfrac{1}{1-\|x\|^2}\Big) & \text{ha } \|x\| < 1, \\ 0 & \text{különben.} \end{cases} \tag{1.21}$$

Ekkor ugyanis J_ε értékei $C^\infty(\mathbb{R}^n)$-ben vannak, és az értékkészletek egyesítése (1.20) szerint sűrű $L^p(\mathbb{R}^n)$-ben. Ha egy $f \in L^p(\mathbb{R}^n)$ függvényt végtelen sokszor differenciálható kompakt tartójú függvénnyel akarunk közelíteni, akkor először egy kompakt tartójú f_0 függvénnyel közelítjük, majd a $j_\varepsilon * f_0$ függvényt vesszük, ami sima és kompakt tartójú, ha j (1.21)-ből van.

□

Bár az előző példa témája nem szorosan kapcsolódik a Hilbert-terekhez, érdemes néhány megjegyzést tenni. Az $L^1(\mathbb{R}^n)$ Banach-tér a konvolúcióval, mint kommutatív szorzással algebrává válik, és a normája szubmultiplikatív: $\|f * g\| \le \|f\| \cdot \|g\|$. Ebben az algebrában nincsen multiplikatív egység, de j_ε-t nyugodtan nevezhetjük *approximatív egységnek*, mert $f * j_\varepsilon \to f$.

1.6 Az adjungált operátor

Ha A egy korlátos operátor, akkor a megfelelő forma

$$B_A(x,y) := \langle Ax, y\rangle\,.$$

Ekkor $B'(x,y) = \overline{B_A(y,x)}$ ugyancsak egy korlátos forma, amihez tartozó operátort A^*-gal jelöljük és A adjungáltjának mondjuk. Más szóval A^*-ot az

$$\langle Ax, y\rangle = \langle x, A^* y\rangle \qquad (x, y \in \mathcal{H})$$

tulajdonság jellemzi. Ebből látszik, hogy $\|A\| = \|A^*\|$. A-t önadjungáltnak nevezzük, ha $A = A^*$.

13. példa: Fennt megkonstruáltuk egy $\mathcal{M}$ zárt altérhez a rá való vetítés operátorát, jelöljük ezt $P_{\mathcal{M}}$-mel. $P_{\mathcal{M}}$ önadjungált, mert

$$\begin{aligned} \langle Px, x'\rangle &= \langle Px, (Px' + y')\rangle &= \langle Px, Px'\rangle\,, \\ \langle x, Px'\rangle &= \langle (Px + y), Px'\rangle &= \langle Px, Px'\rangle\,. \end{aligned}$$

Azt használtuk fel, hogy $x = Px + y$ és $x' = Px' + y'$ ahol $y, y' \perp \mathcal{M}$. Így $P = P^*$ és nyilván $P = P^2$. Az ilyen operátorokat projekcióknak nevezzük, és minden projekció egy zárt altérre való vetítés.

□

Kölcsönösen egyértelmű kapcsolat van a projekció operátorok és a zárt alterek között. Fent megkonstruáltuk az egy adott zárt altérre vetítő projekciót. Megfordítva, ha adott egy projekció operátor, akkor képtere az a zárt altér, amire vetít.

14. példa: Legyen $S : \ell^2(\mathbb{N}) \to \ell^2(\mathbb{N})$ a jobbra tolás operátora, azaz $S\delta_n = \delta_{n+1}$ a kanonikus bázisvektorokon. Ekkor

$$S^*(x_1, x_2, x_3, \ldots) = (x_2, x_3, x_4, \ldots)$$

azaz

$$S^*\delta_1 = 0, \qquad S^*\delta_{n+1} = \delta_n\,.$$

□

5. tétel: *Az adjungálás tulajdonságai:*

(1) $(A + B)^* = A^* + B^*$

(2) $(\lambda A)^* = \overline{\lambda} A^* \qquad (\lambda \in \mathbb{C})$

(3) $(AB)^* = B^* A^*$

(4) $(A^{-1})^* = (A^*)^{-1}$, *ha A invertálható és inverze korlátos.*

□

15. példa: Bármilyen $X \in B(\mathcal{H})$ lineáris operátor egyértelműen írható fel $A + \mathrm{i}B$ alakban, ahol A és B korlátos önadjungált operátorok. $XX^* = X^*X$ pontosan akkor teljesül, ha $AB = BA$.

□

Ha $XX^* = X^*X$, akkor az X operátort *normálisnak* mondjuk.

Ha a $\mathcal{H}$ Hilbert-térnek van egy véges $e_1, e_2, \ldots, e_n$ bázisa, akkor lineáris operátorai $n \times n$-es mátrixokkal adhatók meg. Az $A \in B(\mathcal{H})$ operátor mátrixában az i-edik sor j-edik eleme $\langle e_j, Ae_i\rangle$. Mivel $\langle e_j, A^* e_i\rangle = \overline{\langle e_i, Ae_j\rangle}$, A^* mátrixa A mátrixa transzponáltjának konjugáltjával azonos. Lényegében hasonló a helyzet nem véges dimenziós tér esetében is, akkor az operátorok "végtelen mátrixszal" adhatók meg. (A század elején voltak akik még nem lineáris operátorról, hanem végtelen mátrixról beszéltek.)

Egy korlátos lineáris operátor megadható valóban a mátrixszával, azonban a vgtelen dimenziós esetben nehezen eldönthető egy "mátrixról", hogy egy korlátos operátort ad-e meg.

Az adjungált fogalma kiterjeszthető két különböző Hilber-tér között ható operátorra is. Ha $T : \mathcal{H} \to \mathcal{K}$, akkor $T^* : \mathcal{K} \to \mathcal{H}$, és

$$\langle x, Ty\rangle_{\mathcal{K}} = \langle T^* x, y\rangle_{\mathcal{H}} \qquad (x \in \mathcal{H}, y \in \mathcal{K}).$$

1.7 Tenzorszorzat

A $\mathcal{H}$ és a $\mathcal{K}$ Hilbert-terek *algebrai tenzorszorzata* $\sum_{i,j} \xi_i \otimes \eta_j$ alakú formális véges összegekből áll, $\xi_i \in \mathcal{H}$, $\eta_j \in \mathcal{K}$. Egy ilyen összeget $\mathcal{K} \to \mathcal{H}$ lineáris operátornak is tekinthetünk

$$\left(\sum_{i,j} \xi_i \otimes \eta_j\right) \eta = \sum_{i,j} \langle \eta_j, \eta\rangle \xi_i \qquad (\eta \in \mathcal{K}).$$

Ez az operátor véges rangú, a ξ_i vektorok lineáris burkában van a képtere. Az algebrai tenzorszorzatot azért is érdemes a véges rangú $\mathcal{K} \to \mathcal{H}$ lineáris operátorok terével azonosítani, mert így világos, hogy

$$(\xi_1 + \xi_2) \otimes \eta = \xi_1 \otimes \eta + \xi_2 \otimes \eta, \quad (\lambda\xi) \otimes \eta = \lambda(\xi \otimes \eta)\,, \tag{1.22}$$

és hasonlóan a második változóra.

$\mathcal{H}$ és $\mathcal{K}$ algebrai tenzorszorzatán van olyan belső szorzat, amelyre

$$\langle \xi \otimes \eta, \xi' \otimes \eta'\rangle = \langle \xi, \xi'\rangle\langle \eta, \eta'\rangle\,.$$

A belső szorzatból az $\|x\| = \sqrt{\langle x, x\rangle}$ képlettel normát származtatunk. Erre nézve az algebrai tenzorszorzat teljes burka $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$. Ez tehát egy Hilbert-tér, amely sűrű altérként tartalmazza az algebrai tenzorszorzatot. Mivel az algebrai tenzorszorzatot csak ebben a részben a Hilbert-terek tenzorszorzata előkészítése közben használjuk, nem is vezetünk be rá jelölést.

16. példa: Hilbert-terek tenzorszorzata jól illeszkedik a szorzatmérték konstrukciójához. Ha $\mathcal{H} = L^2(X, \mu)$ és $\mathcal{K} = L^2(Y, \nu)$, akkor $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K} = L^2(X \times Y, \mu \times \nu)$, mivel $f \in L^2(X, \mu)$ és $g \in L^2(Y, \nu)$ esetén az $f \otimes g$ elemi tenzor nem más, mint $f(x)g(y) \in L^2(X \times Y, \mu \times \nu)$. A (1.22) számolási szabály a függvénytérben magától ertetőő:

$$(f_1(x) + f_2(x))G(y) = f_1(x)g(y) + f_2(x) \otimes g(y), \quad (\lambda f(x))g(y) = \lambda(f(x)g(y)).$$

A Hilbert-terek tenzorszorzatát ebben a példából lehet legegyszerűbben megérteni. Az is jól kivehető, hogy a Hilbert-terek tenzorszorzata sokkal bővebb, mint az algebrai tenzorszorzat, hiszen utóbbi a

$$\sum_i f_i(x) g_i(y)$$

alakú véges összegekből áll. Például $\exp(x+y)$, vagy $sin(x+y)$ folytonos függvényel lévén benne vannak $L^2([0,1] \times [0,1])$-ben, de nincsenek benne $L^2([0,1]$-nek önmagával vett algebrai tenzorszorzatában.

□

A tenzorszorzatra emlékeztet az a *Dirac-féle írásmód*, amelyben a vektorokat $|\xi\rangle, |\eta\rangle$ stb. formában írják és $|\xi\rangle\langle\eta|$ olyan lineáris operátor, amelyre

$$|\xi\rangle\langle\eta| : |\eta'\rangle \mapsto |\xi\rangle \cdot \langle\eta|\eta'\rangle.$$

Itt $\langle\eta|\eta'\rangle$ a két vektor belső szorzata. A $|\xi\rangle\langle\eta|$ kifejezés a ξ változóban lineáris és az η változóban konjugált lineáris (azaz $|\xi\rangle\langle\lambda\eta| = \overline{\lambda}|\xi\rangle\langle\eta|$). A jelölés előnye a

$$|\xi\rangle\langle\eta|\ |\eta'\rangle = \langle\eta,\eta'\rangle|\xi\rangle$$

formula. Ha $\|\xi\| = 1$, akkor $|\xi\rangle\langle\xi|$ a ξ által generált lineáris altérre való (merőleges) vetítés operátora.

A tenzorszorzat Hilbert-térben egyszerűen kaphatunk bázist az egyes terek bázisaiból. Ha $\{e_i : i \in I\}$ az $\mathcal{H}$ tér bázisa és $\{f_j : j \in J\}$ az $\mathcal{K}$ tér egy bázisa, akkor

$$\{e_i \otimes f_j : (i,j) \in I \times J\}$$

az $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ szorzattér bázisa. Látható, hogy tenszorszorzáskor a terek dimenziója összeszorzódik. A szorzattér tetszőleges eleme $\sum_{i,j} \lambda_{ij}\, e_i \otimes f_j$ formában fejthető ki, $\sum_{i,j} |\lambda_{ij}|^2 < +\infty$, és nem más mint az illető vektor normanégyzete.

17. példa: Az $L^2(\mathbb{R}^2)$ térben bázist kaphatunk, ha $L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R})$ szorzatként fogjuk fel. $L^2(\mathbb{R})$-ben bázist alkotnak a normalizált Hermit-féle fúggvények: $\exp(-x^2/2)\tilde{H}_n(x)$ (lásd (1.12)). Ezért $L^2(\mathbb{R}^2)$-ben a ***kétváltozós Hermit-fúggvények*** adnak bázist:

$$e^{-(x^2+y^2)/2}\tilde{H}_n(x)\tilde{H}_m(y) \qquad (n, m = 0, 1, \ldots).$$

□

Legyen $A \in B(\mathcal{H})$ és $B \in B(\mathcal{K})$. Ekkor a $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ tenzorszorzat Hilbert-téren van egy olyan $A \otimes B$ lineáris operátor, amelyre

$$(A \otimes B)(\xi \otimes \eta) = A\xi \otimes B\eta\,.$$

Legyen (e_i) bázis $\mathcal{H}$-ban és (f_j) bázis $\mathcal{K}$-ban. Ekkor $e_i \otimes f_j$ a $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ tér bázisa.

$$\begin{aligned}
\left\| (A \otimes I)\left(\sum \lambda_{ij}\, e_i \otimes f_j\right)\right\|^2 &= \left\| \sum \lambda_{ij}(Ae_i \otimes f_j)\right\|^2 \\
&= \sum \overline{\lambda_{ij}}\lambda_{kj}\langle Ae_i,\, Ae_k\rangle \\
&= \sum_j \left\langle A\left(\sum_i \lambda_{ij}\, e_i\right), A\left(\sum_k \lambda_{kj}\, e_k\right)\right\rangle \\
&\le \sum_j \|A^*A\| \left\| \sum_i \lambda_{ij}\, e_i\right\|^2 \\
&= \sum_j \|A\|^2 \sum_i |\lambda_{ij}|^2 = \|A\|^2 \sum_{ij} |\lambda_{ij}|^2\,.
\end{aligned}$$

Ez a számolás azt mutatja, hogy $\|A \otimes I\| \le \|A\|$. Hasonlóan $\|I \otimes B\| \le \|B\|$ és

$$\|A \otimes B\| = \|(A \otimes I)(I \otimes B)\| \le \|A \otimes I\| \cdot \|I \otimes B\| \le \|A\| \cdot \|B\|\,.$$

A fordított irányú egyenlőtlenség, $\|A \otimes B\| \ge \|A\| \cdot \|B\|$ jóval egyszerűbben látható. Így levonhatjuk az

$$\|A \otimes B\| = \|A\| \cdot \|B\| \tag{1.23}$$

következtetést.

18. példa: Legyen $\mathcal{H}$ bázisa $\{e_1, e_2, e_3\}$ és $\mathcal{K}$ bázisa $\{f_1, f_2\}$. Ha az $A \in B(\mathcal{H})$ operátor mátrixa (A_{ij}) és a $B \in B(\mathcal{K})$ operátor mátrixa (B_{kl}), akkor

$$(A \otimes B)(e_j \otimes f_l) = \sum_{i,j} A_{ij}B_{kl}e_i \otimes f_k\,.$$

Rendezzük a $\mathcal{H}\otimes\mathcal{K}$ Hilbert-térben a szorzatbázist lexikografikusan, azaz $e_1\otimes f_1$, $e_1\otimes f_2$, $e_2\otimes f_1$, $e_2\otimes f_2$, $e_3\otimes f_1$, $e_3\otimes f_2$. Ilyen elrendezés esetén $A\otimes B$ mátrixa

$$\begin{pmatrix} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & A_{12}B_{11} & A_{12}B_{12} & A_{13}B_{11} & A_{13}B_{12} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & A_{12}B_{21} & A_{12}B_{22} & A_{13}B_{21} & A_{13}B_{22} \\ A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & A_{22}B_{11} & A_{22}B_{12} & A_{23}B_{11} & A_{23}B_{12} \\ A_{21}B_{21} & A_{21}B_{22} & A_{22}B_{21} & A_{22}B_{22} & A_{23}B_{21} & A_{23}B_{22} \\ A_{31}B_{11} & A_{31}B_{12} & A_{32}B_{11} & A_{32}B_{12} & A_{33}B_{11} & A_{33}B_{12} \\ A_{31}B_{21} & A_{31}B_{22} & A_{32}B_{21} & A_{32}B_{22} & A_{33}B_{21} & A_{33}B_{22} \end{pmatrix}.$$

Ezt blokkmátrix írásmóddal rövidebben is megadhatjuk:

$$\begin{pmatrix} A_{11}B & A_{12}B & A_{13}B \\ A_{21}B & A_{22}B & A_{23}B \\ A_{31}B & A_{32}B & A_{33}B \end{pmatrix}$$

$A\otimes B$ tehát olyan blokkmátrix, amelynek 2×2-es blokkjai $A_{ij}B$ alakúak.

$\square$

Legyen A és B lineáris operátorok az $\mathcal{H}$ illetve $\mathcal{K}$ Hilbert-tereken. Legyen $\dim\mathcal{H}=n$ és $\dim\mathcal{K}=m$. Tételezzük fel, hogy a $\xi\in\mathcal{H}$ és $\eta\in\mathcal{K}$ vektorokra $A\xi=\lambda\xi$ és $B\eta=\mu\eta$ valamilyen alkalmas $\lambda,\mu\in\mathbb{C}$ számokkal. Ekkor $(A\otimes B)(\xi\otimes\eta)=\lambda\mu(\xi\otimes\eta)$. Ebből a tényből könnyen levezethetjük, hogy

$$\det(A\otimes B)=(\det A)^m\otimes(\det B)^n \tag{1.24}$$

mátrixokra, ugyanis a determináns nem más, mint a sajátértékek szorzata.

1.8 Unitér operátorok

Az invertálható $U\in B(\mathcal{H})$ operátort *unitérnek* mondjuk, ha

$$\langle x,y\rangle=\langle Ux,Uy\rangle\,. \qquad (x,y\in\mathcal{H})\,.$$

Az unitér operátorok az $U^{-1}=U^*$ tulajdonsággal is jellemezhetők, és ezért egy unitér operátor normális. Az unitér operátor fogalma, az adjungálthoz hasonlóan, kiterjeszthető két különböző Hilbert-tér között ható operátorokra is.

19. példa: Legyen G egy megszámlálható csoport és $g\in G$. $\ell^2(G)$-n értelmezhetünk egy U_g operátort az

$$(U_gf)(h)=f(g^{-1}h) \qquad (f\in\ell^2(G),\ h\in G)$$

formulával. U_g izometria, mert

$$\begin{aligned} \|U_gf\|^2 &= \sum_{h\in G}|(U_gf)(h)|^2=\sum_{h\in G}|f(g^{-1}h)|^2 \\ &= \sum_{h'\in G}|f(h')|^2=\|f\|^2\,. \end{aligned}$$

Másrészt, U_g invertálható, hiszen $(U_g)^{-1}=U_{g^{-1}}$. Ezért U_g egy unitér operátor. Mivel az $U_{g_1}U_{g_2}=U_{g_1,g_2}$ kompozíciós szabály is fennáll, a $g\mapsto U_g$ hozzárendelés a G *csoport unitér reprezentációja.* (Neve *balreguláris reprezentáció.*)

□

20. példa: Legyen m_1, m_2 pozitív valós számok. Értelmezzünk egy $U : L^2(\mathbb{R}^{2n}) \to L^2(\mathbb{R}^{2n})$ lineáris operátort az

$$(Uf)(x,y) = f(u,v) ,$$

ahol

$$u = \frac{m_1 x + m_2 y}{m_1 + m_2}, \qquad v = y - x \qquad (x, y \in \mathbb{R}^n) .$$

Belátjuk, hogy U unitér transzformáció.

$$\|Uf\|^2 = \int |f(u,v)|^2 \, du \, dv = \int |f(x,y)|^2 \left| \frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} \right| dx \, dy,$$

ahol

$$\left| \frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} \right|$$

a Jacobi-mátrix determinánsának abszolút értéke. A Jacobi-mátrixot blokkmátrix írásmóddal a

$$\begin{pmatrix} \frac{m_1}{m_1+m_2} I & -I \\ \frac{m_1}{m_1+m_2} I & I \end{pmatrix}$$

formában adhatjuk meg,

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} I, \quad \frac{\partial v}{\partial x} = -I, \quad \frac{\partial v}{\partial y} = I,$$

I jelöli az $n \times n$-es egységmátrixot. Ez a mátrix tenzorszorzat alakú, nem más, mint

$$\begin{pmatrix} \frac{m_1}{m_1+m_2} I & -1 \\ \frac{m_1}{m_1+m_2} I & 1 \end{pmatrix} \otimes I .$$

Determinánsa (1.24) alapján 1, mivel mindkét tényező 1 determinánsú. Megmutattuk, hogy

$$\|Uf\|^2 = \int |f(u,v)|^2 \, du \, dv = \int |f(x,y)|^2 \, dx \, dy = \|f\|^2.$$

Mivel U invertálható, egy unitér operátor.

□

21. példa: Legyen σ az $\{1, 2, \ldots, n\}$ halmaz egy permutációja, és $\mathcal{H}$ egy tetszőleges Hilbert-tér. $\mathcal{H}^{n\otimes} = \mathcal{H} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}$-téren értemezzünk egy U_σ operátort az

$$U_\sigma \left(\sum_i C(i) x_1^{(i)} \otimes x_2^{(i)} \otimes \ldots \otimes x_n^{(i)} \right) = \sum_i C(i) x_{\sigma(1)}^{(i)} \otimes \ldots \otimes x_{\sigma(n)}^{(i)} \tag{1.25}$$

képlettel. Ekkor

$$\left\langle U_\sigma \left(\sum_i C(i) x_1^{(i)} \otimes \ldots \otimes x_n^{(i)} \right), U_\sigma \left(\sum_j C(j) x_1^{(j)} \otimes \ldots \otimes x_n^{(j)} \right) \right\rangle =$$

$$= \sum_{i,j} \overline{C(i)} C(j) \left(\langle x_{\sigma(1)}^{(i)}, x_{\sigma(1)}^{(j)} \rangle \cdots \langle x_{\sigma(n)}^{(i)}, x_{\sigma(n)}^{(j)} \rangle \right) .$$

Mivel a zárójelben szereplő tényezők sorrendjét változtatja a σ permutáció, így a zárójelben a tényezők sorrendjétől eltekintve az

$$\langle x_1^{(i)}, x_1^{(j)}\rangle \cdots \langle x_n^{(i)}, x_n^{(j)}\rangle$$

szorzat áll. Ezért

$$\langle U_\sigma x, U_\sigma y\rangle = \langle x, y\rangle\ ,$$

tehát U_σ megtartja a belső szorzatot. Inverze, $U_{\sigma^{-1}}$, létezik, ezért U_σ egy unitér operátor.

□

22. példa: Legyen $L^2(S, d\Omega)$ az egységgömb felszínén négyzetesen integrálható függvények tere. Ha $\psi \in L^2(S, d\Omega)$, akkor az

$$(U\psi)(\theta, \varphi) = \psi(\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$$

képlet egy $L^2(S, d\Omega) \to L^2(0, 2\pi) \otimes L^2((0, \pi), \sin\theta\, d\theta)$ unitér operátort értelmez, hiszen

$$\int |\psi(x, y, z)|^2 d\Omega = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |U\psi|^2(\theta, \varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

érvényes, ha a gömbön vett felületi integrált gömbi koordinátákra való áttéréssel számoljuk ki.

Célunk az, hogy az $L^2(S, d\Omega)$ térben konstruáljunk egy bázist. $L^2(0, 2\pi)$-ben $\{e^{\mathrm{i}\, m\varphi}/\sqrt{2\pi}\ :\ m \in \mathbb{Z}\}$ egy alkalmas bázis. Ha minden $m \in \mathbb{Z}$-re veszünk egy $e_1^m(\theta), e_2^m(\theta), \ldots$ bázist az $L^2((0, \pi), \sin\theta\, d\theta)$ térben, akkor

$$\left\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\mathrm{i}\, m\varphi} e_j^m(\theta)\ :\ m \in \mathbb{Z},\ j \in \mathbb{N}\right\}$$

az $L^2(S, d\Omega)$ tér egy bázisa lesz, a gömbön értelmezett függvényeket gömbi koordinátákban írva.

Ha $m \in \mathbb{Z}$, akkor $P_\ell^{|m|}(\cos\theta)$ teljes ortogonális rendszer a $L^2((0, \pi), \sin\theta\, d\theta)$ térben, ha $\ell \geq |m|$ és $P_\ell^{|m|}$ jelöli az asszociált Legendre-függvényeket, lásd (1.3). Valóban, helyettesítéssel

$$\int_0^{\pi} P_\ell^{|m|}(\cos\theta) P_k^{|m|}(\cos\theta)\sin\theta\, d\theta = \int_{-1}^{1} P_\ell^{|m|}(t) P_k^{|m|}(t)\, dt\ ,$$

ami 0, ha $\ell \neq k$.

Tehát

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \left(\frac{2\ell + 1}{4\pi}\frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!}\right)^{1/2} P_\ell^{|m|}(\cos\theta) e^{\mathrm{i}\, m\varphi} \tag{1.26}$$

egy bázis $L^2(S, d\Omega)$-ban, ha $m \in \mathbb{Z}$ és $\ell \geq |m|$. Így jutottunk el a *gömbfüggvényekhez.*

□

1.9 A Fourier-transzformáció

Az $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ függvény Fourier-transzformáltját a

$$\hat{f}(t) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int e^{-\mathrm{i}\,(t, x)} f(x)\, dx \tag{1.27}$$

képlet értelmezi, $(x, t) = \sum_i x_i t_i$. Világos a definícióból, hogy $\hat{f}$ korlátos, és a dominált konvergencia tételből adódóan folytonos függvény.

Itt azt feltételezzük, hogy a Fourier-transzformált egy bizonyos szinten ismeretes. Például, ha

$$g_\lambda(x) = \exp\big(-\lambda\|x\|^2/2\big), \tag{1.28}$$

akkor

$$\hat{g}(t) = \lambda^{-n/2}\exp\big(-\|x\|^2/2\lambda\big) \tag{1.29}$$

adja a Gauss-féle függvények transzformálódását. Ezt és a Fubini-tételt használva egy $f \in L^1 \cap L^2$ függvényre:

$$\begin{aligned}
\int |\hat{f}(t)|^2 \exp\big(-\lambda\|t\|^2/2\big)\,dt &= \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{\mathbb{R}^{3n}} \bar{f}(x)f(y)e^{\mathrm{i}\,(t,x-y)}\exp\big(-\lambda\|t\|^2/2\big)\,dx\,dy\,dt \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\iint \lambda^{-n/2}\exp\big(-\|x-y\|^2/2\lambda\big)\bar{f}(x)f(y)\,dx\,dy \\
&= \Big\langle f(x), \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int \lambda^{-n/2}\exp\big(-\|x-y\|^2/2\lambda\big)f(y)\,dy\Big\rangle
\end{aligned}$$

Az utolsó tag konvolúciót tartalmaz, ami a 12. példa alapján tart f-hez, ha $\lambda \to \infty$. (A Gauss-féle függvények éppen egy approxomatív egységet képeznek a megfelelő normalizálással.) Ezért az utolsó tag $\langle f, f\rangle = \|f\|^2$-hez, ha $\lambda \to \infty$. Ugyanekkor a monoton konvergencia tétel szerint a kiindulási kifejezés tart $\|\hat{f}\|^2$-hez. Tehát $\|f\|^2 = \|\hat{f}\|^2$, ami *Plancherel-tétel* néven ismert, maga a bizonyítás Riesz Frigyestől származik. $\mathcal{F}_0 : f \mapsto \hat{f}$ izometria $L^1 \cap L^2$-ből L^2-be. Ennek létezik egy $\mathcal{F}$ izometrikus kiterjesztése az egész L^2-re. (Figyelmeztetés: Az 1.27 képlet integrálja nem konvergens teszőleges $f \in L^2$ függvényre!)

Ezt az okoskodást megismételhetjük a Fourier-transzformáció inverzére, ami teljesen hasonló alakú az $L^1 \cap L^2$ téren: $g \mapsto \hat{g}(-t)$. Ezért $\mathcal{F}$ invertálható izometria, ami a polarizációs azonosság alapján unitért jelent.

Próbáljuk differenciálni $\hat{f}$-ot az egyváltozós esetben.

$$\frac{\hat{f}(t) - f(t')}{t - t'} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \frac{e^{-\mathrm{i}\,tx} - e^{-\mathrm{i}\,t'x}}{t - t'} f(x)\,dx\,.$$

Ha a $t' \to t$ határátmenetet akarjuk végrehajtani, akkor integrálható majoránst kell keresnünk. Az integrandusban lévő differenciahányados $-\mathrm{i}\,xe^{-\mathrm{i}\,tx}$-hez tart. Amennyiben $xf(x)$ integrálható

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = -\mathrm{i}\,\widehat{xf(x)}\,. \tag{1.30}$$

Ezt iterálva jutunk oda, hogy ha $x^n f(x)$ integrálható, akkor f Fourier-transzformáltja n-szer differenciálható. Minél gyorsabban tart f a 0-hoz a végtelenben, annál simább a Fourier-transzformáltja. Nevezetesen, ha $f \in C_0(\mathbb{R}^n)$, akkor $\hat{f}$ végtelen sokszor differenciálható, de $\hat{f}$ sohasem lesz kompakt tartójú.

Legyen $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ azoknak a végtelen sokszor differenciálható függvényeknek a tere, amelyekre $x^k D^m f$ korlátos minden $k = (k_1, k_2, \ldots, k_n)$ és $m = (m_1, \ldots, m_n)$ multiindexre, ahol

$$D^m = \frac{\partial^{m_1}}{\partial x_1^{m_1}}\frac{\partial^{m_2}}{\partial x_2^{m_2}}\cdots\frac{\partial^{m_n}}{\partial x_n^{m_n}} \quad \text{és} \quad x^k = x_1^{k_1}x_2^{k_2}\ldots x_n^{k_n}\,.$$

Az $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ *Schwartz-tér* a gyorsan csökkenő sima függvények tere.

$$p(x_1, x_2, \ldots, x_n)\exp\left(-\sum_{i=1}^{n} a_i x_i^2\right) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)\,,$$

ha $a_i > 0$ és p egy n-változós polinom.

A (1.30) képlet levezetéséhez hasonlóan látható, hogy

$$(\mathrm{i}\,)^{|k|+|m|}t^m D^k \hat{f}(t) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int e^{-\mathrm{i}\,\langle t,x\rangle} D^m(x^k f(x))\, dx\,. \tag{1.31}$$

Ebből világos, hogy a Fourier-transzformáció az $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ teret önmagába képezi, ami nagy pozitívuma a látszólag természetesebb $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ térrel szemben.

1.10 Rezolvens és spektrum

2. lemma: *Ha* $A \in B(\mathcal{H})$, *akkor* $\|A^*A\| = \|A\|^2$.

Bizonyítás: Egyrészt $\|A^*A\| \le \|A^*\| \cdot \|A\| = \|A\|^2$, másrészt $\|Ax\|^2 = \langle Ax, Ax\rangle = \langle A^*Ax, x\rangle \le \|A^*A\| \cdot \|x\|^2$ amiből $\|A\|^2 \le \|A^*A\|$.

□

Jelöljük I-vel a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér identitás operátorát. A tetszőleges $T \in B(\mathcal{H})$ operátor *rezolvens halmaza* azokból a λ komplex számokból áll, amelyekre a $\lambda \cdot I - T$ operátornak létezik korlátos inverze. A rezolvens halmaz jelölése $\rho(T)$. Így $\lambda \in \rho(T)$ esetén $R_\lambda(T) := (\lambda \cdot I - T)^{-1} \in B(\mathcal{H})$, $R_\lambda(T)$-t a T operátor λ pontban vett *rezolvensének* nevezzük.

3. lemma: (Neumann-sor) *Ha* $T \in B(\mathcal{H})$ *és* $\|T\| < 1$, *akkor a* $\sum_{n=0}^{\infty} T^n$ *sor operátor normában konvergens és* $I - T$ *inverzét adja meg.*

Bizonyítás: $B(\mathcal{H})$ teljes tér, így elég látni, hogy $\sum_{n=0}^{m} T^n$ Cauchy-sorozat, ami következik abból, hogy

$$\left\| \sum_{n=N}^{m} T^n \right\| \le \sum_{n=N}^{m} \|T\|^n$$

tetszőlegesen kicsi, ha m és N elég nagy.

$$\sum_{n=0}^{m} T^n(I-T) = (I-T)\sum_{n=0}^{m} T^n = I - T^{m+1}.$$

Ha $m \to \infty$, akkor ebből a lemma második részét kapjuk.

□

23. példa: Legyen U egy unitér operátor. Ekkor $\|U\|^2 = \|U^*U\| = 1$ alapján $\|U\| = 1$. Ha $\lambda \in \mathbb{C}$ és $|\lambda| > 1$, akkor

$$(\lambda \cdot I - U)^{-1} = \frac{1}{\lambda}\left(1 + \frac{1}{\lambda}U + \frac{1}{\lambda^2}U^2 + \dots\right)$$

a Neumann-féle sorfejtés szerint, és ezért $\lambda \in \rho(T)$. Hasonlóan következik, hogy $\lambda \in \rho(U^*)$, ha $|\lambda| > 1$. Az

$$U - \lambda \cdot I = \lambda U(\lambda^{-1} \cdot I - U^*)$$

azonosság mutatja, hogy $U - \lambda \cdot I$ invertálható, ha $0 < |\lambda| < 1$. Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy ha $|\lambda| \ne 1$, akkor $\lambda \in \rho(U)$.

□

24. példa: Legyen

$$T = \begin{bmatrix} x & 1 & 0 \\ 0 & x & 0 \\ 0 & 0 & y \end{bmatrix}.$$

Ekkor a rezolvens

$$R_\lambda(T) = (\lambda - x)^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + (\lambda - x)^{-2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + (\lambda - y)^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

amiről meggyőződhetünk, ha beszorzunk a $\lambda \cdot I - T$ mátrix-szal.

A $\lambda \mapsto R_\lambda(T)$ operátor értékű analitikus függvény a $\mathbb{C} \setminus \{x, y\}$ halmazon. x és y a T mátrix sajátértékei, a megfelelő sajátalterekre vetítő projekciók nem mások, mint a rezidiumok.

Egy tetszőleges $n \times n$-es T mátrix rezolvense felírható, ha tudjuk, hogy milyen hasonlósági transzformációval hozható Jordan-féle normál alakra. Példaként tekintsünk egy Jordan-blokkot. Ha

$$T' = \begin{bmatrix} x & 1 & 0 \\ 0 & x & 1 \\ 0 & 0 & x \end{bmatrix},$$

akkor

$$R_\lambda(T') = (\lambda - x)^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + (\lambda - x)^{-2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + (\lambda - x)^{-3} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

és $R_\lambda(ST'S^{-1}) = SR_\lambda(T')S^{-1}$.

□

6. tétel: *$\rho(T) \subset \mathbb{C}$ nyílt halmaz.*

Bizonyítás: Tegyük fel, hogy $\lambda_0 \in \rho(T)$. Belátjuk, hogy ha $|\lambda - \lambda_0| \leq \|R_{\lambda_0}(T)\|^{-1}$, akkor $\lambda \cdot I - T$ korlátos inverzzel rendelkezik. Az előző lemma szerint

$$R_{\lambda_0}(T) \sum_{n=0}^{\infty} [(\lambda_0 - \lambda) R_{\lambda_0}(T)]^n$$

egy korlátos operátort ad meg, ami nem más mint

$$R_{\lambda_0}(T) \left(I - (\lambda_0 - \lambda_0) R_{\lambda_0}(T)\right)^{-1} = R_\lambda(T).$$

(Utóbbi egyenlőség legegyszerűbben úgy látható, hogy mindkét oldal inverzét vesszük.)

□

A $\sigma(T) := \mathbb{C} \setminus \rho(T)$ halmazt a T operátor *spektrumának* nevezzük.

7. tétel: *Egy korlátos operátor spektruma nem üres zárt halmaz.*

Bizonyítás: Tegyük fel, indirekt okoskodáshoz, hogy $\sigma(T) = \emptyset$, azaz az $R_\lambda(T)$ rezolvens operátor minden $\lambda \in \mathbb{C}$-re értelmezve van. Megmutatjuk, hogy minden $x, y \in \mathcal{H}$ esetén a

$$\lambda \mapsto \langle x, R_\lambda(T) y \rangle$$

függvény korlátos és analitikus. Az előző tétel bizonyítása szerint

$$\langle x, R_\lambda(T)y\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left\langle x, R_{\lambda_0}(T)^{n+1}y\right\rangle (\lambda_0-\lambda)^n\,,$$

azaz a függvény minden $\lambda_0 \in \mathbb{C}$ pont egy környezetében konvergens hatványsorral áll elő. Ezért analitikus. Másrészt

$$\begin{aligned} |\langle x, R_\lambda(T)y\rangle| &\leq \|x\|\cdot\|y\|\,\|R_\lambda(t)\| \leq \|x\|\,\|y\|\frac{1}{|\lambda|}\sum_{n=0}^{\infty}\left\|\frac{T}{\lambda}\right\|^n \\ &= \|x\|\cdot\|y\|\frac{1}{|\lambda|-\|T\|}\,. \end{aligned}$$

Ez adja a függvény korlátosságát, és azt is, hogy 0 a határértéke, ha $|\lambda| \to +\infty$. Liouville tétele szerint egy korlátos teljes analitikus függvény konstans. A konstans értéke 0, hiszen ez a végtelenben vett határértéke a függvénynek. Tehát

$$\langle x, R_\lambda(T)y\rangle = 0$$

minden $x, y \in \mathcal{H}$ és $\lambda \in \mathbb{C}$ esetén. Ez nyilván lehetetlen, tehát a $\sigma(T) = \emptyset$ feltevés hamis.

□

Az előző tétel bizonyítása azt is mutatta, hogy az $R_\lambda(T)$ rezolvens $\rho(T) \to B(\mathcal{H})$ analitikus függvény, amit úgyis érthetünk, hogy $\lambda \mapsto \langle \xi,\, R_\lambda(T)\eta\rangle$ analitikus bármilyen $\xi, \eta \in \mathcal{H}$ vektorokra. A

$$(\lambda\cdot I - T)^{-1} - (\mu\cdot I - T)^{-1} = (\mu-\lambda)(\lambda\cdot I - T)^{-1}(\mu\cdot I - T)^{-1}$$

azonosságot felhasználhatjuk a rezolvens differenciálására:

$$\frac{R_\lambda(T) - R_\mu(T)}{\lambda-\mu} = -R_\lambda(T)R_\mu(T)\,. \tag{1.32}$$

A $\lambda \to \mu$ limesz normában létezik, így az $R_\lambda(T)$ rezolvens (Frechet-) deriváltja $-R_\lambda(T)^2$.

25. példa: A rezolvens jelentősége azon a tényen is alapszik, hogy a segítségével az operátor függvényei kifejezhetők. Legyen D egy olyan nyilt tartomány, amely tartalmazza T spektrumát. Ekkor az $R_z(T)$ rezolvens a D tartomány ∂D határa egy környezetében analitikus függvény, és bármilyen D környezetében analitikus f függvényre képezhetjük az

$$\frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\partial D} f(z)R_z(T)\,dz$$

vonalintegrált. Legyen az egyszerűség kedvéért $f(z) = z^n$ és T egyetlen Jordan-blokkból álló mátrix:

$$T := \begin{bmatrix} x & 1 & 0 \\ 0 & x & 1 \\ 0 & 0 & x \end{bmatrix}.$$

Ekkor $T = x\cdot I + N$, ahol N az operátor nilpotens része, $N^3 = 0$. Evidens módon

$$T^n = x^n\cdot I + (n-1)x^{n-1}N + \frac{(n-1)(n-2)}{2}x^{n-2}N^2\,.$$

Másrészt T rezolvense a 24. példa szerint

$$R_z(T) = (z-x)^{-1}\cdot I + (z-x)^{-2}N + (z-x)^{-3}N^2\,.$$

Ezt felhasználva kiszámolhatjuk a fenti vonalintegrált:

$$\frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\partial D} f(z)R_z(T)\,dz = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\partial D} f(z)(z-x)^{-1}I\,dz +$$

$$\frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\partial D} f(z)(z-x)^{-2}N\,dz+\frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\partial D} f(z)(z-x)^{-3}N^2\,dz=$$

$$f(x)I+\frac{1}{2\pi i}\int_{\partial D} f'(z)(z-x)^{-1}N\,dz+\frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\frac{1}{2}\int_{\partial D} f''(z)(z-x)^{-1}N^2\,dz$$

$$=f(x)I+f'(x)N+\frac{1}{2}f''(x)N^2\,.$$

(Itt felhasználtuk a Cauchy-formulát az f függvényre, ezután parciálisan integráltunk, majd megint a Cauchy-formulát használtuk f'-re és f''-re.) Arra az eredményre jutottunk, hogy a vizsgált esetben

$$f(T)=\frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\partial D} f(z)R_z(T)\,dz\,.$$

Ez a formula akár $f(T)$ definíció is lehet, ha f a T operátor spektruma egy környezetében analitikus függvény. Nézzük meg az $f(z)=z^n$ esetet most tetszőleges $T\in B(\mathcal{H})$ operátorra.

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\partial D} z^nR_z(T)\,dz &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\sum_{k=0}^{\infty}\int_{\partial D} z^{n-k-1}T^k\,dz\\ &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_{\partial D} z^{-1}T^n\,dz=T^n\,,\end{aligned}$$

ugyanis $k\neq n$ esetén a körintegrál eltűnik a Neumann-sorfejtés tagjaira.

□

$\sigma(T)$ zárt halmaz és

$$r(T)=\sup\{|\lambda|:\lambda\in\sigma(T)\}\tag{1.33}$$

neve *spektrálsugár.*

8. tétel:

$$r(T)=\lim_{n\to\infty}\|T^n\|^{1/n}\,.$$

□

Ebből nyomban következik, hogy $r(T)\leq\|T\|$ és önadjungált $A=A^*\in B(\mathcal{H})$ operátor esetében $r(A)=\|A\|$. (Valóban, $\|A^{2^n}\|=\|A\|^{2^n}$ minden n-re az $\|A^*A\|=\|A\|^2$ egyenlőség iterálásával.)

A T operátor $\sigma(T)$ spektrumát három részre osztjuk, annak megfelelően, hogy miért nem létezik $\lambda\cdot I-T$ inverze. Ha $\mathrm{Ker}\,(\lambda\cdot I-T)\neq\{0\}$, akkor van olyan $0\neq x\in\mathcal{H}$ vektor, amire $Tx=\lambda x$. Ekkor λ-t T *sajátértékének*, x-et a λ-hoz tartozó *sajátvektornak* mondjuk. A sajátértékek alkotják a $\sigma_p(T)$ *pontspektrumot.* Ha $\mathrm{Ker}\,(\lambda\cdot I-T)=\{0\}$ és $\mathrm{Rng}\,(\lambda\cdot I-T)$ nem sűrű $\mathcal{H}$-ban, akkor λ a *reziduális spektrumhoz* tartozik, ennek jele $\sigma_r(T)$. Végül, ha $\mathrm{Ker}\,(\lambda\cdot I-T)=\{0\}$ és $\mathrm{Rng}\,(\lambda I-T)\subset\mathcal{H}$ egy sűrű altér, akkor λ a $\sigma_f(T)$ *folytonos spektrum* eleme. (Megjegyezzük, hogy a $\mathrm{Ker}\,(\lambda I-T)=\{0\}$ és $\mathrm{Rng}\,(\lambda I-T)=\mathcal{H}$ esetben $(\lambda\cdot I-T)^{-1}$ operátor létezik, a folytonosságát a nyílt leképezés tétele garantálja.)

26. példa: Legyen $S^*:\ell^2(\mathbb{N})\to\ell^2(\mathbb{N})$ a balra tolás operátora. S^* sajátértékeinek meghatározásához az

$$(x_2,x_3,\ldots)=(\lambda x_1,\lambda x_2,\ldots)$$

egyenletet kell megoldani. Ennek $x=(x_1,x_2,\ldots)$ megoldása $(1,\lambda,\lambda^2,\ldots)$, ami $|\lambda|<1$ esetén ad $l^2(\mathbb{N})$-beli sorozatot. Ezért $\sigma_p(S^*)=\{\lambda\in\mathbb{C}:|\lambda|<1\}$. Mivel $\sigma(S^*)$ zárt és $r(S^*)\leq\|S^*\|=1$, $\sigma(S^*)=\{\lambda\in\mathbb{C}:|\lambda|\leq1\}$. El akarjuk dönteni, hogy a $|\lambda|=1$ pontok a reziduális vagy a folytonos spektrumhoz tartoznak. Ha $\{\lambda x-S^*x:x\in\ell^2\}$ nem sűrű, akkor van olyan $y\neq0$ vektor, amelyre

$\langle \lambda x - S^*x, y\rangle = 0$ minden $x \in \ell^2$-re. Ekkor $\langle x, (\overline{\lambda} - S)y\rangle = 0$ és $\overline{\lambda} y = Sy$, vagyis $\overline{\lambda}$ sajátértéke a jobbra tolás S operátorának. Könnyen ellenőrizhető, hogy S-nek nem lehet sajátvektora, tehát $\{\lambda x - S^*x : x \in \ell^2\}$ biztosan sűrű. Így $\{\lambda : |\lambda| = 1\} = \sigma_f(S^*)$.

□

Amit az S^* operátorral kapcsolatban bebizonyítottunk, az általában is érvényes:

$$(\operatorname{Rng} T)^\perp = \operatorname{Ker} T^* \tag{1.34}$$

A továbbiakban $\lambda \cdot I - T$ helyett egyszerűen $\lambda - T$-t írunk.

4. lemma: *Legyen $T \in B(\mathcal{H})$ egy normális operátor. Ekkor $\lambda \in \rho(T)$ akkor és csak akkor, ha van olyan $C > 0$ szám, amelyre*

$$\|(\lambda - T)x\| \geq C\|x\|$$

minden $x \in \mathcal{H}$ vektorra.

Bizonyítás: Ha $\lambda \in \rho(T)$, akkor $C = \|R_\lambda(T)\|^{-1}$ megteszi.

A megfordítás igazolásához induljunk ki a fenti feltételből. Ez maga után vonja, hogy $\operatorname{Ker}(\lambda - T) = \{0\}$. Mivel egy normális operátorra

$$\|(\lambda - T)x\| = \|(\bar{\lambda} - T^*)x\|\,,$$

$\operatorname{Ker}(\bar{\lambda} - T^*) = \{0\}$, és (1.34) szerint $\operatorname{Rng}(\lambda - T)$ sűrű. Ugyanakkor a feltételünkből következik, hogy $\operatorname{Rng}(\lambda - T)$ zárt. Ezért $\lambda \in \rho(T)$.

□

Használjuk a $\mathbb{T} = \{z \in \mathbb{C} : |z| = 1\}$ jelölést.

9. tétel: *Ha U egy unitér operátor, akkor $\sigma(U) \subset \mathbb{T}$.*

Bizonyítás: U normális, és

$$\|(\lambda - U)x\|^2 = \|Ux\|^2 + |\lambda|^2\|x\|^2 - 2\mathrm{Re}\,\langle Ux, \lambda x\rangle \geq (1 - |\lambda|)^2\|x\|^2\,.$$

Most a lemma alkalmazható, ha $|\lambda| \neq 1$, akkor $\lambda \in \rho(U)$. (Egy másik bizonyítást tartalmazott a 23. példa.)

□

27. példa: A Fourier-transzformáció a $L^2(\mathbb{R})$ tér egy $\mathcal{F}$ unitér operátorának tekinthető. $\mathcal{F}$-nek az $1, \mathrm{i}\,, -1, -\mathrm{i}$ számok a sajátértékei. A sajátfüggvények az ún. Hermite-féle függvények:

$$f_n(x) = e^{-x/2}H_n(x)\,.$$

($H_n(x)$ az n-edfokú Hermite polinom, lásd a 6. példát.) Számolás adja, hogy $\mathcal{F}f_n = (-\mathrm{i}\,)^n f_n$. Mivel a Hermite-féle függvények teljes ortogonális rendszert alkotnak $\{1, \mathrm{i}\,, -1, -\mathrm{i}\,\}$ a teljes spektrum.

□

10. tétel: *Legyen $A \in B(\mathcal{H})$ egy önadjungált operátor, és $M := \sup\{\langle x, Ax\rangle : \|x| = 1\}$, $m := \inf\{\langle x, Ax\rangle : \|x| = 1\}$. Ekkor $\sigma(A) \subset [m, M]$, továbbá A-nak nincsen reziduális spektruma.*

Bizonyítás: Legyen $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$. Ekkor

$$\begin{aligned} \|[(\lambda + \mathrm{i}\,\mu) - A]x\|^2 &= \|(A-\lambda)x\|^2 + \mu^2\|x\|^2 + 2\mu \mathrm{Re}\,\mathrm{i}\,\langle (A-\lambda)x, x\rangle \\ &= \|(A-\lambda)x\|^2 + \mu^2\|x\|^2 \\ &\geq \mu^2\|x\|^2 . \end{aligned}$$

Ha $\mu \neq 0$, akkor az előző lemma elegendő ahhoz, hogy a $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ következtetésre jussunk.

Amennyiben $\lambda > M$, akkor bármilyen x egységvektorra

$$\|(\lambda - A)x\| \geq \langle (\lambda - A)x, x\rangle \geq \lambda - M ,$$

amiből $\lambda \in \rho(A)$. A $\lambda < m$ eset teljesen hasonló.

Ha $\lambda \in \mathbb{R}$ olyan szám, hogy $\mathrm{Rng}\,(\lambda - A)$ nem sűrű, akkor $\mathrm{Rng}\,(\lambda - A)^\perp = \mathrm{Ker}\,(\lambda - A) \neq \{0\}$, tehát λ a pont spektrumban van.

□

Az $A \in B(\mathcal{H})$ operátort ***pozitívnak*** mondjuk, ha önadjungált és spektruma $\mathbb{R}^+$ része. Másszóval $A \geq 0$ ha $\langle x, Ax\rangle \geq 0$ a Hilbert-tér bármely x vektorára. Az utóbbi jellemzésből látható, hogy pozitív operátorok összege is az. (Két pozitív operátor szorzata általában nem pozitív, hiszen még csak nem is önadjungált.)

1.11 Önadjungált operátorok függvényei

Legyen A egy korlátos operátor és $p(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$ egy polinom. Ekkor $\sum_{i=0}^n a_i A^i$ egy korlátos operátor, amire joggal használjuk a $p(A)$ jelölést. Rögzített A-ra a $p \mapsto p(A)$ megfeleltetés lineáris és multiplikatív. Célunk az, hogy a Weierstrass-féle approximációs tételt felhasználva egy tetszőleges folytonos f függvényre és $A = A^*$ operátorra értelmezzük az $f(A)$ operátort.

5. lemma: *Ha p egy polinom, és $A \in B(\mathcal{H})$, akkor $\sigma(p(A)) = \{p(\lambda) : \lambda \in \sigma(A)\}$.*

Bizonyítás: Tételezzük fel, hogy $\lambda \in \sigma(A)$. Mivel λ gyöke a $p(x) - p(\lambda)$ polinomnak, $p(x) - p(\lambda) = (x - \lambda)q(x)$ egy alkalmas $q(x)$ polinomra. Ebből kapjuk, hogy $p(A) - p(\lambda) = (A - \lambda)q(A)$. Mivel $(A - \lambda)$ nem invertálható, $p(A) - p(\lambda)$ sem az, másszóval $p(\lambda) \in \sigma(p(A))$. Így $p(\sigma(A)) \subset \sigma(p(A))$.

Amennyiben $\mu \in \sigma(p(A))$ és $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ a $p(x) - \mu$ polinom gyökei, akkor

$$p(A) - \mu = a(A - \lambda_1)(A - \lambda_2)\dots(A - \lambda_n) .$$

A jobboldal minden tényezője nem lehet invertálható, mert akkor a teljes szorzat is invertálható lenne, de $p(A) - \mu$ nem invertálható a feltevésünk szerint. Tehát $(A - \lambda_i)$ nem invertálható valamely $1 \leq i \leq n$ értékre. Ez azt jelenti, hogy $\lambda_i \in \sigma(A)$ és $p(\lambda_i) = \mu$. Beláttuk, hogy $\sigma(p(A)) \subset p(\sigma(A))$.

□

6. lemma: *Legyen $A = A^* \in B(\mathcal{H})$ és p egy polinom. Ekkor $\|p(A)\| = \sup\{|p(\lambda)| : \lambda \in \sigma(A)\}$.*

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} \|p(A)\|^2 &= \|p(A)^* p(A)\| = \|\overline{p}p(A)\| \\ &= \sup\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(\overline{p}p(A))\} \\ &= \sup\{\overline{p}p(\lambda) : \lambda \in \sigma(A)\} \\ &= (\sup\{|p(\lambda)| : \lambda \in \sigma(A)\})^2 . \end{aligned}$$

Itt először a norma C^*-tulajdonságát használtuk, ezután azt a tényt, hogy önadjungált operátor normája és spektrálsugara azonos, végül pedig a megelőző lemmát.

□

11. tétel: (Folytonos függvénykalkulus) *Legyen $A = A^* \in B(\mathcal{H})$. Ekkor létezik és egyértelműen meghatározott egy olyan $\Phi_A : C(\sigma(A)) \to B(\mathcal{H})$ lineáris leképezés, amely az alábbi tulajdonságokkal rendelkezik:*

(1) $\Phi_A(fg) = \Phi_A(f)\Phi_A(g)$

(2) $\Phi_A(\overline{f}) = \Phi_A(f)^*$

(3) $\Phi_A(1) = I$, $\Phi_A(\mathrm{id}_{\sigma(A)}) = A$

(4) $\|\Phi_A(f)\| = \sup\{|f(\lambda)| : f \in \sigma(A)\}$

(5) Ha $f \geq 0$, akkor $\Phi_A(f) \geq 0$.

(6) Ha $Ax = \lambda x$, akkor $\Phi_A(f)x = f(\lambda)x$.

(7) $\sigma(\Phi_A(f)) = f(\sigma(A))$.

Bizonyítás: A $C(\sigma(A))$ térben a polinomok sűrű halmazt alkotnak a Weierstrass-féle approximációs tétel értelmében. Ha $p \in C(\sigma(A))$ egy polinom, akkor $\Phi_0(p)$-t értemezzük, úgy, hogy $\Phi_0(p) = p(A)$. Az így értelmezett Φ_0 leképezés rendelkezik az (1–7) tulajdonságok mindegyikével. Ez jórészt triviális, de (4)-et és (7) az előző lemmák tartalmazzák. (4) azt jelenti, hogy Φ_0 izometria, azaz $\|\Phi_0(p)\| = \|p\|_\infty$, ahol $\|\cdot\|_\infty$ a $C(\sigma(A))$ térben vett sup normát jelöli. Mivel $B(\mathcal{H})$ teljes tér az operátornormára nézve, Φ_0-nak létezik izometrikus lineáris kiterjesztése $C(\sigma(A))$-ra, és ez lesz Φ_A. Végiggondolandó, hogy a kiterjesztés során a felsorolt tulajdonságok megmaradnak.

□

28. példa: Legyen $A = A^* \in B(\mathcal{H})$ egy önadjungált operátor, és tekintsük a

$$g(z) := \frac{z - \mathrm{i}}{z + \mathrm{i}}.$$

Ez folytonos az egész számegyenesen, és a függvénykalkulus értelmezi a $g(A)$ operátort. A $g(z)\overline{g(z)} = 1$ relációból következik, hogy $g(A)$ unitér operátor. Az A operátor *Cayley-transzformáltjának* nevezik.

□

29. példa: Ha $A = A^* \in B(\mathcal{H})$ és $A \geq 0$, akkor $\sigma(A) \subset \mathbb{R}^+$. A négyzetgyök függvény folytonos $\mathbb{R}^+$-on, ezért a megelőző tétel értelmében létezik egy olyan $B \geq 0$ operátor, amire $B^2 = A$. Valóban, jelölje f az $x \mapsto \sqrt{x}$ függvényt. Ekkor a $B = \Phi_A(f)$ operátor ilyen, amennyiben Φ_A-t a tétel szerint konstruáljuk A-hoz. Az $A^{1/2}$ operátort a négyzetgyök függvény Taylor-sorából kézzelfoghatóbb módon is előállíthatjuk.

Ismeretes, hogy

$$\sqrt{1+x} = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{1/2}{n} x^n \qquad (|x| < 1)\,.$$

Ezért $0 < \varepsilon \cdot I \leq A \leq I$ esetén

$$\sqrt{A} = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{1/2}{n} (A - I)^n$$

ugyanis $\|A - I\| \leq 1 - \varepsilon$ és a sor normában konvergens.

$\square$

Tetszőleges $X \in B(\mathcal{H})$ esetén $X^*X \geq 0$ és ezért beszélhetünk az $(X^*X)^{1/2}$ operátorról, amit $|X|$-szel jelölünk. A jelölés nem akarja sugallni az $|XY| = |X| \cdot |Y|$ és $|X+Y| \leq |X| + |Y|$ tulajdonságokat. Ezek ugyanis nagyon ritkán teljesülnek.

12. tétel: *Tetszőleges $X \in B(\mathcal{H})$ operátor előáll $X = V|X|$ alakban egy olyan V operátorral, amely $|X|$ képterén izometrikus.*

Bizonyítás: Legyen $V\,|X|\,y = Xy$. Ekkor

$$\begin{aligned}\|V\,|X|\,y\|^2 &= \|Xy\|^2 = \langle X^*Xy, y\rangle = \langle (X^*X)^{1/2}y, (X^*X)^{1/2}y\rangle \\ &= \|\,|X|\,y\|^2 .\end{aligned}$$

$\square$

A tételben szereplő $X = V|X|$ felbontást *poláris felbontásnak* hívják. Ha $X = UH$ és $H \geq 0$, U izometrikus H képterén és 0 az erre merőleges altéren, akkor az UH felbontás egyértelmű, és a fent konstruált poláris előállítással azonos.

30. példa: Legyen $A = A^* \in B(\mathcal{H})$. Az A operátor függvényei közül $U_t := \exp(\mathrm{i}\,tA)$ egy fontos példa. Mivel

$$\overline{\exp(\mathrm{i}\,tx)} = 1/\exp(\mathrm{i}\,tx)$$

minden $x \in \mathbb{R}$ valós számra, U_t egy unitér operátor, $(U_t)^* = U_t^{-1} = U_{-t}$. Továbbá az

$$\exp(\mathrm{i}\,tx)\exp(\mathrm{i}\,sx) = \exp(\mathrm{i}\,(t+s)x)$$

azonosság azt is implikálja, hogy $U_tU_s = U_{t+s}$. Unitér operátoroknak ily módon paraméterezett családját, *egyparaméteres unitér csoportnak* fogjuk nevezni. Belátjuk, hogy $t \mapsto U_t$ normában folytonos. Ehhez az exponenciális függvény Taylor-sorát használhatjuk fel:

$$U_t - U_s = U_s(U_{t-s} - I) = U_s \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[\mathrm{i}\,(t-s)]^n}{n!} A^n$$

és

$$\|U_t - U_s\| \leq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\mathrm{i}\,(t-s)|^n}{n!} \|A\|^n = e^{|t-s|\,\|A\|} - 1 .$$

Ez a becslés mutatja a folytonosságot.

$\square$

31. példa: Legyen $T_t : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$, $(T_tf)(x) = f(t+x)$. Ekkor T_t egy unitér operátor, sőt egyparaméteres csoportja unitéreknek, ugyanis $T_tT_s = T_{t+s}$ nyilvánvalóan teljesül. Igaz-e, hogy T_t előáll $\exp(itA)$ alakban, valamely korlátos önadjungált $A \in B(L^2(\mathbb{R}))$ operátor segítségével? Megmutatjuk, hogy nem, ugyanis $t \mapsto T_t$ nem folytonos normában. Legyen

$$f_\varepsilon(x) = \begin{cases} (2\varepsilon)^{-1/2} & |x| < \varepsilon, \\ 0 & |x| \geq \varepsilon. \end{cases}$$

Ekkor

$$\|T_tf_\varepsilon - f_\varepsilon\| = \begin{cases} \sqrt{t/\varepsilon} & \text{ha} \quad |t| < 2\varepsilon \\ \sqrt{2} & \text{ha} \quad |t| \geq 2\varepsilon \end{cases}$$

és
$$\|T_t - I\| \geq \sqrt{2}$$
bármilyen kicsi is t.

Később látni fogjuk, hogy T_t előáll $\exp(\mathrm{i}\,tH)$ alakban, de a H önadjungált operátor nem korlátos.

$\square$

Legyen $(A_n) \subset B(\mathcal{H})$ korlátos operátorok sorozata és $A \in B(\mathcal{H})$. Azt mondjuk, hogy A_n tart pontonként A-hoz, ha $\|(A_n - A)x\| \to 0$ bármilyen $x \in \mathcal{H}$ vektorra. A *pontonkénti konvergencia* jelölése $A_n \xrightarrow{so} A$. Azt is mondjuk, hogy *A_n tart A-hoz az erős operátor topológiában.* (Valójában az utóbbit tükrözi a jelölésünk.)

32. példa: Legyen $\mathcal{H} = L^2(\mu)$ és (f_n) függvények olyan sorozata, hogy $|f_n(x)| \leq M$ minden $x \in X$ pontra és $n \in \mathbb{N}$-re. Tételezzük fel, hogy $f_n(x) \to f(x)$ majdnem mindenütt. Ekkor $M_{f_n} \xrightarrow{so} M_f$ a megfelelő szorzásoperátorok sorozatára.

Legyen $g \in L^2(\mu)$. $\|(M_{f_n} - M_f)g\|^2 = \int |f_n(x) - f(x)|^2\, |g(x)|^2\, d\mu(x)$. Az integrandus pontonként 0-hoz tart és a triviális
$$|f_n(x) - f(x)|^2\, |g(x)|^2 \leq 4M^2 |g(x)|^2$$
becslés mutatja integrálható majoráló függvény létezését. A Lebesgue-tétel értelmében az integrál 0-hoz tart.

$\square$

33. példa: Legyen $T_t : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$, $(T_t f)(x) = f(t+x)$. Az egyparaméteres T_t csoport folytonos az erős operátor topológiában. Ezt $t = 0$-ban mutatjuk meg.

Legyen $\mathcal{M}_0 := \{f \in L^2(\mathbb{R}) : \lim_{t\to 0} T_t f = f\}$. Ekkor $\mathcal{M}_0$ egy lineáris altér. Legyen $f_n \in \mathcal{M}_0$ és $f_n \to f$. A
$$\begin{aligned} \|T_t f - f\| &\leq \|T_t f - T_t f_n\| + \|T_t f_n - f_n\| + \|f_n - f\| \\ &= \|T_t f_n - f_n\| + 2\|f_n - f\| \end{aligned}$$
becslés mutatja, hogy $\mathcal{M}_0$ zárt altér. Így annak igazolásához, hogy $\mathcal{M}_0 = L^2$, elég látni, hogy $\mathcal{M}_0$ tartalmazza a kompakt tartójú folytonos függvényeket. Legyen f egy ilyen függvény. Ekkor
$$\|T_t f - f\|^2 = \int |f(t+x) - f(x)|^2\, dx\,,$$
ami tart 0-hoz, ha $t \to 0$ a Lebesgue-tétel alapján. (Létezik integrálható majoraló függvény, például egy kompakt intervallum karakterisztikus függvénye szorozva f korlátjával.)

$\square$

7. lemma: *Ha $A, B_n, B \in B(\mathcal{H})$ önadjungált operátorok, $A \leq B_n \leq B$ és $\langle x, B_n x\rangle \to \langle x, Bx\rangle$ $(x \in \mathcal{H})$, akkor $B_n \xrightarrow{so} B$.*

Bizonyítás:
$$\begin{aligned} \|(B - B_n)x\|^2 &= \langle (B - B_n)x, (B - B_n)x\rangle \\ &= \langle (B - B_n)(B - B_n)^{1/2}x, (B - B_n)^{1/2}x\rangle \\ &\leq \|B - B_n\| \langle (B - B_n)^{1/2}x, (B - B_n)^{1/2}x\rangle \\ &\leq (\|A\| + \|B\|)\langle (B - B_n)x, x\rangle \to 0\,. \end{aligned}$$

□

A lemmából következik, hogy ha $B_1 \leq B_2 \leq \ldots$ önadjungált operátorok olyan növő sorozata, hogy $B_n \leq C$ valamely korlátos $C = C^*$ operátorra, akkor létezik egy olyan B operátor, amelyre $B_n \xrightarrow{so} B$. Ugyanis a polarizációs azonosság és feltevés szerint

$$B(x, y) = \lim_{n \to \infty} \langle x, B_n y \rangle$$

egy korlátos forma, $\|C\|$ korláttal, amit egy $B = B^* \in B(\mathcal{H})$ operátor reprezentál, azaz

$$\lim_{n \to \infty} \langle x, B_n y \rangle = \langle x, Bx \rangle .$$

Ezután csak a lemmára kell hivatkoznunk, és megállapíthatjuk, hogy $B_n \xrightarrow{so} B$.

1.12 A spektrál tétel

Rendeljünk hozzá a komplex sík minden B Borel-halmazához egy $E(B) \in B(\mathcal{H})$ operátort. Azt mondjuk, hogy $E : B \mapsto E(B)$ egy *pozitív operátor értékű mérték*, ha

(1) $0 \leq E(B) \leq I$, $E(\emptyset) = 0$, $E(\mathbb{C}) = I$

(2) Ha (B_i) páronként diszjunkt Borel-halmazok sorozata és $B = \cup_i B_i$, akkor $E(B)x = \sum_{i=1}^{n} E(B_i)x$ minden x vektorra.

A (2) feltétel azt mondja, hogy a hozzárendelés additív az erős operátor topológiában.

34. példa: Legyen $\mathcal{H} = L^2(0,1)$. Ha $B \subset [0,1]$ egy Boral-halmaz, akkor értelmezzük $E(B)$-t úgy, mint a B halmaz karakterisztikus függvényeivel való szorzás operátora.

Így egy olyan pozitív operátor értékű mértéket kapunk amelyre, $E(B)$ projekció bármilyen $B \subset [0,1]$ Borel-halmaz esetében. A pozitív operátor értékű mérték tulajdonságai közül csak az additivitás nem nyilvánvaló. $E\left(\cup_{i=1}^{n} B_i\right)$ az $\cup_{i=1}^{n} B_i$ halmaz f_n karakterisztikus függvényével való szorzás operátora. $f_n(x) \to \chi_B(x)$ minden $t \in [0,1]$ pontra. Ezért a 32. példa szerint $E\left(\cup_{i=1}^{n} B_i\right) \xrightarrow{so} E(B)$.

□

A továbbiakban olyan pozitív operátor értékű mértékek lesznek fontosak, amelyek értékei projekciók. Ebben az esetben projektor értékű mértékről, vagy röviden *projektormértékről* beszélünk. Legyen $E : B \mapsto E(B)$ egy projektormérték és $x \in \mathcal{H}$. Ekkor

$$\mu_x(B) = \langle x, E(B)x \rangle \tag{1.35}$$

egy közönséges mérték. A megfordítás is igaz, ha minden B Borel-halmazra adott egy $E(B) \in B(\mathcal{H})$ projekció úgy, hogy bármilyen $x \in \mathcal{H}$ vektorra (1.35) egy mértéket ad, akkor E egy projektormérték. Az E projektormérték és a $\{\mu_x : x \in \mathcal{H}\}$ mértékcsalád kapcsolatát használhatjuk fel arra, hogy kiépítsünk egy integrálelméletet projektor mértékekre. Legyen f egy komplex síkon értelmezett korlátos mérhető függvény. Az

$$A = \int f(\lambda)\, dE(\lambda)$$

jelölést akkor fogjuk használni, ha bármilyen $x \in \mathcal{H}$ vektorra

$$\langle x, Ax\rangle = \int f(\lambda)\, d\mu_x(\lambda)$$

teljesül. μ_x definícióját beolvaszthatjuk az írásmódba, és röviden

$$\langle x, Ax\rangle = \int f(\lambda)\, d\langle x, E(\lambda)x\rangle(\lambda)\ .$$

35. példa: Legyen E a 34. Példában szereplő projektormérték. Ekkor egy $f \in L^\infty(0,1)$ függvényre

$$\int f(\lambda) dE(\lambda) = M_f\ .$$

□

Legyen $g \in L^2(0,1)$. A μ_g mérték definíciója szerint

$$\mu_g(B) = \langle g, E(B)g\rangle = \langle g, \chi_B g\rangle = \int_B |g(t)|^2 dt\ .$$

Így μ_g abszolút folytonos a Lebesgue-mértékre nézve, és

$$\int h(t) d\mu_g(t) = \int h(t)|g(t)|^2 dt\ .$$

Ezért

$$\int f(\lambda) d\langle g, E(\,\cdot\,)g\rangle(\lambda) = \int f(\lambda)|g(\lambda)|^2 dt = \langle g, M_f g\rangle\ .$$

13. tétel: (Spektrál tétel). *Legyen $A = A^* \in B(\mathcal{H})$. Ekkor létezik A spektrumán egy olyan E projektormérték, amire*

$$f(A) = \int f(\lambda) dE(\lambda) \qquad (f \in C(\sigma(A)))\ .$$

A tételt nem bizonyítjuk a szigorú értelemben véve, de körvonalazzuk a bizonyítás vázát. Az A operátor folytonos függvénykalkulusából indulunk ki, lásd 11. Tétel.

Legyen $\phi_A : C(\sigma(A)) \to B(\mathcal{H})$ az a leképezés, amelyre $\phi_A(f) = f(A)$. Ha $x \in \mathcal{H}$, akkor

$$\varphi_x : f \mapsto \langle x, \phi_A(f)x\rangle$$

egy lineáris funkcionál $C(\sigma(A))$, amelynek lényeges tulajdonságai

(1) $\varphi_x(1) = \|x\|^2$.

(2) Ha $f \geq 0$, akkor $\varphi_x(f) \geq 0$

(3) $|\varphi_x(f)| \leq \|f\|_\infty$.

Ezek a tulajdonságok következnek rendre a $\phi_A(1) = I$, $\phi_A(\overline{g}g) \geq 0$, $\|\phi_A(f)\| = \|f\|_\infty$ tulajdonságaiból a függvénykalkulusnak. A Riesz-Markov reprezentációs tétel szerint létezik egy μ_x mérték $\sigma(A)$ Borel-halmazain, amire

$$\varphi_x(f) = \int f(\lambda) d\mu_x(\lambda)$$

azaz

$$\langle x, f(A)x\rangle = \int f(\lambda) d\mu_x(\lambda) .$$

Ez már hasonlít arra, amit bizonyítanunk kéne, de még igazolni kell, hogy van egy olyan $E(\,\cdot\,)$ projektormérték, amire

$$\langle x, E(\,\cdot\,)x\rangle = \mu_x$$

teljesül. Be kell látni, hogy rögzített $H \subset \sigma(A)$-ra van egy olyan $B(x,y)$ korlátos forma, amelyre

$$B(x,x) = \mu_x(H) . \tag{1.36}$$

Ezt a képletet használhatjuk $B(x,x)$ definiciójául, és a polarizációs azonosság segítségével értelmezzük $B(x,y)$-t, azaz

$$B(x,y) := \frac{1}{4}\big(\mu_{x+y}(H) - \mu_{x-y}(H) - \mathrm{i}\,\mu_{x+\mathrm{i}\,y}(H) + \mathrm{i}\,\mu_{x-\mathrm{i}\,y}(H)\big) . \tag{1.37}$$

(Számolással lehet ellenőrizni, hogy az (1.36) és (1.37) egyenletek összhangban vannak.) A kapott forma korlátossága nyilvánvaló $B(x,x) \le \|x\|^2 = \mu_x(H) \le \|x\|^2$ miatt. Az $E(H)$ operátor így adódik. Az operátor értékű mérték σ-additivitása egyenes következménye μ_x-ek σ-additivitásának. Egy kis nehézség annak igazolásában van, hogy $E(H)$ egy projekció.

Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy H egy nyílt intervallum karakterisztikus függvénye. Ekkor van egy olyan $0 \le f_n$ függvénysorozat, amely pontonként növekvően tart χ_H-hoz. Ekkor $f_n(A) \le f_{n+1}(A) \le \chi_H(A) = E(H)$.

$$\langle x, f_n(A)x\rangle = \int f_n(t)\, d\mu_x(t) \to \int \chi_H(t)\, d\mu_x(t) = \langle x, E(H)x\rangle$$

a monoton konvergencia tétel alapján. A 32. példa azt mondja, hogy ekkor $f_n(A) \xrightarrow{so} E(H)$. Ugyanez a gondolatmenet megismételhető az f_n^2 függvénysorozattal, tehát $f_n^2(A) \xrightarrow{so} E(H)$. Egyrészt $f_n^2(A) = [f_n(A)]^2$ a függvénykalkulus multiplikatív tulajdonsága miatt, másrészt korlátos halmazon az operátorok szorzása folytonos az erős operátor topológiában, vagyis $f_n(A) \xrightarrow{so} E(H)$ alapján $f_n(A)^2 \xrightarrow{so} E(H)^2$. Ebből arra következtethetünk, hogy $E(H) = E(H)^2$, vagyis $E(H)$ valóban projekció.

□

Egy önadjungált operátor spektrális felbontásának meghatározása általában nem könnyű feladat. A következő példában megkapjuk a spektrális felbontást, de a hozzá vezető útat más operátorra átvinni csak bizonyos esetekben lehet.

36. példa: Legyen $(b_n) \subset \mathbb{R}$ egy valós számsorozat. Értelmezzünk a $\delta_i \mapsto b_{i+1}\delta_{i+1}$ képlettel egy T lineáris operátort $\ell^2(\mathbb{Z}^+)$-on. Ha (b_n) korlátos sorozat, akkor T korlátos operátor és $T+T^*$ önadjungált. Szeretnénk meghatározni $T+T^*$ spektrális előállítását.

A kanonikus bázisban $T+T^*$ mátrixa tridiagonális:

$$\begin{bmatrix} 0 & b_1 & & & & \\ b_1 & 0 & b_2 & & & \mathbf{0} \\ & b_2 & 0 & b_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & \mathbf{0} & & & & \end{bmatrix} . \tag{1.38}$$

Legyen A_n a végtelen mátrix $n \times n$-es bal felső sarka. Ha $p_n(x) = \mathrm{Det}\,(x - A_n)$ az A_n mátrix karakterisztikus polinomja, akkor ez a polinomsorozat a

$$p_{-1}(x) \equiv 0\,, \quad p_0(x) = 1\,, \quad p_{n+1}(x) = xp_n(x) - \lambda_n p_{n-1}(x)$$

rekurziónak tesz eleget, ahol $\lambda_n = b_n^2$. Létezik egy olyan μ mérték $\mathbb{R}$-en, amelyre a $p_u(x)$ polinomok ortogonálisak, és

$$\langle \delta_u, (T+T^*)^k \delta_v \rangle = \int x^k \tilde{p}_u(x) \tilde{p}_v(x)\, dx\,.$$

(Ezt az állítást egyáltalán nem indokoljuk.) $\tilde{p}_n(x)$ jelöli a normált n-edik ortogonális polinomot, tehát $\tilde{p}_n(x) = p_n(x)/\|p_n(x)\|$. $U : \delta_n \mapsto \tilde{p}_n$ egy $\ell^2(\mathbb{Z}^+) \to L^2(\mu)$ unitér operátor, hiszen bázist bázisba visz.

$$\begin{aligned} \langle \tilde{p}_u, U(T+T^*)U^* \tilde{p}_v \rangle &= \langle \delta_u, (T+T^*)\delta_v \rangle = \int x \tilde{p}_u(x) \tilde{p}_v(x)\, dx \\ &= \langle \tilde{p}_u, M \tilde{p}_v \rangle\,, \end{aligned}$$

ha M az x változóval való szorzás operátora $L^2(\mu)$-ben. $U(T+T^*)U^* = M$, a $T+T^*$ és az M operátorok *unitér ekvivalensek*. Mivel M spektrálmértékét jól ismerjük, segítségével megadható $T+T^*$ spektrális előállítása:

$$T + T^* = \int \lambda\, dUE(\,\cdot\,)U^*(\lambda)\,,$$

ahol $E(H)$ a H halmaz χ_H karakterisztikus függvényeivel való szorzás $L^2(\mu)$-n.

Az $1 = b_1 = b_2 = \ldots$ esetben

$$d\mu(t) = \frac{2}{\pi}\sqrt{1-t^2}\, dt\,,$$

azaz μ az ún. *Wigner-mérték*, vagy *félköreloszlás*, a megfelelő ortogonális polinomok bizonyos *Jacobi-féle polinomok*.

A Hermite-polinomok a

$$H_{n+1} = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

rekurziónak tesznek eleget. Ha úgy normáljuk őket, hogy a főegyütthatójuk 1 legyen, akkor a

$$h_{n+1}(x) = xh_n(x) - \frac{n}{2} h_{n-1}(x) \tag{1.39}$$

rekurzióhoz jutunk. Ez a $b_n = \sqrt{n/2}$ esetnek felel meg, ilyenkor $T+T^*$ mátrixa

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & & & \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & & \mathbf{0} & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & & & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & \mathbf{0} & & & & & \end{bmatrix}. \tag{1.40}$$

Ez a mátrix volt Heisenberg mátrix mechanikájanak egyik építőköve. Az $\ell^2(\mathbb{Z}^+)$ téren egy nem korlátos operátort ad meg, amely unitér ekvivalens a $d\mu(t) = e^{-t^2} dt$ mérték feletti L^2-téren a változóval való szorzással.

□

Legyen $T \in B(\mathcal{H})$ egy operátor és $x \in \mathcal{H}$ egy vektor. Azt mondjuk, hogy x *ciklikus vektora* a T operátornak, ha

$$\{p(T)x \,:\, p \text{ egy polinom}\}$$

sűrű $\mathcal{H}$-ban.

14. tétel: *Legyen $A = A^* \in B(\mathcal{H})$ egy olyan operátor, amelynek letezik ciklikus vektora. Ekkor létezik egy μ valószínűségi mérték az A operátor $\sigma(A)$ spektrumán és egy $U : L^2(\mu) \to \mathcal{H}$ unitér operátor, hogy*

$$A = UMU^*,$$

ahol M a változóval való szorzás operátora $L^2(\mu)$-n.

Bizonyítás: Legyen $x \in \mathcal{H}$ a ciklikus vektor, feltehető, hogy $\|x\| = 1$. Induljunk ki A spektrális előállításából:

$$A = \int \lambda \, dE(\lambda)$$

egy alkalmas projektormértékkel, és legyen $\mu(\,\cdot\,) := \langle x, E(\,\cdot\,)x \rangle$, ami egy valószínűségi mérték. Az U operátort értelmezzük az

$$f \mapsto f(A)x$$

képlettel folytonos f függvényekre, majd izometrikus tulajdonsága alapján terjesszük ki az egész $L^2(\mu)$-re. Mivel U képtere sűrű, unitérnek kell lennie.

Az $A = UMU^*$ reláció, pontosabban $AU = UM$, igazolása:

$$\begin{aligned} \langle f(A)x, AUg \rangle &= \langle x, \overline{f}(A)Ag(A)x \rangle = \int \overline{f}(\lambda)\lambda g(\lambda)\, d\mu(x) = \langle f, Mg \rangle \\ &= \langle Uf, UMg \rangle = \langle f(A)x, UMg \rangle \,. \end{aligned}$$

(f és g folytonos függvények.)

□

37. példa: Legyen $A = A^* \in B(\mathcal{H})$ és $\mathcal{H}$ véges dimenziós. Ekkor A-t egy önadjungált mátrixnak tekinthetjük. A-nak pontosan akkor van ciklikus vektora, ha minden sajátértéke egy multiplicitású.

Legyen $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ A sajátértéklistája és $e_1, \dots, e_n$ a megfelelő sajátvektorok, amelyek bázist alkotnak. Ha $\lambda_1 = \lambda_2$, akkor a $x = \sum c_i e_i$ vektor nem lehet ciklikus, hiszen $p(A)x = \sum p(\lambda_i) c_i e_i$ nem lehet sűrű, mert az első két koordináta aránya p-től független.

Másrészt, ha λ_i-k egymástól különbözőek, akkor $x = \sum e_i$ ciklikus vektor. Az y vektor $p(A)x$ formában való közelítéséhez elég olyan p polinomot találunk, hogy $|p(\lambda_i) - y_i| < \varepsilon$. Ez lehetséges a Weierstrass-féle approximációs tétel miatt. Ha g egy olyan kompakt tartójú folytonos függvény, amelyre $g(\lambda_i) = y_i$, akkor g olyan p közelítése megteszi, amelyre $|g(t) - p(t)| < \varepsilon$ egy λ_i-ket tartalmazó intervallumon.

□

Ha A és B felcserélhető önadjungált mátrixok, akkor van olyan bázisa a véges dimenziós térnek, amelyben mindkettő diagonális. Ennek az egyszerű ténynek a korlátos önadjungált operátorok körében a következő általánosítása igaz.

15. tétel: *Ha A és B felcserélhető korlátos önadjungált operátorok, akkor létezik olyan E projektor értékű mérték a számegyenesen, hogy*

$$A = \int f(\lambda)\, dE(\lambda) \quad \text{és} \quad B = \int g(\lambda)\, dE(\lambda)$$

alkalmas f és g függvényekre.

Miután minden projektormérték egy önadjungált operátor spektrálmértéke, úgy is fogalmazhatunk, hogy felcserélhető operátorok egy velük felcserélhető harmadik operátor függvényei.

1.13 Nevezetes topológiák

Legyen $\mathcal{H}$ egy Hilbert-tér. A normából származó topológia mellett egy másik topológiát is érdemes bevezetni $\mathcal{H}$-n. Azt mondjuk, hogy (x_n) tart az x-hez *gyengén*, írásban $x_n \overset{w}{\to} x$, ha $\langle x_n, y\rangle \to \langle x, y\rangle$ minden $y \in \mathcal{H}$ vektorra. Természetesen $x_n \to x$ maga után vonja, hogy $x_n \overset{w}{\to} x$.

8. lemma: *$x_n \to x$ pontosan akkor, ha $x_n \overset{w}{\to} x$ és $\|x_n\| \to \|x\|$.*

Bizonyítás: Tételezzük fel, hogy $x_n \overset{w}{\to} x$ és $\|x_n\| \to \|x\|$. Ekkor

$$\|x - x_n\|^2 = \|x\|^2 + \|x_n\|^2 - 2\mathrm{Re}\,\langle x_n, x\rangle \to \|x\|^2 + \|x\|^2 - 2\mathrm{Re}\,\|x\|^2 = 0\,.$$

A megfordítás nyilvánvaló.

□

38. példa: Ha (e_n) egy ortonormált rendszer valamely $\mathcal{H}$ Hilbert-térben, akkor $e_n \overset{w}{\to} 0$, de e_n nem konvergál normában.

□

16. tétel: *Bármely $\mathcal{H}$ Hilbert-tér $\{x \in \mathcal{H} : \|x\| \le 1\}$ egységgömbje kompakt a gyenge topológiára nézve.*

□

A Hilbert-tér vektorok gyenge konvergenciája indukál egy topológiát az operátorok terén, amit *gyenge operátor topológiának* nevezünk. Ha $A_n, A \in B(\mathcal{H})$, akkor $A_n \overset{wo}{\to} A$ jelentése $\langle x, A_n y\rangle \to \langle x, Ay\rangle$ minden x, y vektorra. (Tehát $A_n \overset{wo}{\to} A$ nem más, mint $A_n y \overset{w}{\to} y$ minden y vektorra. A gyenge operátor topológia a pontonkénti gyenge konvergencia topológiája.)

39. példa: Ha $A_n \overset{wo}{\to} A$, akkor $A_n^* \overset{wo}{\to} A$, azaz az adjungálás folytonos a gyenge operátor topológiában.

□

40. példa: Az unitér operátorok körében a gyenge és erős operátor topológiák egybeesnek.

Ha $U_n \overset{so}{\to} U$, akkor $\langle x, U_n y\rangle \to \langle x, Uy\rangle$, vagyis $U_n \overset{wo}{\to} U$. (Ez teljesen általánosan így van, az unitér feltevést itt nem kellett használnunk.)

Megfordítva, tegyük fel, hogy $U_n \overset{wo}{\to} U$. Ekkor $U_n x \overset{w}{\to} U_x$, de mivel $\|U_n x\| = \|x\| = \|Ux\|$, a 8. Lemma alapján $U_n x \to Ux$. Mivel ez bármilyen x vektorra igaz, $U_n \overset{so}{\to} U$.

A két topológia ekvivalenciájából fontos következtetést tehetünk: Az unitér operátorok egy *topologikus csoportot* képeznek az erős operátor topológiára nézve.

Világos, hogy unitér operátorok szorzata és inverze is unitér. Amit meg kell gondolni, az a szorzás és az inverz folytonossága. Ha $A_n \overset{so}{\to} A$ és $B_n \overset{so}{\to} B$, akkor $A_n B_n \overset{so}{\to} AB$ feltéve, hogy $\|A_n\|$ és $\|B_n\|$ korlátosak. Ez adja szorzás folytonosságát. Másrészt ha $U_n \overset{so}{\to} U$, akkor $U_n \overset{wo}{\to} U$ és $U_n^{-1} = U_n^* \to$ ^{wo} $U^* = U^{-1}$ az adjungálás folytonossága miatt.

□

17. tétel: *A $\{T \in B(\mathcal{H}) : \|T\| \le 1\}$ halmaz kompakt a gyenge operátor topológiára nézve.*

□

1.14 Kompakt operátorok

Ha $T \in B(\mathcal{H})$ egy korlátos operátor, akkor T folytonos a gyenge topológiára, azaz $x_n \xrightarrow{w} x$ alapján $Tx_n \xrightarrow{w} Tx$ következik. Valóban, $\langle T(x-x_n), y\rangle = \langle x - x_n, T^*y\rangle \to 0$. A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér egy L lineáris operátorát *kompaktnak* (vagy *teljesen folytonosnak*) nevezzük, ha $x_n \xrightarrow{w} x$ esetén $Lx_n \to Lx$. Minden kompakt operátor folytonos, és ezért korlátos. $K(\mathcal{H})$ jelöli $\mathcal{H}$ kompakt operátorainak halmazát.

18. tétel: *$K(\mathcal{H})$ $B(\mathcal{H})$ zárt lineáris altere a norma topológiára nézve. Ha $T \in B(\mathcal{H})$ és $K \in K(\mathcal{H})$, akkor $TK, KT, T^* \in K(\mathcal{H})$.*

Bizonyítás: Legyen $K_n \in K(\mathcal{H})$ és $\|L - K_n\| \to 0$ valamely $L \in B(\mathcal{H})$ operátorra. $L \in K(\mathcal{H})$ belátásához vegyünk egy olyan $(x_n) \subset \mathcal{H}$ sorozatot, hogy $x_n \xrightarrow{w} x$. Ekkor

$$\begin{aligned} |\langle L(x-x_n), y\rangle| &= |\langle (L-K_m)x_n, y\rangle + \langle K_m(x-x_n), y\rangle| \\ &\le C\|L-K_m\|\,\|y\| + |\langle (x-x_n), K_m^* y\rangle| \,. \end{aligned}$$

Itt C az $\|x_n\|$ sorozat egy korlátja. Ha a jobb oldalt kicsinek akarjuk, akkor először m-et választjuk olyan nagynak, hogy az első tag kicsi legyen, majd az adott m-re az n indexet választjuk olyan nagynak, hogy a második tag kicsi legyen. Így jutunk arra a következtetésre, hogy $Lx_n \to Lx$, tehát $L \in K(\mathcal{H})$.

A tétel KT-re és TK-ra vonatkozó része közvetlenül következik a definícióból. Megmutatjuk, hogy T^* kompakt (amennyiben T is az).

$$\|T^*x_n - T^*x\|^2 \le \|x_n - x\|\,\|TT^*(x_n - x)\| \,.$$

Ha $x_n \xrightarrow{w} x$, akkor $\|x_n - x\|$ korlátos és $\|TT^*(x_n - x)\| \to 0$ hiszen a tétel előző része szerint TT^* kompakt operátor. Így $T^*x_n \to T^*x$ és T valóban kompakt.

□

Legyen $\mathcal{H}$ végtelen dimenziós. Ekkor az identitás operátor nem lehet kompakt. Ha T egy kompakt operátor $\mathcal{H}$-n, akkor $0 \in \sigma(T)$. Ha ugyanis lenne olyan korlátos X operátor, amelyre $XT = I$, akkor az előző tétel szerint I-nek kompaktnak kellene lenni.

Egy véges dimenziós Hilbert-térben a gyenge konvergencia egybeesik a normából származó konvergenciával. Ezért minden olyan operátor, amelynek képtere véges dimenziós, az kompakt. Az ilyen operátorokat *véges rangúnak* is nevezzük.

19. tétel: *$T \in B(\mathcal{H})$ akkor és csak akkor kompakt, ha létezik véges rangú operátoroknak olyan T_n sorozata, hogy $\|T - T_n\| \to 0$.*

□

41. példa: Legyen $K(x,y) \in L^2([0,1]) \times [0,1])$ és

$$(T_K f)(x) = \int K(x,y) f(y)\, dy \,.$$

Ekkor

$$\begin{aligned} \|T_K f\|_2^2 &= \int \left| \int K(x,y) f(y)\, dy \right|^2 dx \\ &\le \int \left[\int |K(x,y) f(y)|\, dy \right]^2 dx \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\le \int \left[\left(\int |K(x,y)|^2 \, dy \right)^{1/2} \left(\int (f(y))^2 \, dy \right)^{1/2} \right]^2 dx \\
&= \|K(x,y)\|_2^2 \cdot \|f\|_2^2 \,,
\end{aligned}
$$

ami azt mutatja, hogy a T_K integrál operátor korlátos és normája legfeljebb $\|K(x,y)\|_2$. Ugyancsak ez a becslés mutatja, hogy

$$\|(T_{K_n} - T_K)f\| = \|T_{K_n - K} f\| \le \|K_n - K\|_2 \, \|f\|_2 \,.$$

Vagyis, ha $K_n \to K$ az $L^2([0,1] \times [0,1])$ térben, akkor $\|T_{K_n} - T_K\| \to 0$.

Az $L^2([0,1] \times [0,1])$ térben sűrűn vannak a

$$K(x,y) = \sum_{i=1}^{k} s_i(x) t_i(y)$$

alakú függvények. Egy ilyen $K(x,y)$ *magfüggvényre*

$$T_k f = \sum_{i=1}^{k} s_i \int t_i(y) f(y) \, dy \,,$$

és látjuk, hogy T_K véges rangú, következésképpen kompakt. Az előző tétel azt adja, hogy T_K kompakt operátor lesz bármilyen négyzetesen integrálható magfüggvényre. Az ilyen T_K alakú operátorokat *Hilbert-Schmidt operátornak* nevezik.

□

9. lemma: *Legyen (e_n) egy bázis a $\mathcal{H}$ Hilbert-térben és $T \in B(\mathcal{H})$ olyan operátor, hogy $\sum_n \|Te_n\|^2 < +\infty$. Ekkor T kompakt és $\sum_n \|Te_n\|^2 = \sum_n \|T^* e_n\|^2$.*

Bizonyítás: Legyen P_n az $e_1, e_2, \ldots, e_n$ bázisvektorok által kifeszített altérre való projekció. A $P_n T$ operátor véges rangú és

$$\|(T = P_n T)x\|^2 = \sum_{j=n+1}^{\infty} |\langle e_j, Tx \rangle|^2 \le \|x\|^2 \sum_{j=n+1}^{\infty} \|T^* e_j\|^2 \,.$$

Ez azt mutatja, hogy $P_n T \to T$ normában, amennyiben $\sum_n \|T^* e_n\|^2 < +\infty$. Mivel kompakt operátorok normában vett limesze kompakt, ekkor T kompakt.

Hátra van még a második rész bizonyítása.

$$
\begin{aligned}
\sum_n \|Te_n\|^2 &= \sum_{n,k} |\langle e_k, Te_n \rangle|^2 = \sum_{n,k} \langle T^* e_k, e_n \rangle \\
&= \sum_{n,k} |\langle e_n, T^* e_k \rangle|^2 = \sum_k \|T^* e_k\|^2 \,.
\end{aligned}
$$

□

A kompakt operátorok spektruma meglehetősen egyszerű szerkezetű.

20. tétel: (Riesz-Schauder) *Legyen K egy kompakt operátor. Ha $0 \ne \lambda \in \sigma(K)$, akkor λ véges multiplicitású sajátérték és a sajátértékeknek legfeljebb a 0 lehet torlódási pontja.*

□

Ha a Hilbert-tér végtelen dimenziós, és egy kompakt operátornak végtelen sok sajátértéke van, akkor a 0 mindenképpen a spektrumhoz tartozik, de nem feltétlenül sajátérték.

42. példa: Legyen G egy egy kompakt topologikus csoport és $\pi : G \to B(\mathcal{H})$ egy erősen folytonos reprezentáció egy $\mathcal{H}$ Hilbert téren. Tételezzük fel, hogy létezik egy olyan $x \in \mathcal{H}$ vektor, hogy $\|x\| = 1$ és a $\{\pi(g)x \,:\, g \in G\}$ halmaz teljes $\mathcal{H}$-ban. (Ilyenkor x-et *ciklikusnak* mondjuk.) A Dirac-féle jelölésmódban

$$|\pi(g)x\rangle\langle\pi(g)x|$$

jelenti a $\pi(g)x$ vektorra való projekció operátorát.

Megmutatjuk, hogy a

$$T = \int |\pi(g)x\rangle\langle\pi(g)x| \, d\mu(g)$$

integrállal értelmezett ún. Weyl-féle operátor kompakt. (Az integrál a *wo*-topológiában, azaz a belső szorzaton keresztül van értelmezve, és a G csoport μ Haar-mértéke szerint van véve.) Legyen (e_n) egy bázis $\mathcal{H}$-ban

$$\|Te_n\|^2 = \langle Te_n, Te_n\rangle = \iint \overline{\langle\pi(g)x, e_n\rangle}\langle\pi(h)x, e_n\rangle\langle\pi(g)x, \pi(h)x\rangle \, d\mu(h)\, d\mu(g)\ .$$

Így

$$\begin{aligned}\sum_n \|Te_n\|^2 &= \iint \sum_n \overline{\langle\pi(g)x, e_n\rangle}\langle\pi(h)x, e_n\rangle\langle\pi(g)x, \pi(h)x\rangle \, d\mu(g)\, d\mu(h) \\ &= \iint |\langle\pi(g)x, \pi(h)x\rangle|^2 \, d\mu(g)\, d\mu(h)\ .\end{aligned}$$

Az integrandus egy folytonos függvény, ami integrálható, tehát $\sum_n \|Te_n\|^2 < +\infty$. Ebből a tulajdonságból következik, hogy T kompakt a 9. Lemma alapján.

□

Legyen A egy kompakt operátor a $\mathcal{H}$ Hilbert-téren. Ekkor $|A|$ is kompakt, és spektruma λ_i sajátértékekből áll. Feltehető, hogy $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq 0$. Ha

$$\sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^p < \infty\,,$$

akkor az $A \in L^p(\mathcal{H})$ jelölést használjuk. Ha $1 \leq p < \infty$, akkor $L^p(\mathcal{H})$ Banach tér az

$$\|A\|_p = \left(\sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^p\right)^{1/p}$$

normára nézve. A szóbajövő p értékek közül $p = 1$ talán a leglényegesebb. Az $L^1(\mathcal{H})$ osztályba tartozó kompakt operátorokat *nyomoperátornak* nevezzük. Legyen ξ_i a Hilbert-tér bázisa. Ekkor az

$$\mathrm{Tr} : A \longmapsto \sum_i \langle\xi_i, A\xi_i\rangle$$

lineáris funkcionál a bázis választásától független, az A operátor *nyomának* nevezzük. Megjegyezzük, hogy $L^2(\mathcal{H})$ nem más, mint a Hilbert-Schmidt operátorok osztálya.

1.15 Gyakorló feladatok

1. Legyen $\mathcal{H}$ egy Hilbert-tér. Igazolja, hogy a következő két állítás ekvivalens: 1. Van $\mathcal{H}$-ban megszámlálható sűrű halmaz. 2. Létezik $\mathcal{H}$-nak megszámlálható bázisa.

2. Igazolja, hogy $L^2(\mathbb{R}^+)$-ban sűrűn vannak a $\sum_{n=1}^{N} a_n e^{-nx}$ alakú függvények!

3. Bizonyítsa be, hogy az $L^2[0,1]$ Hilbert-térben sűrűn vannak az olyan $p(x)$ polinomok, amelyekre $p(1/2) = 0$!

4. Legyen $\mu(H) = \int_{-1}^{1} \chi_H(x)\sqrt{1-x^2}\,dx$ egy mérték $[-1,1]$-en. Igaz-e, hogy a polinomok sűrűn vannak $L^2(\mu)$-ben?

5. Legyen $\mathcal{H}$ azoknak a $\{z \in \mathbb{C} : |z| < 1\}$ halmazon analitikus függvényeknek az összessége, amelyre
$$\iint |f(x+\mathrm{i}\,y)|^2\,dxdy < +\infty\,.$$
Igazoljuk, hogy ez Hilbert-tér az
$$\langle f, g\rangle = \iint \overline{f(x+\mathrm{i}\,y)}g(x+\mathrm{i}\,y)\,dxdy$$
belső szorzással, és
$$\phi_n(z) = \sqrt{\frac{n}{\pi}} z^{n-1}$$
bázis $(n = 1, 2, \ldots)$!

6. * Tekintsük azokat az $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ mérhető függvényeket, amelyekre
$$\|f\|^2 := \frac{1}{\pi}\int |f(z)|^2 e^{-|z|^2}\,dx\,dy \qquad (z = x + \mathrm{i}\,y)$$
véges. Ezek az
$$\langle f, g\rangle = \frac{1}{\pi}\int \overline{f}(z)g(z)e^{-|z|^2}\,dx\,dy$$
belső szorzással egy $\mathcal{K}$ Hilbert-teret alkotnak. 1. Igazolja, hogy $\mathcal{K}$-ban az analitikus függvények $\mathcal{K}_0$ altere zárt! 2. Mutassa meg, hogy $\mathcal{K}_0$-ban a polinomok teljes halmazt alkotnak!

7. Igazolja, hogy $H_{2n}(0) = (-1)^n(2n)!/n!$, ha $H_m(x)$ az m-edfokú Hermite-polinom!

8. Igazolja a
$$\exp(2xt - t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!}$$
összefüggést! (Az $\exp(2xt - t^2)$ függvényt a Hermite-polinomok *generátor függvényének* nevezik.)

9. * Igazolja, hogy
$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{\mathrm{i}\,xt - t^2/2} H_n(t)\,dt = \mathrm{i}^n\,e^{-x^2/2}H_n(x)\,!$$

10. Az $e^{2xt}e^{-t^2}$ generátorfüggvénybe beírva az exponenciális függvény hatványsorát igazolja, a
$$H_n(x) = \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k n!}{k!(n-2k)!}(2x)^{n-2k}$$
összefüggést!

11. A 6. példa $L^2(\mu)$ Hilbert-terében tekintsük az

$$L = \{H_n : n \text{ páratlan}\}$$

halmazt. (H_n jelöli az n-edfokú Hermite-polinomot.) Határozzuk meg az $L^\perp$ alteret!

12. Tekintsünk egy olyan rendszert, amely a számegyenesen elhelyezkedő N darab tömegpontból áll és szabad energiáját az

$$F(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i \neq j} \log |x_i - x_j| - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N} x_k^2$$

függvény adja meg az egyes tömegpontok $x_1, x_2, \dots, x_N$ helyzetével kifejezve. Igazoljuk, hogy F akkor minimális, ha $x_1, x_2, \dots$ és x_N az N-edfokú Hermite-polinom gyökei! (Útmutatás: 1. Differenciálással mutassuk meg, hogy az $(x_1, x_2, \dots, x_N)$ minimumhelynek ki kell elégíteni a $\sum (x_n - x_m)^{-1} = x_n$ egyenleteket minden $1 \le n \le N$-re, ha az összegzés $m \neq n$-re történik. 2. Legyen $f(x) = (x - x_1) \dots (x - x_N)$, és számoljuk ki az

$$\frac{1}{2} \frac{f''(x)}{f(x)} - x \frac{f'(x)}{f(x)}$$

mennyiséget az előző összefüggés fehasználásával. 3. Hivatkozzunk arra, hogy f az n-edik Hermite-féle differenciálegyenlet polinom megoldása, és így csak az n-edfokú Hermite-polinom lehet.)

13. Adjon példát olyan 2×2-es P mátrixra, amelyre $P^2 = P$ és P nem önadjungált.

14. Legyen P olyan operátor egy Hilbert-téren, amelyre $P = P^2$. Igazolja, hogy P akkor és csak akkor önadjungált, ha P magtere és képtere merőlegesek egymásra.

15. Legyen σ egy permutációja az $1, 2, \dots, n$ számoknak és $U_\sigma : \mathcal{H}^{n\otimes} \to \mathcal{H}^{n\otimes}$ az (1.25) képlettel adott unitér operátor. Igazolja, hogy

$$\frac{1}{n!} \sum_\sigma U_\sigma$$

önadjungált projekció, ha az összegzés a permutációkon fut végig.

16. Legyen φ egy lineáris funkcionál a $n \times n$-es mátrixok terén. Igazolja, hogy egyértelműen létezik egy olyan D mátrix, amelyre $\varphi(A) = \operatorname{Tr} DA$. φ nemnegatív értékeket vesz fel a pozitív szemidefinit mátrixokon, ha D pozitív szemidefinit.

17. Legyen A normális operátor. Igazolja, hogy $R_\lambda(A)$ normális minden $\lambda \in \rho(A)$ esetén.

18. Használjuk az

$$R_\lambda(T) - R_\lambda(S) = R_\lambda(S)(T - S)R_\lambda(S)$$

azonosságot a $T \mapsto R_\lambda(T)$ rezolvens iránymenti deriváltjának kiszámítására.

19. Legyen A az $L^2(0,1)$ térben az x^2 függvénnyel való szorzás operátora. Mi A spektrálmértéke?

20. Ha $H \subset [0,1]$ egy Borel-halmaz, akkor legyen

$$\mu(H) = \begin{cases} \dfrac{2}{3}\lambda(H) & \text{ha } \dfrac{1}{4} \in H\,, \\[2mm] \dfrac{2}{3}\lambda(H) + \dfrac{1}{3} & \text{ha } \dfrac{1}{4} \notin H\,. \end{cases}$$

Mi az $L^2(\mu)$ térben az x^2 függvénnyel való szorzás operátorának spektruma?

21. Bizonyítsa be, hogy ha E és F projekciók egy Hilbert-téren, akkor $\|E - F\| \le 1$!

22. Bizonyítsa be, hogy ha E és F projekciók, akkor $(EF)^n$ konvergens az erős operátor topológiában!

23. Bizonyítsa be, hogy ha a $X \in B(\mathcal{H})$ operátorra X^*X és XX^* projekciók, akkor X parciális izometria!

24. Legyen $\alpha_n \in [0,1]$ növő sorozat 1 határértékkel. Az $\ell^2(\mathbb{N})$ téren $A\delta_n = \alpha_n \delta_{n+1}$ egy lineáris operátort értelmez. Mi ennek a spektruma?

25. Legyen $f, g \in L^2(0,1)$ két rögzített függvény. Bizonyítsuk be, hogy

$$(Ah)(x) = \int f(x)g(y)h(y)\,dy$$

egy korlátos lineáris operátort értelmez! Mi ennek a spektruma?

26. Legyen $(Af)(z) = zf(z)$ a 4. feladatban leírt Hilbert-térben. Bizonyítsuk be, hogy A korlátos operátor és határozzuk meg a spektrumát! Elemezzük a spektrum részeit is!

27. Legyen f egy kétváltozós folytonos függvény és értelmezzünk $L^2(0,1)$-en egy A operátort:

$$(Ag)(t) = \int_0^t f(t,x)g(x)\,dx\,.$$

Igazoljuk, hogy A korlátos és számoljuk ki $r(A)$-t!

28. Számolja ki $L^2(-1,1)$-ben az x^2-tel való szorzás operátorának spektrálmértékét!

29. $L^2([0,1] \times [0,1])$-ben legyen $(Af)(x,y) = \dfrac{f(x,y) - f(y,x)}{2}$. Bizonyítsa be, hogy A egy projekció operátor!

30. Legyen $E_1 E_2, \ldots$ páronként ortogonális projekciók sorozata, amelyre $\sum_n E_n = I$. Mi lesz a

$$\sum_n e^{\mathrm{i}\,\pi/n} E_n$$

operátor spektruma? Mikor lesz ez az operátor kompakt?

31. Igazolja, hogy az $L^2[0,1]$ Hilbert-térben értelmezett

$$(Af)(x) = \int_0^x f(t)\,dt \qquad (f \in L^2[0,1],\ x \in [0,1])$$

operátor korlátos!

Igazolja, hogy az A operátor adjungáltja

$$(A^*f)(x) = \int_x^1 f(t)\,dt \qquad (f \in L^2[0,1],\ x \in [0,1])!$$

32. Legyen E_n páronként ortogonális (önadjungált) projekciók sorozata egy $\mathcal{H}$ Hilbert-térben, $E_n \neq 0$ és $\lambda > 0$ egy valós szám. Milyen λ értékekre lesz az

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n E_n$$

lineáris operátor korlátos? Tegyük fel, hogy A korlátos. Mi a spektruma? Elemezze a spektrum részeit is! Mikor lesz az A operátor kompakt?

33. Legyen $f \in L^2(\mathbb{R})$ és

$$g_n(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-n}^{n} e^{-\mathrm{i}\,tx} f(x)\, dx\,.$$

Igazolja, hogy g_n konvergál az $L^2(\mathbb{R})$ Hilbert-térben. Mi a határérték?

34. Igazolja, hogy egy véges dimenziós Hilbert-tér operátorának akkor és csak akkor van ciklikus vektora, ha minden sajatértéke egy multipliciású!

35. Igazolja, hogy ha $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ normális operátor, akkor $\|T\|^2 = \|T^2\|$!

36. Igazolja, hogy ha $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ normális operátor, akkor $r(T) = \|T\|$!

37. Legyen

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Adja meg az $U_t = \exp(\mathrm{i}\,tA)$ unitér mátrixot ($t \in \mathbb{R}$)!

38. Legyen B egy pozitív korlátos önadjungált operátor. Definiáljunk rekurzióval egy A_n sorozatot: $A_0 = 0$, $A_{n+1} = (B + A_n^2)/2$. Igazoljuk, hogy $A_n \le A_{n+1}$! Hová tart az A_n operátor sorozat?

39. Legyen $U \in B(\mathcal{H})$ egy unitér operátor és $\mathcal{H}_0 := \{(x + Ux + \cdots + U^{n-1}x) - nx : x \in \mathcal{H},\ n \in \mathbb{N}\}$. Igazolja, hogy $\mathcal{H}_0^\perp = \{x \in \mathcal{H} : Ux = x\}$!

40. Használja fel az előző feladatot annak bizonyítására, hogy

$$\frac{1}{n}\left(y + Uy + \cdots + U^{n-1}y\right)$$

konvergál U egy fixpontjához! (Útmutatás: $\mathcal{H} = \overline{\mathcal{H}}_0 \oplus \mathcal{H}_0^\perp$).

41. Definiáljuk az $U : L^2(\mathbb{R}^2,\, dx\,dy) \to L^2(\mathbb{R}^+, r\,dr) \otimes L^2\left([0, 2\pi], d\varphi\right)$ lineáris operátort az

$$(Uf)(r, \varphi) = f(x, y) \qquad x = r \cdot \cos\varphi\,, \quad y = r \cdot \sin\varphi$$

képletekkel. Igazolja, hogy U unitér!

42. Használja fel a (1.32) rezolvens azonosságot annak igazolására, hogy

$$\left(\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_\Gamma f(z) R_z(T)\, dz\right)\left(\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_\Gamma g(z) R_z(T)\, dz\right) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int f(z) g(z) R_z(T)\, dz\,,$$

ha f és g analitikus függvények egy D' tartományon, $D' \supset \overline{D} \supset D \supset \sigma(T)$ és az integrálás a T spektrumát tartalmazó D tartomány Γ határán történik! (Feltehető, hogy Γ sima zárt görbe.)

43. Igazolja, hogy $\inf\{\|A^n\|^{1/n} : n \in \mathbb{N}\}$ a korlátos A operátor spektrálsugara!

44. Legyen $n \in \mathbb{N}$ és az $\ell^2(\mathbb{N})$ téren értelmezzünk egy A_n operátort az

$$A_n \delta_k = \begin{cases} \delta_{k+1} & k \le n\,, \\ 0 & k > n\,, \end{cases}$$

képlettel. Mi az A_n operátor spektruma? Konvergál-e A_n az erős, vagy a norma topológiában?

Második fejezet

2. Nemkorlátos és önadjungált operátorok

Az alkalmazások szempontjából fontos operátorok némelyike nem korlátos, ilyenek például a differenciáloperátorok. A nemkorlátos operátorok kezelése lényegesen bonyolultabb; kezdődik ez azzal, hogy az értelmezési tartományuk nem a teljes tér, és gondot kell fordítani az értelmezési tartomány megadására. (Látszólag ugyanaz az operátor különböző értelmezési tartományokkal egészen más jelenséget írhat le.) Egy operátor gráfjának zártsága egyfajta minimum követelmény az operátor kezeléséhez, de számolási szempontjából az önadjungált operátorok osztálya mondható jónak.

2.1 Zárt operátorok

Legyen T a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér sűrű alterén értelmezett lineáris operátor, amely értékeit is $\mathcal{H}$-ban veszi fel. *T értelmezési tartományára* a $\mathcal{D}(T)$ jelölést használjuk. A

$$\Gamma(T) = \{(x,y) \in \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} \,:\, x \in \mathcal{D}(T),\ y = Tx\}$$

halmaz lineáris altér, amit T *gráfjának* nevezünk. Ha $\Gamma(T)$ zárt, akkor T-t *zárt operátornak* mondjuk. T tehát akkor zárt, ha az $x_n \to x$ és $Tx_n \to y$ relációkból következik $x \in \mathcal{D}(T)$ és $Tx = y$. Ha a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér T_1 és T_2 operátoraira $\Gamma(T_1) \subset \Gamma(T_2)$ teljesül, akkor a $T_1 \subset T_2$ jelölést használjuk. Szavakban $T_1 \subset T_2$ jelentse nem más, mint az, hogy T_2 kiterjesztése T_1-nek.

1. tétel: *Ha T olyan zárt operátor, amelynek értelmezési tartománya az egész tér, akkor T korlátos.*

Bizonyítás: $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ Hilbert-tér, és így teljes. Amennyiben T zárt, $\Gamma(T)$ Banach-tér, amin tekintjük a $\pi_1 : (x, Tx) \mapsto x$ és $\pi_2 : (x, Tx) \mapsto Tx$ folytonos lineáris transzformációkat. Ha $\mathcal{D}(T) = \mathcal{H}$, akkor π_1 kölcsönösen egyértelmű ráképzés, ezért π_1^{-1} inverze folytonos. Mivel $T = \pi_2 \circ \pi_1^{-1}$ folytonos transzformációk kompozíciója, T maga is folytonos.

□

1. példa: Legyen $\mathcal{D}(T)$ a számegyenesen szakaszosan folytonosan differenciálható kompakt tartójú függvények halmaza és $Tf = f'$. Ha

$$f_n(x) = \begin{cases} nx & \text{ha } x \in [0, n^{-1}], \\ 0 & \text{egyébként}, \end{cases}$$

akkor $\|f_n\| = (3n)^{-1/2} \to 0$ és $\|Tf_n\| = n^{1/2} \to \infty$. A T differenciáloperátor tehát nem korlátos és nem terjeszthető ki a teljes $L^2(\mathbb{R})$ tér zárt operátorává.

□

2. példa: Legyen $T_0 : \ell^2(\mathbb{Z}^+) \to \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ egy lineáris operátor a

$$\sum_n x_n \delta_n \mapsto \sum_n f(n) x_n \delta_n$$

képlettel adva a $\mathcal{D}(T_0) = \left\{\sum x_n \delta_n \,:\, \sum |f(n)|^2 |x_n|^2 < +\infty\right\}$ értelmezési tartományon egy tetszőleges $f : \mathbb{Z}^+ \to \mathbb{C}$ függvény segítségével. Ekkor T_0 zárt operátor.

Legyen

$$H_n = \{(x,y) \in \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} \,:\, y_k = f(k)x_k \text{ ha } k \leq n\}\,.$$

Ekkor H_n zárt halmaz minden $n \in \mathbb{N}$-re. Mivel

$$\Gamma(T_0) = \bigcap_n H_n,$$

T_0 gráfja is zárt.

□

1. lemma: *Ha a T operátor spektruma nem az egész $\mathbb{C}$ komplex sík, akkor T zárt.*

Bizonyítás: Tételezzük fel, hogy $\lambda \in \sigma(T)$. Ekkor $B = (\lambda - T)^{-1}$ egy korlátos operátor. Vegyünk egy olyan $(f_n) \subset \mathcal{D}(T)$ sorozatot, hogy $f_n \to f$ és $Tf_n \to g$ valamely f és g vektorokra.

$$B(\lambda f - g) = \lim_{n\to\infty} B((\lambda - T)f_n) = \lim_{n\to\infty} f_n = f\,.$$

Mindkét oldalra alkalmazva a $\lambda - T$ operátort, azt kapjuk, hogy

$$\lambda f - g = (\lambda - T)f\,.$$

Ez egyrészt mutatja, hogy $f \in \mathcal{D}(T)$ másrészt $Tf = g$.

□

3. példa: Legyen $T : \ell^2(\mathbb{Z}^+) \to \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ a

$$T\delta_n = \begin{cases} \sqrt{n}\delta_{n-1} & \text{ha } n > 0, \\ 0 & \text{ha } n = 0 \end{cases}$$

képlettel értelmezve a $\mathcal{D}(T) = \left\{x \in \ell^2 \,:\, \sum n|x_n|^2 < +\infty\right\}$ értelmezése tartományon. Ekkor $T = T_0S^*$, ahol S^* a balra tolás és

$$T_0\delta_n = \begin{cases} \sqrt{n-1}\delta_n & \text{ha } n \geq 0, \\ 0 & \text{ha } n = 0. \end{cases}$$

T_0 a $\mathcal{D}(T)$ értelmezési tartományon zárt operátort ad, egy nemkorlátos szorzás operátor. Ebből adódik, hogy T zárt. Legyen ugyanis $x_n \to x$ és $Tx_n \to y$. Ekkor $S^*x_n \to S^*x$ és $T_0(S^*x_n) \to y$. Így T_0 zártsága alapján $Ty = T_0S^*x = Tx$.

A T operátornak minden $z \in \mathbb{C}$ szám a spektrumában van, ugyanis

$$e(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}\delta_n$$

sajátvektora T-nek z sajátértékekkel. (Egyébként $e(z)$-t *exponenciális vektornak* szokták nevezni és később látni fogjuk, hogy az $\{e(z) \,:\, z \in \mathbb{C}\}$ halmaz lineárisan független.)

□

2.2 Az adjungált

Legyen T egy lineáris operátor a $\mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H}$ értelmezési tartománnyal. $g \in \mathcal{D}(T^*)$, ha

$$\langle g, Tf \rangle = \langle k, f \rangle$$

minden $f \in \mathcal{D}(T)$-re és valamely $k \in \mathcal{H}$-ra. Ha $\mathcal{D}(T)$ sűrű $\mathcal{H}$-ban, akkor k egyértelmű és $T^*g = k$ definíció szerint. T^* a T operátor *adjungáltja*. $\mathcal{D}(T^*)$ azokból a $g \in \mathcal{H}$ vektorokból áll, amelyekre $f \mapsto \langle g, Af \rangle$ folytonos lineáris funkcionál a $\mathcal{D}(T)$ altéren, és $T^*(g)$ a Riesz-reprezentációs tétel alapján a funkcionált megadó vektor. Az adjungált értelmezéséből nyomban következik, hogy

$$T_1 \subset T_2 \quad \text{esetén} \quad T_2^* \subset T_1^* \,. \tag{2.1}$$

Ha $T \subset T^*$, akkor T-t *szimmetrikusnak* mondjuk. T tehát pontosan akkor szimmetrikus, ha

$$\langle g, Tf \rangle = \langle Tg, f \rangle$$

fennáll bármely $f, g \in \mathcal{D}(T)$ vektorra. Ha $T = T^*$, akkor T-t *önadjungáltnak* nevezzük. Neumann János a ma önadjungáltnak nevezett operátorokat maximális szimmetrikusnak nevezte. Valóban, ha $T_1 \subset T_2$ szimmetrikus operátorok, akkor $T_1 \subset T_2 \subset T_2^* \subset T_1^*$, és $T_1 = T_1^*$ esetén $T_1 = T_2$-nek kell teljesülni.

4. példa: Az $L^2(0,1)$ Hilbert-téren két lineáris operátort tekintünk. $\mathcal{D}(T_1) = \{f \in L^2 : f(0) = f(1) = 0,\ f' \in L^2\}$, $\mathcal{D}(T_2) = \{f \in L^2 : f' \in L^2\}$. T_1 és T_2 egyaránt differenciáloperátorok: $(T_i f)(x) = -\mathrm{i} f'(x)$ ha $f \in \mathcal{D}(T_i)$. Megmutatjuk, hogy $T_1^* = T_2$. Mivel $T_1 \subset T_2$, ez azt is jelenti, hogy a T_1 operátor szimmetrikus ugyan, de nem önadjungált.

$T_2 \subset T_1^*$ belátása az egyszerűbb. A tartalmazás azt jelenti, hogy $y_2 \in \mathcal{D}(T_2)$ és $x_1 \in \mathcal{D}(T_1)$ esetén

$$\begin{aligned} \langle y_2, T_1 x_1 \rangle &= -\mathrm{i} \int_0^1 x_1'(t) \overline{y_2(t)}\, dt = -\mathrm{i} \int_0^1 x_1(t) \overline{y_2'(t)}\, dt \\ &= \langle T_2 y_2, x_1 \rangle \,. \end{aligned}$$

Ez igaz, mert a kérdéses középső egyenlőség parciális integrálással következik az $x_1(0) = x_1(1) = 0$ feltételből.

Legyen $y \in \mathcal{D}(T_1^*)$ és $y^* := T_1^* y$. Az adjungált definíciója szerint

$$\langle y, T_1 x_1 \rangle = -\mathrm{i} \int_0^1 x_1'(t) \overline{y(t)}\, dt = \int_0^1 x_1(t) \overline{y^*(t)}\, dt = \langle T_1^* y, x_1 \rangle$$

érvényes minden $x_1 \in \mathcal{D}(T_1)$-re. Legyen $Y^*(s) = \int_0^s y^*(t)\, dt$. Parciális integrálással

$$\int_0^1 x_1(t) \overline{y^*(t)}\, dt = -\int_0^1 x_1'(t) \overline{Y^*(t)}\, dt$$

és

$$\int_0^1 x_1'(t) \overline{[Y^*(t) - \mathrm{i}\, y(t) - c]}\, dt = 0$$

bármilyen $c \in \mathbb{C}$ számra, és bármilyen $x_1 \in \mathcal{D}(T_1)$-re. Tetszőleges $y \in L^2$-ből kiindulva

$$G(t) = \int_0^t g(s)\, ds - t \int_0^1 g_s ds$$

T_1 értelmezési tartományában van, így x_1 helyébe tehető:

$$0 = \int_0^1 \left[g(t) - \int_0^1 g(s)ds \right] \overline{[Y^*(t) - \mathrm{i}\, y(t) - c]}\, dt\,.$$

A c számot (g-től függetlenül) jól megválasztva a

$$\int_0^1 g(t)\overline{[Y^*(t) - \mathrm{i}\, y(t) - c]}\, dt = 0$$

egyenlőséghez jutunk, ami tetszőleges $g \in L^2$-re fennáll. Így

$$Y^*(t) \quad = \quad -\mathrm{i}\, y(t) + c$$

és

$$y(t) \quad = \quad \mathrm{i} \int_0^t y^*(s)\, ds - c\,.$$

Ez azt mutatja, hogy $y \in \mathcal{D}(T_2)$ és $y^* = T_2 y$. Tehát $T_1^* \subset T_2$.

□

Azt mondjuk, hogy a $\overline{T}$ operátor a T operátor *lezárása*, ha $\overline{\Gamma(T)} = \Gamma(\overline{T})$. Tehát $\overline{T}$ *kiterjesztése* T-nek, jelölésben $\overline{T} \supset T$. Ha egy T operátorra teljesül, hogy lezárása létezik, akkor *lezárhatónak* mondjuk. A T operátor pontosan akkor lezárható, ha abból, hogy $(0, h)$ benne van T gráfjának lezárásában következik, hogy $h = 0$.

2. tétel: *Bármely lineáris operátor adjungáltja zárt. Az adjungált pontosan akkor sűrűn definiált, ha az operátor lezárható. Következésképpen egy sűrűn definiált zárt operátor adjungáltja is sűrűn definiált és zárt.*

Bizonyítás: Legyen T az operátor, amiről szó van.

$$\mathcal{M} := \{(Tf, -f) \in \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} \;:\; f \in \mathcal{D}(T)\}$$

egy izometriától eltekintve T gráfja. Kiszámoljuk, hogy $\Gamma(T^*) = \mathcal{M}^\perp$. Valóban, ha $(x, y) \perp \mathcal{M}$, akkor $\langle x, Tf \rangle = \langle y, f \rangle$ minden $f \in \mathcal{D}(T)$ vektorra, és $x \in \mathcal{D}(T^*)$ és $T^* x = y$. Utóbbi nem más, mint $(x, y) \in \Gamma(T^*)$. $\mathcal{M}^\perp$ zárt altér, tehát T^* zárt operátor, és $(\overline{T})^* = T^*$.

Hátra van még annak igazolása, hogy $\mathcal{D}(T^*)$ sűrű, amennyiben T lezárható, és viszont. Tételezzük fel, hogy $h \perp \mathcal{D}(T^*)$ és $\overline{T}$ létezik. Ekkor $(h, 0) \in \Gamma(T^*)^\perp = \overline{\mathcal{M}}$, azaz $(h, 0) = (\overline{T} f, -f)$. Ebből adódik, hogy $f = 0$ és $Tf = h = 0$. Tehát $\mathcal{D}(T^*)$ sűrű. A megfordított állítás a gondolatmenet megfordításával igazolható.

□

Legyen U $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$-nak az $U(f, g) := (-g, f)$ képlettel értelmezett unitér operátora. Az elöbbi bizinyítás azon múlt, hogy

$$\Gamma(T^*) = (U\Gamma(T))^\perp\,.$$

Felírva ezt a relációt T helyében T^*-ra is, és kihasználva, hogy U^2 =identitás azt kaphatjuk, hogy $\overline{T} = T^{**}$.

5. példa: Legyen $\mathcal{D}(H_D) = \{f \in C^2[a, b],\ f(a) = f(b) = 0\}$ és $\mathcal{D}(H_N) = \{f \in C^2[a, b] \;:\; f'(a) = f'(b) = 0\}$. Az $f \mapsto -f''$ operátor a $\mathcal{D}(H_D)$ és $\mathcal{D}(H_N)$ tartományokon egyaránt szimmetrikus. Ez következik az

$$\int_a^b \left(\overline{f''} g - \overline{f} g'' \right)\, dx = \left[\overline{f'} g - \overline{f} g' \right]_a^b$$

azonosságból. (Parciális integrálás).

6. példa: Legyen Q az x változóval való szorzás operátora $L^2(\mathbb{R})$-en, azaz $\mathcal{D}(Q) = \{f \in L^2(\mathbb{R}) : xf(x) \in L^2(\mathbb{R})\}$ és $f \in \mathcal{D}(Q)$ esetén $(Qf)(x) = xf(x)$.

Ha $g \in \mathcal{D}(Q^*)$ és $Q^*g = g^*$, akkor $\langle g, Qf \rangle = \langle g^*, f \rangle$ minden $f \in \mathcal{D}(Q)$-ra, vagyis

$$\int \left[\overline{g}(x)x - \overline{g^*}(x)\right] f(x)\, dx = 0\,.$$

f helyébe tehetjük a $\chi_{[-n,n]}\,[g(x)x - g^*(x)]$ függvényt, hiszen ez négyzetesen integrálható és kompakt tartójú lévén x-szel szorozva is négyzetesen integrálható. Ezért

$$g(x)x - g^*(x) = 0$$

majdnem mindenütt $[-n, n]$-ben, és így $\mathbb{R}$-en is. Azt kaptuk, hogy $g \in \mathcal{D}(Q)$ és $Qg = g^*$. Megállapítjuk, hogy $Q^* \subset Q$. Mivel Q szimmetrikus, azaz $Q \subset Q^*$, arra jutunk, hogy Q önadjungált.

□

2.3 Önadjungált operátorok

Az önadjungált operátorokra kiterjeszthető a korlátos operátorok köréből ismert spektrál tétel, és a folytonos függvény kalkulus is.

3. tétel: (Spektrál tétel) *Legyen A egy önadjungált operátor a $\mathcal{H}$ Hilbert-téren. Ekkor $\mathbb{R}$ Borel-halmazain egyértelműen létezik egy olyan E projektormérték, amelyre*

(1) ha $H \subset \mathbb{R}$ Borel-halmaz és $H \cap \sigma(A) = \emptyset$, akkor $E(H) = 0$,

(2) $\mathcal{D}(A) = \{x \in \mathcal{H} : \int \lambda^2 d\langle x, E(\,\cdot\,)x\rangle(\lambda) < +\infty\}$,

(3) ha $A_n = \int_{-n}^{n} \lambda\, dE(\lambda)$ és $x \in \mathcal{D}(A)$, akkor $A_n x \to Ax$.

□

A tételben szereplő E projektormérték az A operátort egyértelműen meghatározza. A (2) tulajdonság megadja A értelmezési tartományát, a (3)-ban adott korlátos A_n operátorok hatásának pontonkénti limesze pedig A. Ha $\mathcal{K} \subset \mathcal{H}$ jelöli egy kompakt $[a, b]$ intervallumra az $E([a, b])$ projekció képterét, akkor minden $x \in \mathcal{K}$ vektor A értelmezési tartományában van. Valóban, az $\langle x, E(\,\cdot\,)x\rangle$ mérték tartója $[a, b]$-ban van, ezért

$$\int \lambda^2 d\langle x, E(\,\cdot\,)x\rangle(\lambda) \leq (a^2 + b^2)(b - a)\|x\|^2\,.$$

Az $\mathcal{K}$ alteret az A operátor invariánsan hagyja. Ha $a = -n$ és $b = n$, akkor A és A_n megegyeznek az $\mathcal{K}$ altéren.

7. példa: A 6. példa Q operátora a kvantummechanikában az egy szabadsági fokú részecske *koordináta operátora.* A változóval való szorzás operátora, és spektrális projekciói is szorzás operátorok. Ha $H \subset \mathbb{R}$, akkor az $E(H)$ spektrális projekció a H halmaz karakterisztikus függvényével való szorzás operátora. Ha $f \in L^2(\mathbb{R})$, akkor az $\langle f, E(\,\cdot\,)f\rangle$ mérték sűrűségfüggvénye $|f|^2$. A spektrál tétel (2) állítása szerint $f \in \mathcal{D}(Q)$ pontosan akkor, ha

$$\int \lambda^2 d\langle f, E(\,\cdot\,)f\rangle(\lambda)\, d\lambda = \int \lambda^2 |f(\lambda)|^2\, d\lambda$$

véges, és valóban éppen ez volt Q értelmezési tartományának meghatározása. Legyen $f \in \mathcal{D}(Q)$ és A_n a spektrál tétel (3) állításában szereplő operátor. Ekkor

$$\langle f, A_n f\rangle = \int_{-n}^{n} \lambda\, d\langle f, E(\,\cdot\,)f\rangle = \int_{-n}^{n} \lambda |f(\lambda)|^2\, d\lambda$$

és

$$A_n f(t) = \begin{cases} tf(t) & \text{ha } |t| \le n, \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases}$$

Ha $n \to \infty$, akkor $A_n f \to Qf$.

□

Legyen A egy önadjungált operátor és

$$m = \inf\{\langle x, Ax\rangle \,:\, |x| = 1\} \quad \text{és} \quad M = \sup\{\langle x, Ax\rangle \,:\, |x| = 1\}\,.$$

Az első fejezet 10. tételének bizonyítása működik akkor is, ha A nem korlátos így $\sigma(A) \subset [m, M]$. Ha $m(M)$ véges, akkor A-t *alulról (felülről) korlátosnak* nevezzük. Ha $m \geq 0$, akkor A-t *pozitívnak* mondjuk. (A pozitivitás fogalmába mindig beleértjük, hogy A egy önadjungált operátor.)

A spektrál tétel lehetőséget ad arra, hogy az $f(T)$ operátort értelmezzük bármilyen Borel-mérhető $\mathbb{R} \to \mathbb{C}$ függvényre. $f(T)$ sűrűn értelmezett zárt operátor lesz, és

(1) $\mathcal{D}(f(t)) = \{x \in \mathcal{H} \,:\, \int |f(\lambda)|^2 d\langle x, E(\cdot)x\rangle(\lambda) < +\infty\}$,

(2) $\|f(T)x\|^2 = \int |f(\lambda)|^2 d\langle x, E(\cdot)x\rangle(\lambda)$,

(3) ha $f_n(t) = f(t)$ $|f(t)| \le n$ esetén és $f_n(t) = 0$ $|f(t)| > n$ esetén, akkor

$$f_n(T)x \to f(T)x,$$

feltéve, hogy $x \in \mathcal{D}(f(T))$,

(4) $f(T)^* = \overline{f}(T)$,

(5) Ha $z \in \rho(T)$, akkor

$$R_z(T) = \int \frac{dE(\lambda)}{z - \lambda}\,.$$

Érdemes megjegyezni, hogy $(\alpha f)(T) = \alpha f(T)$ minden mérhető f függvényre és $\alpha \in \mathbb{C}$ számra teljesül, de $(f+g)(T) = f(T) + g(T)$ általában nem igaz. Ha $x \in \mathcal{D}(f(T)) \cap \mathcal{D}(g(T))$, akkor $x \in \mathcal{D}((f+g)(T))$ és $f(T)x + g(T)x = (f+g)(T)x$, azaz $f(T) + g(T) \subset (f+g)(T)$, de a két operátor lehet különböző. $((f(t) + g(T)$ nem feltétlenül zárt, míg $(f+g)(T)$ mindig az.)

4. tétel: *Legyen T egy önadjungált operátor. $t \in \sigma(T)$ akkor és csak akkor teljesül, ha létezik egységvektoroknak olyan f_n sorozata, hogy $f_n \in \mathcal{D}(T)$ és $\|Tf_n - tf_n\| \to 0$.*

Bizonyítás: Legyen $E(\cdot)$ a T-hez tartozó projektormérték és $E_n = E(t - 1/n, t + 1/n)$ spektrális projekciók egy sorozata. Ha $t \in \sigma(T)$, akkor $E_n \neq 0$ és választhatunk olyan f_n vektort, amelyre $E_n f_n = f_n$. Ekkor

$$\|Tf_n - tf_n\|^2 = \int_{t-1/n}^{t+1/n} (\lambda - t)^2 d\langle f_n, E(\,\cdot\,)f_n\rangle \le \frac{4}{n^2}\,.$$

A megfordítás ennél még egyszerűbb, ha létezik olyan f_n sorozat, amelyre $(T-t)f_n \to 0$, akkor a $T-t$ operátornak nem létezhet korlátos inverze, tehát $t \in \sigma(T)$.

□

A tétel szerint egy önadjungált operátor spektruma *approximatív sajátértékekből* áll. $t \in \mathbb{R}$-et approximatív sajátértéknek nevezhetjük, ha van egységvektoroknak egy f_n sorozata, amelyre $(Tf_n - tf_n) \to 0$. Ha t sajátérték, akkor f_n-et n-től függetlennek választhatjuk.

Azt szokták mondani, hogy t az $T = T^*$ operátor *lényeges spektrumához* tartozik, ha tetszőleges $\varepsilon > 0$-ra a $(t-\varepsilon, t+\varepsilon)$ intervallumhoz tartozó spektrális projekció végtelen dimenziós, azaz végtelen dimenziós altérre vetít. Az előző tétel bizonyításának gondolatmenetével adódik, hogy t pontosan akkor tartozik T lényeges spektrumához, ha létezik olyan ortonormált f_n sorozat, amelyre $Tf_n - tf_n \to 0$. T lényeges spektrumára a $\sigma_{\mathrm{ess}}(T)$ jelölést használjuk. A lényeges spektrum nem változik kompakt perturbáció hatására.

5. tétel: (Weyl-tétel) *Legyen $T = T^*, K = K^* \in B(\mathcal{H})$ két önadjungált operátor, és tételezzük fel, hogy K kompakt. Ekkor T és $T + K$ lényeges spektruma azonos.*

Bizonyítás: Elég belátni, hogy $\sigma_{\mathrm{ess}}(T) \subset \sigma_{\mathrm{ess}}(T+K)$. Ha $t \in \sigma_{\mathrm{ess}}(T)$, akkor van olyan ortonormált f_n sorozat, amelyre $Tf_n - tf_n \to 0$. Mivel $f_n \xrightarrow{w} 0$, $Kf_n \to 0$, és $(T+K)f_n - tf_n \to 0$. Következésképpen $t \in \sigma_{\mathrm{ess}}(T+K)$.

□

2.4 Önadjungált kiterjesztések

A következőkben a szimmetrikus operátorok önadjungált kiterjesztéseit vizsgáljuk. Legyen H egy szimmetrikus operátor. Ha $f \in \mathcal{D}(H)$, akkor

$$\|(H+\mathrm{i}\,)f\|^2 = \|Hf\|^2 + \|f\|^2 = \|(H-\mathrm{i}\,)f\|^2 .$$

Ezért létezik egy izometrikus $U = (H - \mathrm{i}\,)(H+\mathrm{i}\,)^{-1}$ operátor $(H+\mathrm{i}\,)$ képterén, ami ezt $H - \mathrm{i}$ képterére képezi. U-t H *Cayley-transzformáltjának* nevezzük. Ha $\tilde{H}$ H-nak szimmetrikus kiterjesztése, akkor $\tilde{U}$ izometrikus kiterjesztése U-nak. Ennek a megfordítása is igaz.

Legyen $\tilde{U}$ izometrikus kiterjesztése U-nak, amely az $M^+ \supset \mathrm{Ran}\,(H+\mathrm{i}\,)$ alteret az $M^- \supset \mathrm{Ran}\,(H-\mathrm{i}\,)$ altérre képezi. Ha $f \in M^+$, $\tilde{U}f = f$, $h \in \mathcal{D}(H)$, $g = (H+\mathrm{i}\,)h$, akkor

$$\begin{aligned} 2\mathrm{i}\,\langle h, f\rangle &= \langle (H-\mathrm{i}\,)h - (H+\mathrm{i}\,)h, f\rangle = \langle Ug - g, f\rangle \\ &= \langle \tilde{U}g, \tilde{U}f\rangle - \langle g, f\rangle = 0 . \end{aligned}$$

Mivel $\mathcal{D}(H)$ sűrű, így arra következtethetünk, hogy $f = 0$, azaz $\mathrm{Ker}\,(\tilde{U} - 1) = \{0\}$.

A $\mathcal{D} = (\tilde{U} - 1)M^+$ értelmezési tartományon legyen $\tilde{H}$ úgy definiálva, hogy

$$(\tilde{H} + \mathrm{i}\,)^{-1} = \frac{1}{2}\mathrm{i}\,(\tilde{U} - 1) .$$

Más szóval, $\tilde{H}f = \frac{1}{2}(\tilde{U}+1)g$, ha $f = \frac{1}{2}\mathrm{i}\,(\tilde{U}-1)g$ és $g \in M^+$. Ekkor

$$\begin{aligned} \langle f_1, \tilde{H}f_2\rangle &= \left\langle \frac{1}{2}\mathrm{i}\,(\tilde{U}-1)g_1, \frac{1}{2}(\tilde{U}+1)g_2 \right\rangle \\ &= -\frac{1}{4}\mathrm{i}\,\left(-\langle g_1, \tilde{U}g_2\rangle + \langle \tilde{U}g_1, g_2\rangle\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \left\langle \frac{1}{2}(\tilde{U}+1)g_1, \frac{1}{2}\mathrm{i}\,(\tilde{U}-1)g_2 \right\rangle \\ &= \langle \tilde{H} f_1, f_2 \rangle \,. \end{aligned}$$

Ezért $\tilde{H}$ szimmetrikus. Bebizonyítottuk tehát a következőt.

2. lemma: *Legyen H egy szimmetrikus operátor. Ekkor kölcsönösen egyértelmű megfeleltetés van H szimmetrikus kiterjesztése és Cayley-transzformáltjának izometrikus kiterjesztései között.*

Egy szimmetrikus operátort *lényegében önadjungáltnak* nevezünk, ha lezárása önadjungált. A lemmából vezethető le a következő.

6. tétel: *Legyen H egy szimmetrikus operátor. H-nak akkor és csak akkor van önadjungált kiterjesztése, ha az*

$$L^{\pm} = \mathrm{Ran}\,(H \pm \mathrm{i}\,)^{\perp}$$

alterek dimenziója megegyezik. Továbbá az alábbi feltételek ekvivalensek:

(1) H lényegében önadjungált

(2) $\dim L^{+} = \dim L^{-} = 0$

(3) H-nak csak egy önadjungált kiterjesztése van.

□

Az $L^{\pm}$ altereket *defekt altereknek* nevezik. Érdemes megjegyezni, hogy $L^{\pm} = \mathrm{Ker}\,(H^* \mp \mathrm{i}\,)$.

8. példa: Legyen $\mathcal{D}(A) = \{f \in L^2(0,1) : f$ abszolút folytonos, $f' \in L^2(0,1)$ és $f(0) = f(1)\}$ és $Af = -\mathrm{i}\,f'$. Parciális integrálással megmutatható, hogy A szimmetrikus operátor.

Belátjuk, hogy $A \pm \mathrm{i}$ ráképezés, ami azzal ekvivalens, hogy a

$$-\mathrm{i}\,\frac{d}{dt}f \pm \mathrm{i}\,f = g \tag{2.2}$$

differenciálegyenletnek tetszőleges $g \in L^2(0,1)$ esetén van f megoldása a $\mathcal{D}(A)$ halmazban. Valóban, a megoldás explicit módon megadható

$$f(t) = \pm\left(\mathrm{i}\int_0^t e^{-x} g(x)\,dx + c\right)e^t\,, \tag{2.3}$$

ami a

$$c = \mathrm{i}\,\frac{e}{1-e}\int_0^1 e^{-x} g(x)\,dx$$

paraméterválasztás mellett $\mathcal{D}(A)$-beli függvény.

Hivatkozással az előző tételre megállapíthatjuk, hogy A lényegében önadjungált. Alább bizonyítjuk, hogy A zárt operátor, ezért önadjungáltnak kell lennie.

A gondolatmenet általános, érdemes a példától függetlenül is megjegyezni. Azt állítjuk, hogy, ha T egy szimmetrikus operátor és $\lambda + \mathrm{i}\,\mu - T$ ráképezés valamely $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ számokra, $\mu \neq 0$, akkor T zárt. A 1. lemma alapján elég megmutatni, hogy $(\lambda + \mathrm{i}\,\mu) \in \rho(T)$. Az 1. fejezet 10. tételének számolása szerint

$$\|[(\lambda + \mathrm{i}\,\mu) - T]f\|^2 \geq \mu^2 \|f\|^2\,,$$

ami azt mutatja, hogy $(\lambda + \mathrm{i}\,\mu) - T$ korlátos inverzzel rendelkezik, tehát $(\lambda + \mathrm{i}\,\mu) \in \rho(T)$.

Most vizsgáljuk meg ugyanezzel a módszerrel a 4. példa T_1 differenciáloperátorát. A fentiekhez hasonlóan $T_1 \pm \mathrm{i}$ képterének vizsgálatához, a (2.2) differenciálegyenletet kell tekinteni, aminek általános megoldása (2.3). A $f(0) = f(1) = 0$ kezdetiérték feltétel az olyan g-ekre elégíthető ki, amelyekre

$$\int_0^1 e^{-x} g(x)\, dx = 0\,.$$

Ezért a $\mathrm{Ran}\,(T_1 \pm \mathrm{i}\,)^\perp$ alteret az e^{-x} függvény feszíti ki, mindkét defekt altér egy dimenziós, ezért T_1 nem lényegében önadjungált, de van önadjungált kiterjesztése. Ez önmagában nem meglepő, hiszen a fenti A éppen egy önadjungált kiterjesztése T_1-nek. T_1 egy önadjungált kiterjesztésének Cayley-transzformáltja az e^{-x} vektort egy számszorosába kell, hogy vigye. Mivel a Cayley-transzformált izometria, létezik $\alpha \in \pi$, egy abszolút értékű komplex szám, hogy $e^{-x} \mapsto \alpha e^{-x}$ a Cayley transzformált hatása. Minden $\alpha \in \mathbb{T}$-re van T_1-nek egy $T_1^{(\alpha)}$ önadjungált kiterjesztése.

□

9. példa: Legyen $\mathcal{D}(P) = \{f \in L^2(\mathbb{R}) : f' \in L^2(\mathbb{R})$ és f' integrálható kompakt intervallumokon$\}$. Meg fogjuk mutatni, hogy a

$$Pf = -\mathrm{i}\,\frac{d}{dt} f$$

differenciáloperátor önadjungált az $L^2(\mathbb{R})$ Hilbert-téren.

Ha $f, g \in \mathcal{D}(P)$, akkor

$$\begin{aligned}
\langle f, Pg \rangle &= \int -\overline{f(s)}\mathrm{i}\, g'(s)\, ds \\
&= \lim_{t\to\infty} \int_{-t}^{t} -\overline{f(s)}\mathrm{i}\, g'(s)\, ds \\
&= -\mathrm{i} \lim_{t\to\infty} \overline{f(s)} gs \Big|_{-t}^{t} + \lim_{t\to\infty} \int_{-t}^{t} \overline{-\mathrm{i}\, f'(s)} g(s)\, ds \\
&= \int \overline{-\mathrm{i}\, f'(s)} g(s)\, ds \\
&= \langle Pf, g \rangle\,,
\end{aligned}$$

és P szimmetrikus.

Ezután belátjuk, hogy $P \pm \mathrm{i}$ ráképezés. A $P - \mathrm{i}$ esetet részletezzük, $P + \mathrm{i}$ hasonlóan tárgyalható. Azt kell tehát látnunk, hogy a

$$-\mathrm{i}\, f' - \mathrm{i}\, f = h$$

differenciálegyenletnek bármilyen $h \in L^2(\mathbb{R})$ mellett van megoldása $\mathcal{D}(P)$-ben. Az

$$y' + \alpha y = g$$

egyenlet általános megoldása

$$y(x) = ce^{-\alpha x} + e^{-\alpha x} \int_0^x e^{\alpha t} g(t)\, dt\,.$$

Esetünkben $\alpha = 1$ és a c konstansot alkalmasan kell választanunk.

$$y(x) = e^{-x} \left(c + \int_0^x e^t g(t)\, dt \right)$$

a $+\infty$-ben 0-hoz tart (ha $y \in \mathcal{D}(P)$), így

$$c = \int_{-\infty}^{0} e^t g(t)\, dt\,.$$

Következésképpen

$$f(x) = e^{-x}\left(c + \int_0^x e^t g(t)\, dt\right) = \int_{-\infty}^{x} e^{t-x} g(t)\, dt = \int_{-\infty}^{0} e^s g(s+x)\, ds\,.$$

Megmutatjuk, hogy $f \in L^2(\mathbb{R})$. A becslésben felhasználjuk a $(T_s g)(x) = g(x+s)$ eltoláscsoportot, amely unitér operátorokból áll.

$$\begin{aligned}
|\langle f, h\rangle| &= \left|\iint_{-\infty}^{0} e^s \overline{g(s+x)} h(x)\, ds\, dx\right| \\
&\le \iint_{-\infty}^{0} e^s |g(s+x)|\,|h(x)|\, ds\, dx \\
&= \int_{-\infty}^{0} e^s \int |g(s+x)|\,|h(x)|\, dx\, ds \\
&= \int_{-\infty}^{0} e^s \langle |T_s g|,\, |h|\rangle\, ds \\
&\le \int_{-\infty}^{0} e^s \|g\|\,\|h\|\, ds = \|g\|\,\|h\|\,.
\end{aligned}$$

□

2.5 Lényegében önadjungált operátorok

A következő tétel számos fontos esetben alkalmazható elégséges feltételt biztosít annak eldöntésére, hogy egy szimmetrikus operátor lényegében önadjungált legyen.

7. tétel: *Legyen H egy szimmetrikus operátor és $(f_i) \subset \mathcal{D}(H)$ egy sajátvektorokból álló bázis. Ekkor H lényegében önadjungált az értelmezési tartományán.*

Bizonyítás: Legyen a f_i-hez tartozó sajátérték λ_i. Ha $f =: \sum \alpha_i f_i \in \mathcal{H}$ és $f \in \mathcal{D}(H)$, akkor $Hf = \sum \lambda_i \alpha_i f_i$ és

$$\sum_i (\alpha_i)^2 < +\infty\,, \qquad \sum |\lambda_i \alpha_i|^2 < +\infty\,.$$

A

$$\mathcal{D}_0 = \left\{\sum \alpha_i f_i \,:\, \sum (1+\lambda_n^2)\, |\alpha_n|^2 < +\infty\right\}$$

halmazon értelmezzünk egy T operátort a

$$T\left(\sum \alpha_i f_i\right) = \sum \alpha_i \lambda_i f_i$$

képlettel. Ekkor $H \subset T$. Legyen S a $\{\lambda_i \,:\, i \in \mathbb{N}\}$ halmaz lezárása, és $z \notin S$. Értelmezzünk egy A operátort az

$$A\left(\sum \gamma_i f_i\right) := \sum \gamma_i (z-\lambda_i)^{-1} f_i$$

képlettel. A korlátos és injektív. $(z-T)Af = f$ minden $f \in \mathcal{H}$ vektorra. Ezért $z \notin \sigma(H)$.

Mivel T spektruma nem a teljes $\mathbb{C}$, T egy zárt operátor. Könnyű látni, hogy T lezárása H-nak.

□

10. példa: Tekintsük a $D : f \mapsto -\mathrm{i}\, f'$ differenciálás operátort a $(0,1)$ nyílt intervallumon kompakt tartójú sima függvények $\mathcal{D}(D)$ terén. Parciális integrálással

$$\langle f, -\mathrm{i}\, g' \rangle = -\mathrm{i}\, [f,g] + \langle \mathrm{i}\, f', g \rangle \,,$$

ahol $[f,g] := \lim_{x\to 1-} \overline{f}(x) g(x) - \lim_{x\to 0+} \overline{f}(x) g(x)$. Ez természetesen mutatja, hogy D szimmetrikus, de azt is kiolvashatjuk, hogy ha D értelmezési tartományát bővíteni akarjuk a szimmetrikusság megőrzése mellett, akkor az

$$[f,f] = |f(0)|^2 - |f(1)|^2 = 0$$

feltételre ügyelnünk kell. Ha $f(1) = \alpha f(0)$ valamilyen $\alpha \in \mathbb{T}$ számra, akkor ez teljesül.

Legyen $\mathcal{D}_\alpha = \{ f \in L^2[0,1] \,:\, f \in C^\infty,\ f(1) = \alpha f(0) \}$. Ha $e^{\mathrm{i}\,\varphi} = \alpha \in \mathbb{T}$, akkor a $H_\alpha \,:\, f \mapsto -\mathrm{i}\, f'$ operátor lényegében önadjungált a $\mathcal{D}_\alpha$ értelmezési tartományon. Valóban, az $f_n(x) = \alpha^x e^{2\mathrm{i}\,\pi n x}$ függvények ($n \in \mathbb{Z}$) sajátvektorokból álló bázist alkotnak, és H_α szimmetrikus. Az előző tétel szerint H_α lényegében önadjungált.

H_α spektruma $\varphi + 2\pi\mathbb{Z}$, és minden sajátérték egy multiplicitású . A rezolvens operátor $(\lambda - H_\alpha)^{-1}$ kompakt minden $\lambda \notin \varphi + 2\pi\mathbb{Z}$ értékre.

A H_α operátorok D-nek önadjungált kiterjesztései. A lehetséges önadjungált kiterjesztések $\mathbb{T}$-vel vannak paraméterezve.

Az előbbiek nagy mértékben általánosíthatók. Legyen Ω egy tartomány $\mathbb{R}^n$-ben. A Laplace-operátor

$$\Delta_n f = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_k^2}$$

értelmezhető a kétszer folytonosan differenciálható függvények osztályán. A Green-tétel szerint

$$\int_\Omega f \overline{\Delta_n g} - \overline{g} \Delta_n f \, dx = \int_{\partial\Omega} \left(f \frac{\overline{\partial g}}{\partial \nu} - \frac{\partial f}{\partial \nu} \overline{g} \right) ds \,,$$

ahol $\partial\Omega$ a tartomány határa és $\frac{\partial}{\partial\nu}$ jelenti a normális irányú deriválást. Δ_n akkor lesz szimmetrikus operátor, ha a jobb oldal eltűnik. Ezt könnyen biztosíthatjuk, ha az értelmezési tartományba olyan f függvényeket választunk, amelyek eltűnnek $\partial\Omega$-n, *Dirichlet-féle peremfeltétel.* Természetesen ugyanilyen jó a $\frac{\partial}{\partial\nu} f = 0$ feltételt kielégítő függvények osztálya, *Neumann-féle peremfeltétel.* A Dirichlet-féle és a Neumann-féle Laplace-operátorok egyaránt szimmetrikusak.

□

11. példa: Tekintsük az egységgömb felületén sima függvényeken értelmezett

$$(\Lambda g)(\theta,\varphi) := \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial g}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 g}{\partial\varphi^2} \right)(\theta,\varphi)$$

differenciáloperátort, ami gömbi koordinatákban van megadva.

$L^2(S, d\Omega)$-ban az Y_{lm} gömbfüggvények bázist alkotnak, $m \in \mathbb{Z}$, $l \geq |m|$, lásd az első fejezet 22. példáját. A (1.5) differerenciálegyenletből levezethető, hogy

$$\Lambda Y_{lm} = -l(l+1) Y_{lm} \tag{2.4}$$

azaz a gömbfüggvények sajátfüggvényei a Λ operátornak.

Így Λ lényegében önadjungált, $\Lambda \leq 0$ és a $l(l+1)$ sajátértékhez tartozó sajátaltér dimenziója $2l+1$, tehát a spektrum erősen degenerált.

□

Az előző példa Λ operátora szoros kapcsolatban áll a Laplace-operátorral, ugyanis a Laplace-operátor polárkoordinátákban a

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Lambda \tag{2.5}$$

alakot ölti. $r^l Y_{lm}$ megoldása $\Delta u = 0$ egyenletnek $r^l Y_{lm}$ Descart-féle koordinátákba átírva az x_1, x_2, x_3 változók homogén l-edfokú polinomja. Ezek a polinomok természetesen lineárisan függetlenek, hiszen az egységgömbre megszorítva az $L^2(S, d\Omega)$ tér bázisát adják. *Harmonikus polinomoknak* nevezik őket.

12. példa: Tekintsük a $C^2[-1,1]$ tartományon értelmezett $(Lf)(x) = ((x^2-1)f')'$ másodrendű differenciáloperátort:

$$\int_{-1}^{1} g(x)(p(x)f'(x))'\,dx = [g(x)p(x)f'(x)]_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} g'(x)p(x)f'(x)\,dx =$$

$$= [g(x)p(x)f'(x)]_{-1}^{1} - [g'(x)p(x)f(x)]_{-1}^{1} + \int_{-1}^{1} (p(x)g'(x))'f(x)\,dx\,.$$

Ha $p(x) = x^2 - 1$, akkor $p(\pm 1) = 0$, és számolásunk mutatja, hogy L szimmetrikus operátor. L sajátfüggvényei a Legendre-féle polinomok, amelyek bázist alkotnak, így L a $C^2[-1,1]$ tartományon lényegében önadjungált.

Az $f \mapsto -(pf')' + gf$ alakú differenciáloperátorokat *Sturm-Liouville-operátoroknak* nevezik. A fenti L előjeltől eltekintve ilyen alakú.

□

13. példa: Tekintsük megint a 5. példa H_D operátorát. H_D sajátfüggvényei

$$f_n(x) = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\sin n\pi x \qquad (n \in \mathbb{N})\,.$$

Az ehhez a függvényhez tartozó sajátérték $-n^2$. Mivel a f_n függvények egy bázist alkotnak $L^2[0,1]$-ben (lásd az 1. Fejezet 8. példáját), a H_D operátor lényegében önadjungált.

$0 \notin \sigma(H_D)$, így a korlátos inverz: H_D^{-1} létezik, és egy kompakt operátor. Ha egy operátor inverzét, vagy általánosabban véve rezolvensét integráloperátorként lehet előállítani, akkor annak magfüggvényét gyakran az operátor *Green-függvényének* nevezik. Ha

$$K(x,y) = \begin{cases} (1-y)x & \text{ha} \quad 0 \le x \le y \le 1 \\ (1-x)y & \text{ha} \quad 0 \le y \le x \le 1 \end{cases}$$

és

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_0^1 K(x,y)g(y)\,dy = \int_0^x (1-x)yg(y)\,dy + \int_x^1 (1-y)xg(y)\,dy \\ &= -x\int_0^1 yg(y)\,dy + \int_0^x yg(y)\,dy + x\int_x^1 g(y)\,dy\,, \end{aligned}$$

akkor világos, hogy $f(0) = f(1) = 0$. Továbbá

$$\begin{aligned} f'(x) &= -\int_0^1 yg(y)\,dy + xg(x) + \int_x^1 g(y)\,dy - xg(x) \\ f''(x) &= -g(x)\,. \end{aligned}$$

Tehát a $K(x,y)$ magfüggvénynek megfelelő integráloperátor H_D inverzét adja.

□

8. tétel: *Tekintsük a* $\mathcal{D} = \{f \in C^2[a,b] \,:\, \beta_1 f(a) + \gamma_1 f'(a) = 0,\ \beta_2 f(b) + \gamma_2 f'(b) = 0\}$ *értelmezési tartományon az*

$$Lf = -(pf')' + gf$$

differenciáloperátort. Tételezzük fel, hogy $|\beta_1| + |\gamma_1| > 0$, $|\beta_2| + |\gamma_2| > 0$, $p \in C^1[a,b]$, $g \in C[a,b]$ *valós függvények, továbbá, hogy 0 nem sajátértéke L-nek. Ekkor L szimmetrikus operátor,* L^{-1} *kompakt és folytonos magfüggvénnyel megadható Hilbert-Schmidt-féle integráloperátor.*

Bizonyítás: L szimmetrikussága az előző példához hasonlóan parciális integrálással könnyen belátható.

Legyen $f_1(x)$ és $f_2(x)$ két megoldása az $Lf = 0$ $f \in \mathcal{D}$ kezdeti érték problémának. Mivel L-nek a 0 nem sajátértéke, u_1 és u_2 lineárisan függetlenek és a differenciálegyenletek elméletéből tudjuk, hogy a Wronski-féle determináns

$$w(x) = \begin{vmatrix} f_1(x) & f_2(x) \\ f_1'(x) & f_2'(x) \end{vmatrix}$$

nem nulla. Legyen

$$g(x) = \int_a^x \frac{f_1(x)f_2(y) - f_2(x)f_1(y)}{p(a)w(a)} h(y)\, dy\,.$$

Ekkor

$$f(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x) + g(x)$$

az általános megoldása az $Lf = h$ egyenletnek. A c_1 és c_2 konstansokat alkalmasan választjuk: $c_2 = 0$ és

$$c_1 = -\int_a^b \frac{f_2(y)}{p(a)w(a)} h(y)\, dy\,.$$

Ekkor a peremfeltétel teljesül, $f \in \mathcal{D}$ és

$$f(x) = \int_a^b g(x,y) h(y)\, dy\,,$$

ahol

$$g(x,y) = \begin{cases} -\dfrac{f_1(x)f_2(y)}{p(a)w(a)} & \text{ha} \quad a \le x \le y \le b \\ -\dfrac{f_2(x)f_1(y)}{p(a)w(a)} & \text{ha} \quad a \le y \le x \le b\,. \end{cases}$$

A szimmetrikus valós magfüggvény (azaz az L operátor Green-függvénye) folytonos, L^{-1} valóban kompakt operátor.

□

A tételből következik, hogy a Sturm-Liouville-féle operátorok lényegében önadjungáltak (a tétel feltételei mellett). Ugyanis L szimmetrikus, így különböző sajátértékekhez tartozó sajátfüggvények ortogonálisak. $L^2[a,b]$ szeparábilis, tehát L-nek legfeljebb megszámlálható sok sajátértéke van. Választhatunk $\lambda \in \mathbb{R}$-et, ami nem sajátérték. $L - \lambda$ is Sturm-Liouville-féle operátor, amelynek 0 biztosan nem sajátértéke, ezért alkalmazható rá a tétel. $(L - \lambda)^{-1}$-hez van sajátfüggvényekből álló bázis, aminek elemei persze L-nek is sajátfüggvényei (csupán más sajátértékkel). Végeredményben van olyan bázis, ami L sajátfüggvényeiből áll, és hivatkozva a 7. tételre megállapíthatjuk, hogy L lényegében önadjungált.

14. példa: (A harmonikus oszcillátor) A kvantummechanikában az egy dimenziós harmonikus oszcillátor energia (vagy Schrödinger-) operátora

$$(Hf)(x) = -f''(x) + \omega^2 x^2 f(x)$$

alakú. (Értelmezési tartománynak a $C_0^\infty(\mathbb{R})$-teret vehetjük.). H maga egy Sturm-Liouville-féle operátor, *szingulárisnak* mondják, mert nem véges intervallumon van véve. Közvetlenül ellnőrizhető, hogy H szimmetrikus. Sajátfüggvényeinek felderítéséhez a

$$Hf = \lambda f$$

differenciálegyenletet kell megoldani. Ez a változók transzformálásával (x helyébe $\sqrt{\omega}x$, λ helyébe $\omega\lambda$)

$$-\frac{d^2 f}{dx^2} + x^2 f = \lambda f$$

alakot ölti, majd a $f(x) = e^{-x^2/2} g(x)$ helyettesítéssel a

$$g'' - 2xg' + (\lambda - 1)g = 0$$

Hermite-féle differenciálegyenlethez jutunk, amelynek megoldása $\lambda = 2n+1$ esetén a $H_n(x)$ n-edfokú Hermite-polinom.

$$\varphi_n(x) = c_n H_n(\sqrt{\omega}x) \exp\big(-\omega x^2/2\big) \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

a c_n normális konstansok alkalmas választásával egy sajátfüggvényekből álló bázis az $L^2(\mathbb{R})$ térben. Így a H operátor lényegében önadjungált (vesd össze a 7. tétellel). A $\varphi_n(x)$ függvényeket az $\omega = 1$ esetben *Hermite-függvényeknek* nevezik.

A továbbiakban a $\omega = 1$ egyszerűsítéssel élünk. Annak ellenére, hogy H szinguláris Sturm-Liouville-féle operátor, a reguláris esethez hasonlóan létezik kezelhető Green-függvénye. H-nak a 0 nem sajátértéke, így a H^{-1} operátort előállíthatjuk magfüggvény segítségével. Legyen

$$g(x,y) = \begin{cases} -\dfrac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left(\dfrac{x^2+y^2}{2}\right) \Phi(x)\Phi(y) & \text{ha} \quad x \le y\,, \\ -\dfrac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left(\dfrac{x^2+y^2}{2}\right) \Phi(y)\Phi(x) & \text{ha} \quad y < x\,, \end{cases}$$

ahol $\Phi(x) = \int_{-\infty}^{x} e^{-t^2}\,dt$ (lényegében egy Gauss-eloszlás eloszlásfüggvénye.). Több-kevesebb számolással adódik, hogy

$$H^{-1} f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x,y) f(y)\,dy\,,$$

pontosabban

$$h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x,y) f(y)\,dy \quad \text{esetén} \quad Hh = f$$

folytonos $f \in L^2(\mathbb{R})$ függvényekre. Tehát a folytonos szimmetrikus $g(x,y)$ függvény a H operátor Green-függvénye. Megfelelő becslések segítségével közvetlenül igazolható, hogy

$$\iint |g(x,y)|^2\,dxdy < +\infty\,.$$

Mivel H spektrális előállítását ismerjük, és tudjuk már, hogy $g(x,y)$ Green-függvény, egy másik utat is járhatunk:

$$\begin{aligned} \iint |g(x,y)|^2\,dxdy &= \sum_{n,m} \left| \iint g(x,y)\varphi_n(x)\varphi_m(y)\,dxdy \right|^2 \\ &= \sum_{n,m} \left|\langle \varphi_n, H^{-1}\varphi_m \rangle\right|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2}\,. \end{aligned}$$

A kapott sor evidens módon konvergens (összege $\pi^2/8$).

A két dimenziós harmonikus oszcillátor Schrödinger-operátora (a forgásszimmetrikus esetben)

$$(H_2 f)(x,y) = -\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2}\right) f(x,y) + (x^2+y^2) f(x,y) \, .$$

A $\varphi_n(x)\varphi_m(y)$ alakú függvények bázisát adják $L^2(\mathbb{R}^2)$-nek, ha $n,m \in \mathbb{Z}^+$. Az egydimenziós oszcillátorról elmondottakat felhasználva

$$H_2 \varphi_n(x)\varphi_m(y) = (2n+2m+2)\varphi_n(x)\varphi_m(y) \, .$$

Így H_2 sajátértékei $2,4,6,\ldots$. A 2 sajátérték kivételével többszörös multiplicitásúak: $2k$ multiplicitása, annyi, ahányféleképpen $k-1$ előáll nemnegatív egészek összegeként, ez éppen k.

□

15. példa: (A hidrogén atom) A protonból és elektronból álló hidrogén atom energia operátora

$$Hf(x,y) = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_x f(x,y) - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_y f(x,y) - \frac{e^2}{\|x-y\|} f(x,y) \qquad (x,y \in \mathbb{R}^3)$$

az $L^2(\mathbb{R}^6)$ Hilbert-téren. Fizikailag H első tagja az m_1 tömegű és e töltésű protonnak, a második az m_2 tömegű és e töltésű elektronnak, a harmadik pedig a Coulomb-kölcsönhatásnak felel meg. H értelmezési tartományának a gyorsan csökkenő függvények $\mathcal{S}(\mathbb{R}^6)$ terét tekinthetjük. Célunk az, hogy belássuk: H lényegében önadjungált.

Az

$$u = \frac{m_1 x + m_2 y}{m_1 + m_2}, \qquad v = y - x$$

transzformációt hajtjuk végre. (u a tömegközéppont helye, v pedig az elektronnak a protonhoz viszonyított helyzete.) A transzformáció Jacobi-determinánsa 1, így $L^2(\mathbb{R}^6)$-nak egy U unitér operátorát indukálja. (E tény részletesebb tárgyalása megtalálható az 1. Fejezet 20. példájában.) U a Schwartz-teret önmagába képezi.

$$U^*HUg(u,v) = -\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\Delta_u g(u,v) - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_v g(u,v) - \frac{e^2}{\|v\|} g(u,v)$$

ahol $\mu = m_1 m_2/(m_1+m_2)$. A transzformáció matematikai jelentősége az, hogy a vizsgált operátor egy olyan összegre bomlik, amelynek egyik tagja csak az u változóban, másik tagja (amely valójában a fenti második és harmadik tag összege) a v változóban hat. A változókat sikerült szétválasztani, ami azért előnyös, mert ha a $L^2(\mathbb{R}^6)$ teret az $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$ tenzorszorzattal azonosítjuk, akkor

$$U^*HU = H_1 \otimes \mathrm{id}_2 + \mathrm{id}_1 \otimes H_2$$

ahol H_1 az u változóban ható Laplace-operátor konstans szorosa és

$$H_2 g(v) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta g(v) - \frac{e^2}{\|v\|} g(v) \, .$$

A Laplace-operátorról tudjuk, hogy lényegében önadjungált $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$-on, és ki fogjuk mutatni, hogy H_2 is az. Ez elegendő ahhoz, hogy U^*HU lényegében önadjungált legyen $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3) \otimes \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$-on. Ezt a kijelentést itt bizonyítás nélkül elfogadjuk, valójában a következő eredményt használjuk. Ha $\mathcal{D}_1$-en H_1 lényegében önadjungált és $\mathcal{D}_2$-en H_2 lényegében önadjungált, akkor $H_1 \otimes \mathrm{id}_2 + \mathrm{id}_1 \otimes H_2$ lényegében önadjungált lesz a

$$\{f \otimes g : f \in \mathcal{D}_1, g \in \mathcal{D}_2\}$$

vektorok által feszített altéren. Esetünkben $\mathcal{D}_1 = \mathcal{D}_2 = \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$, és az $f(u)g(v)$ függvények által feszített altér része $\mathcal{S}(\mathbb{R}^6)$-nak. Ezen U^*HU tehát lényegében önadjungált. Mivel U invariánsan hagyja $\mathcal{S}(\mathbb{R}^6)$-ot, maga H is lényegében önadjungált lesz.

H_1-ről tudjuk, hogy folytonos a spektruma. Fizikailag ez a tag adja az atom (azaz a proton és elektron tömegközéppontja) haladó szabad mozgásának a folytonos energiáját. H_2 a tömegközépponthoz viszonyított relativ mozgás enegiája, amiben nem az elektron valódi m_2 tömege, hanem a tömegként megjelenő μ mennyiség szerepel, redukált tömegként is emlegetik. H_2-ről ki fog derülni, hogy van olyan bázisa az $L^2(\mathbb{R}^3)$ térnek, amely sajátvektoraiból áll, sőt, ami jóval több H_2 kompakt.

Újabb koordináta transzformációt hajtunk végre, áttérünk térbeli polárkoordinátákra. A transzformáció mögött most is egy unitér operátor áll, $V : L^2(\mathbb{R}^3) \to L^2(\mathbb{R}^+ \times S^2, dr d\Omega)$,

$$(Vf)(r, \theta, \varphi) = r f(x) ,$$

ahol $x_1 = r \sin\theta \cos\varphi$, $x_2 = r \sin\theta \sin\varphi$, $x_3 = r \cos\theta$ és $x = (x_1, x_2, x_3)$. $d\Omega$ a gömbfelületen a felszin szerinti integrálást jelöli.

$$VH_2V^*\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right] - \frac{e^2}{r}\psi , \tag{2.6}$$

amiben megjelenik a 2.4 példa Λ differenciáloperátora. Az egyszerűség kedvéért áttérünk olyan egységekre, hogy $\hbar = 1, e^2 = 2$ és $\mu = 1/2$ legyen. Ekkor:

$$K := VH_2V^* = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{2}{r} - \frac{1}{r^2}\Lambda . \tag{2.7}$$

Az $L^2(\mathbb{R}^+ \times \mathcal{S}^2, dr d\Omega)$ tér szorzatra bontható, $L^2(\mathbb{R}^+) \otimes L^2(S^2, d\Omega)$. A $L^2(S^2, d\Omega)$ téren ható Λ operátor spektrális felbontása ismeretes: Minden l nemnegatív egész számhoz van egy $\mathcal{H}_l$ sajátaltér, amit az Y_{lm} gömbfüggvények feszítenek ki, $|m| \leq l$. Tehát $\mathcal{H}_l$ dimenziója $2l+1$. Λ megszorítva $\mathcal{H}_l$-re $-l(l+1)$-gyel való szorzásként viselkedik. Ha $\psi(r, \theta, \varphi) \in L^2(\mathbb{R}^+) \otimes \mathcal{H}_l$, akkor

$$K\psi = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi - \frac{2}{r}\psi + l(l+1)\frac{1}{r^2}\psi .$$

Legyen $K_l := K|L^2(\mathbb{R}^+) \otimes \mathcal{H}_l$. A $K_l\psi = E\psi$ sajátfüggvény egyenlet π megoldását $\psi = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ formában keressük. Ekkor a radiális R függvényre a

$$-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r) - \frac{2}{r}R(r) + l(l+1)\frac{1}{r^2}R(r) = ER(r)$$

differenciálegyenletet kapjuk, amiben E egyelőre meghatározatlan valós szám. Az egyenlet egyszerűsödik az $u(r) = rR(r)$ változóban:

$$u''(r) + \left(E + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u(r) = 0, \tag{2.8}$$

ugyanis

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r) = ru''(r) .$$

Az (2.8) egyenlet analízisét nem észletezzük. Négyzetesen integrálható megoldása akkor van, ha az E szám $-1/n^2$ alakú, $n \in \mathbb{N}$, és $l < n$. Az egyenlet megoldása egy $v(r)$ függvény bevezetésével történik, legyen $u(r) = e^{-r/n}r^{l+1}v(r)$. Ekkor

$$t\frac{d^2v}{dt^2} + (2l + 2 - t)\frac{dv}{dt} + (n - l - 1)v = 0 ,$$

ahol $t = 2r/n$. A kapott egyenletet összevethetünk a 1. Fejezet (1.13) egyenletével. $\alpha = 2l + 1$ és $n - l - 1 \geq 0$ egész szám. A megoldás $L^{(2l+1)}_{n-l-1}(t)$ és a radiális sajátfüggvények

$$R_{nl}(r) = c_{nl} e^{-r/n} \left(\frac{2r}{n}\right)^l L^{2l+1}_{n-l-1}\left(\frac{2r}{n}\right) \tag{2.9}$$

c_{nl} a normalizáló konstans, értéke az

$$\int r^2 R^2_{nl}(r)\, dr = 1$$

feltételből számolható. (Ez az egyenlet sajnos különbözik (1.14)-tól, de azért a Laguerre-polinomokra vonatkozó rekurzió segítségével arra visszavezethető.)

A K_l operátor sajátértékei hagyományos egységekben a

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2n^2\hbar^2} \qquad (n \in \mathbb{N}) \tag{2.10}$$

számok, $l < n$. A megfelelő sajátfggvények teljes rendszert alkotnak, mert rögzített l-re $R_{n,l}$ teljes rendszer. (Utóbbi egy nem részletezett állítás.) Ezért K_l spektrális előállítását ismerjük. K_l egy kompakt önadjungált operátor. Sajátértékei véges multiplicitásúak, pontosabban $2l + 1$ mindegyiknek a multiplicitása, és a 0-hoz tartanak.

A K_l operátorokból összerakjuk magát a K operátort. Ez is egy kompakt önadjungált operátor (2.10) sajátértékekkel és

$$R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

sajátfüggvényekkel. Rögzített n-re l lehetséges értékei $l = 0, 1, 2, \ldots, n - 1$, és $|m| \leq l$. Az E_n-hez tartozó sajátaltér dimenziója

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1)^2 = n^2 \,.$$

A sajátfüggvények mind

$$C e^{-r/n} p_1(r) p_2(x, y, z) r^{-l}$$

alakúak, alkalmas C állandóval, egyváltozós p_1 polinommal és háromváltozós p_2 polinommal. Ezért gyorsan csökkenő sima függvények.

Az n, l, m paramétereket a fizikában *főkvantumszámnak, mellékkvantumszámnak, ill. mágneses kvantumszámnak* nevezik. Az E_n értékek kiszámítása és a mért spektrummal való megegyezése a kvantumelmélet első győzelmei közé tartozott 1925-26-ban.

□

2.6 Egyparaméteres unitér csoportok

9. tétel: (Stone-tétel) *Legyen $U(t) \in B(\mathcal{H})$ egy erősen folytonos egyparaméteres unitér csoport. Ekkor létezik egy $A = A^*$ önadjungált operátor, amelyre $U(t) = \exp(\mathrm{i}\, tA)$.*

Bizonyítás: Legyen

$$Ax := \lim_{s \to 0} \frac{U(s) - I}{\mathrm{i}\, s} x \tag{2.11}$$

azon $x \in \mathcal{H}$ vektorokra, amelyekre a limesz (normában) létezik. Ezt a A lineáris operátort a csoport *generátorának* nevezzük. Először megmutatjuk, hogy a generátor $\mathcal{D}(A)$ értelmezési tartománya sűrű halmaz.

Legyen

$$\mathcal{D}_0 = \left\{ x_f := \int f(t) U_t x \, dx \, : x \in \mathcal{H}, \; f \in C_0^\infty(\mathbb{R}) \right\} .$$

Itt a vektorértékű függvény integrálját a következőképpen értjük. Rögzített $x \in \mathcal{H}$-ra

$$F_x \, : y \longmapsto \int \langle f(t) U_t x, y \rangle \, dt$$

egy korlátos lineáris funkcionál így a Riesz-Fischer-tétel szerint létezik egy $x_f \in \mathcal{H}$ vektor, amelyre

$$\langle x_f, y \rangle = \int \langle f(t) U_t x, y \rangle \, dt \, .$$

Legyen j_ε az approximatív egység az 1. Fejezet 12. példájából. Ekkor

$$\|x - x_{j_\varepsilon}\| \le \int j_\varepsilon(t) \|(U_t - I)x\| \, dt \le \{ \|(U_t - I)x\| \, : \, -\varepsilon \le t \le \varepsilon \}$$

bármilyen $x \in \mathcal{H}$ vektorra. A jobb oldal tart 0-hoz U_t feltételezett folytonossága alapján, így $\varepsilon \to 0$ esetén $x_{j_\varepsilon} \to x$. Ez mutatja, hogy a $\mathcal{D}_0$ halmaz sűrű.

$$\frac{U_s - I}{\mathrm{i}\, s} x_f = \frac{1}{\mathrm{i}\, s} \int f(t) [U(s+t) - U(t)] x \, dt = \int \frac{f(t-s) - f(t)}{\mathrm{i}\, s} U(t) x \, dt \, .$$

(Az integrandus normájának van integrálható majoránsa, hiszen f kompakt tartójú.) Az $s \to 0$ határátmenettel kapjuk, hogy

$$A x_f = \mathrm{i} \int f'(t) U_t x \, dt = x_{\mathrm{i}\, f'} \, .$$

Nevezetesen, $\mathcal{D}_0 \subset \mathcal{D}(A)$. Ráadásul a $\mathcal{D}_0$ halmazon pontosan ismerjük a A generátor hatását.

Legyen $A_0 := A \mid \mathcal{D}_0$. Célunk most az, hogy bebizonyítsuk, hogy A_0 lényegében önadjungált.

Ha T_t az eltolás csoport $L^2(\mathbb{R})$-en, lásd 31. példát, akkor könnyen ellenőrizhető, hogy

$$T_s x_f = x_{T(-s) f}$$

és

$$A_0 T_s z = A_0 T_s z$$

minden $z \in \mathcal{D}_0$-ra.

Kiszámolható, hogy

$$\langle A_0 x_f, x_g \rangle = \langle x_f, A_0 x_g \rangle$$

minden $f, g \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ esetén (parciális integrálás). Tehát A_0 szimmetrikus. A lényegében önadjungált tulajdonság igazolásához a 6. tételt használjuk fel.

Legyen $y \in \mathcal{D}(A_0^*)$ és tételezzük fel, hogy $T_0^* y = \mathrm{i}\, y$. Ekkor

$$\frac{d}{ds} \langle y, U(s) z \rangle = \left\langle y, \frac{dU(s)}{ds} z \right\rangle = -\mathrm{i} \, \langle A_0^* y, U(s) z \rangle = \langle y, U(s) z \rangle$$

érvényes minden $z \in \mathcal{D}_0$ vektorra. Ez egy differenciálegyenlet, aminek megoldása

$$\langle y, U(s)z\rangle = \langle y, z\rangle e^s$$

az $U(0) = I$-ból adódó kezdeti érték miatt. Mivel ez s-nek korlátos függvénye kell, hogy legyen, $\langle y, z\rangle = 0$ kell, hogy teljesüljön. Mivel $z \in \mathcal{D}_0$ tetszőleges volt, $y = 0$.

Az 6. tétel jelölésével $\dim L^- = 0$ és $\dim L^+ = 0$ hasonlóan látható, $A_0^* y = -\mathrm{i}\, y$-ból kell kiindulnunk. A Tétel szerint A_0 lényegében önadjungált.

Jelölje B A_0 önadjungált kiterjesztését, azaz $B = \overline{A_0}$. Be kell látnunk, hogy $U(s) = e^{\mathrm{i}\, sB}$, amit abban a formában érünk el, hogy $y(s) := U(s)z - e^{\mathrm{i}\, sB}$ azonosan 0 minden $z \in \mathcal{D}_0$-ra. $y(s)$ első tagja differenciálható

$$\frac{d}{ds}U(s)z = \mathrm{i}\, A_0 U(s)z\, .$$

$e^{\mathrm{i}\, sB}z$ differenciálhatóságához $z \in \mathcal{D}(B)$-ra és a Lebesgue-féle konvergencia tételre van szükségünk:

$$\left\| \frac{(e^{\mathrm{i}\, sA} - I)z}{\mathrm{i}\, s} - Az \right\|^2 = \int \left| \frac{e^{\mathrm{i}\, s\lambda} - 1}{\mathrm{i}\, s} - \lambda \right|^2 d\langle z, E(\,\cdot\,)z\rangle$$

az integrandus 0-hoz tart, ha $s \to 0$ és

$$\left| \frac{e^{\mathrm{i}\, s\lambda} - 1}{\mathrm{i}\, s} - \lambda \right| \le 2|\lambda|$$

biztosít integrálható majoráló függvényt, ugyanis

$$\int |\lambda|^2\, d\langle z, E(\,\cdot\,)z\rangle < +\infty$$

a spektrál tétel szerint ekvivalens $z \in \mathcal{D}(B)$-val, ami feltevésünk szerint fennáll.

$e^{\mathrm{i}\, sB}z$ differenciálható a 0-ban, és így mindenütt

$$\frac{d}{ds}e^{\mathrm{i}\, sB}z = \mathrm{i}\, Be^{\mathrm{i}\, sB}z\, .$$

Most differenciáljuk az $\|y(s)\|^2$ függvényt:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{ds}\|y(s)\|^2 &= \frac{d}{ds}\langle y(s), y(s)\rangle = \left\langle \frac{d}{ds}y(s), y(s) \right\rangle + \left\langle y(s), \frac{d}{ds}y(s) \right\rangle \\
&= 2\mathrm{Re} \left\langle \frac{d}{ds}y(s), y(s) \right\rangle \\
&= 2\mathrm{Re}\, \langle \mathrm{i}\, A_0(U(s) - e^{\mathrm{i}\, sB})z, (U(s) - e^{\mathrm{i}\, sB})z\rangle
\end{aligned}$$

ami 0, mivel A_0 szimmetrikus. Ez az $y(0) = 0$ kezdeti érték miatt azt jelenti, hogy $y(s) \equiv 0$.

Hátra van még B egyértelműségének igazolása. Induljunk ki az $U(s) = e^{\mathrm{i}\, tB}$ és $B = \int \lambda\, dE(\lambda)$ összefüggésekből. Kiszámoltuk, hogy $x \in \mathcal{D}(B)$ esetén $e^{\mathrm{i}\, tB}x$ differenciálható, ezért $\mathcal{D}(A) \supset \mathcal{D}(B)$. A fordított tartalmazáshoz legyen $x \in \mathcal{D}(A)$ és

$$f_s(t) := \frac{e^{\mathrm{i}\, st} - 1}{\mathrm{i}\, s}\, .$$

$\lim_{s\to 0} f_s(B)x := y$ létezik, ez csupán átfogalmazása a $x \in \mathcal{D}(A)$-nek. Az integrál

$$\int |f_s(\lambda)|^2\, d\langle x, E(\,\cdot\,)x\rangle(\lambda)$$

véges kis s-re, például $\leq \|y\|^2+1$, $|f_s(\lambda)|^2 \to |\lambda|^2$ amint $s \to 0$. A Fatou-lemma szerint

$$\int |\lambda|^2 \, d\langle x, E(\,\cdot\,)x\rangle(\lambda) \leq \|y\|^2 + 1\,,$$

tehát $x \in \mathcal{D}(B)$. Az $A = B$ konklúzió természetesen B egyértelműségét mutatja, na meg azt is, hogy B a generátor.

□

A Stone-tétel bizonyításából kiolvasható egy hasznos észrevétel, amit lemmaként fogalmazunk meg:

3. lemma: *Legyen $\mathcal{D}_1$ olyan sűrű halmaz az $U_s = e^{\mathrm{i}\,sA}$ erősen folytonos egyparaméteres csoport A generátorának értelmezési tartományában, amely invariáns minden U_s unitérre. Ekkor A lényegében önadjungált a $\mathcal{D}_1$ értelmezési tartományon.*

□

Alkalmazzuk ezt a T_a eltolás csoportra a $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ téren. Az $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ Schwartz-tér sűrű $L^2(\mathbb{R})$-ben és invariáns az eltolásokra. Ezért a P generátor, ami az $f \mapsto \mathrm{i}\,f'$ differenciáloperátor, lényegében önadjungált $\mathcal{S}(\mathbb{R})$-en.

16. példa: $f \in L^2(\mathbb{R})$ esetén legyen

$$(D_t f)(x) = e^{t/2} f(e^t x)\,. \qquad (t \in \mathbb{R}) \tag{2.12}$$

Ekkor egyszerű helyettesítéses integrálás mutatja, hogy a lineáris D_t operátor unitér:

$$\begin{aligned} \langle D_t f, D_t g\rangle &= \int e^{t/2}\overline{f}(e^t x) e^{t/2} g(e^t x)\, dx \\ &= \int \overline{f}(y) g(y)\, dy = \langle f, g\rangle\,. \end{aligned}$$

Könnyen ellenőrizhető, hogy $D_t D_s = D_{t+s}$, tehát D_t egyparaméteres unitér csoport. Folytonossága azt jelenti, hogy

$$\lim_{t\to 0} \langle f, D_t g\rangle = \langle f, g\rangle$$

amit elegendő abban az esetben belátni, ha f és g egy teljes rendszerből van, például legyen f és g kompakt tartójú folytonos függvény. Ilyenkor

$$\int \overline{f}(x) e^{t/2} g(e^t x)\, dx \to \int \overline{f}(x) g(x)\, dx\,,$$

hiszen az integrálás véges intervallumon történik, és alkalmas konstans függvény majorálja az $\overline{f}(x) e^{t/2} g(e^t x)$ integrandust. Megállapíthatjuk, hogy D_t folytonos egyparaméteres csoport, és célul tűzzük ki generátorának meghatározását.

D_t önmagába viszi a kompakt tartójú sima függvények halmazát, ami ezért magja az A generátornak. Legyen f és g most ilyen függvény.

$$\frac{1}{\mathrm{i}} \frac{d}{dt} \langle f, D_t g\rangle \Big|_{t=0} = \frac{1}{\mathrm{i}} \langle f, \frac{1}{2} g(x) + g'(x) x\rangle\,.$$

Tehát $(Af)(x) = -\frac{\mathrm{i}}{2} g(x) - \mathrm{i}\, g'(x) x$ a generátor. Mint ilyen szimmetrikus, és a kompakt tartójú sima függvények invarianciája miatt lényegében önadjungált.

Érdemes megjegyezni, hogy a 6. példa Q és a 9. példa P differenciáloperátorral kifejezve

$$Af = \frac{1}{2}(PQ + QP) f\,. \tag{2.13}$$

□

Az $f \in \mathcal{H}$ vektort a $\mathcal{H}$-n értelmezett A lineáris operátor *analitikus vektorának* nevezzük, ha $f \in \mathcal{D}(A^n)$ minden $n \in \mathbb{N}$-re és létezik olyan $t > 0$ szám, amelyre

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\|A^n f\|}{n!} t^n < +\infty \,. \tag{2.14}$$

Az elnevezés indoklásául a következő példa szolgálhat.

17. példa: Ha f analitikus vektora az A operátornak, akkor

$$F_A : z \mapsto \exp(zA) f = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n f}{n!} z^n$$

vektor értékű analitikus függvény a $|z| < t$ körön, mert az őt megadó hatványsor a feltevés szerint abszolút konvergens. Ha A önadjungált, akkor az F_A vektorértékű függvényt analitikusan tovább terjeszthetjük a $S_t = \{z \in \mathbb{C} : -t < \operatorname{Re} z < t\}$ végtelen sávra. Ugyanis $z \in S_t$ esetén van olyan $s \in \mathbb{R}$ szám, hogy

$$z = z_0 + \mathrm{i}\, s \quad \text{és} \quad |z_0| < t \,.$$

Ekkor

$$F_A(z) = e^{\mathrm{i}\, sA} F_A(z_0)$$

analitikus függvényt ad meg z egy környezetében (s-et állandóan tartva). $e^{\mathrm{i}\, sA}$ egy unitér operátor.

□

Az önadjungált operátorok analitikus vektorai sűrű halmazt alkotnak. Ezt analitikus vektorok megadásával mutatjuk meg.

Legyen A egy önadjungált operátor, $[a, b] \subset \mathbb{R}$, és E az $[a, b]$ intervallumhoz tartozó spektrális projekció. Ha f olyan vektor, amelyre $Ef = f$ és $c > |a|, |b|$, akkor

$$\|A^n f\| \le c^n \|f\|$$

és

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\|A^n f\|}{n!} t^n \le \|f\| \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^n t^n}{n!} = \|f\| e^{ct} \,.$$

f tehát analitikus vektor, a definícióban szereplő t helyébe bármilyen pozitív számot választhatunk. Az is következik, hogy egy önadjungált operátor analitikus vektorai sűrű halmazt alkotnak, hiszen a véges intervallumokhoz tartozó spektrális alterek egyesítése sűrű a Hilbert-térben.

10. tétel: (Nelson-tétel). *Legyen A egy szimmetrikus operátor a $\mathcal{D}(A)$ értelmezési tartományon. Ha $\mathcal{D}(A)$ tartalmaz analitikus vektorokból álló teljes rendszert, akkor A lényegében önadjungált.*

18. példa: Tekintsük az 1. fejezet 36. példájának T operátorát. T az $\ell^2(\mathbb{Z}^+)$ téren hat, $T\delta_i = b_{i+1}\delta_{i+1}$. A $b_i \in \mathbb{R}^+$ számokról tételezzük fel, hogy növő sorozatot alkotnak. Az adjungált definíciójából $T^*\delta_i = b_i\delta_{i-1}$. Ha A a T és T^* operátorokból képezett k tényezős szorzat, akkor A a δ_i bázisvektort egy másik bázisvektor számszorosába viszi. Például $(T^*TT)\delta_i = T^*Tb_{i+1}\delta_{i+1} = T^*b_{i+2}b_{i+1}\delta_{i+2} = b_{i+2}b_{i+2}b_{i+1}\delta_{i+1}$. Mivel b_i növő sorozat

$$\|A\delta_i\| \le \prod_{j=1}^{k} b_{i+j} \,.$$

Ha ezt az egyenlőtlenséget alkalmazzuk $(T+T^*)^k$ kifejtésének minden tagjára, akkor

$$\|(T+T^*)^k \delta_i\| \leq 2^k \prod_{j<1}^{k} b_{i+j} .$$

δ_i biztosan analitikus vektora lesz a $T+T^*$ operátornak, ha

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{2^k \prod_{j=1}^{k} b_{i+j}}{k!} t^k$$

véges. Tételezzük fel, hogy $b_i \leq i$. Ekkor

$$\sum_{k=1}^{\infty} \prod_{j=1}^{k} \left(\frac{b_{i+j}}{j}\right) (2t)^k \leq \sum_{k=1}^{\infty} 2^k (2t)^k = \sum_{k=1}^{\infty} (4t)^k ,$$

ami konvergens $0 < t < 1/4$ esetén. Megállapíthatjuk, hogy az (1.38) mátrixszal adott operátornak így minden kanonikus bázisvektor analitikus vektora lesz. Nelson tétele értelmében az operátor lényegében önadjungált.

□

2.7 Gyakorló feladatok

1. Legyen T egy sűrűn értelmezett zárt operátor. Igazolja, hogy $\lambda \in \sigma(T)$ akkor és csak akkor, ha $\overline{\lambda} \in \sigma(T^*)$!
2. Igazolja, hogy UT zárt operátor, ha U unitér és T zárt!
3. Legyen U egy unitér és T egy lezárható operátor. Igazolja, hogy UTU^* lezárható!
4. Legyen A olyan önadjungált operátor, amelynek spektruma $\mathbb{R}^+$-ban van. Milyen kapcsolat van A, A^2 és $A^{1/2}$ értelmezési tartománya között?
5. Legyen $\mathcal{D}(A) = \{f \in C^2[0,1] : f(1) = e^{i\theta} f(0)\}$, ahol $\theta \in \mathbb{R}$ egy rögzített szám. Igazolja, hogy az $Af = \mathrm{i}\, f'$ operátor lényegében önadjungált!
6. Legyen $\mathcal{D}(A) = \{f \in C^2(\mathbb{R}^+) : f' \in L^2(\mathbb{R}^+)\}$. Igazolja, hogy az $Af = \mathrm{i}\, f'$ operátor szimmetrikus és nincs önadjungált kiterjesztése!
7. A két dimenziós anharmonikus oszcillátor Schrödinger-operátora

   $$(H_2 f)(x,y) = -\Big(\frac{\partial^2 x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 y}{\partial y^2}\Big) f(x,y) + \omega_1^2 x^2 f(x,y)) + \omega_2^2 x^2 f(x,y))$$

   alakú. Értelmezési tartománynak a $C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$-teret választjuk. Igazolja, hogy H_2 lényegében önadjungált! (Útmutatás: Vezesse vissza a problémát az egy dimenziós esetre!)
8. Igazolja, hogy ha A pozitív önadjungált operátor, akkor $\bigcap_{n=1}^{\infty} \mathcal{D}(A^n)$ sűrű altér!
9. Igazolja, hogy minden szimmetrikus operátor lezárható!
10. Adjon elemi bizonyítást a Stone-tételre, ha a Hilbert-tér egy dimenziós!
11. Legyen $U(t)$ erősen folytonos egyparaméteres unitér csoport a $\mathcal{H}$ Hilbert-téren. Keressünk olyan $f \in \mathcal{H}$ vektorokat, amelyekre a $t \mapsto U(t)f$ vektorértékű függvénynek van analitikus kiterjesztése a teljes komplex síkra! (Útmutatás: Induljunk ki az infinitezimális generátor spektrális előállításából!)

Harmadik fejezet

3. A kvantummechanika axiómái

A kvantummechanika ma is általánosan elfogadott axiómáit a század 20-as éveiben Neumann János fogalmazta meg. Az axiómák szerepe nem olyan, mint a matematikában általában, hanem annál "puhább". Kiindulópontként szolgálnak, de bonyolultabb modellekben csak korlátozottan érvényesülnek.

3.1 Állapotok és dinamikai változók

Az *állapot* a rendszeren végrehajtott manipulációk eredménye, a manipulációk folyamatát az állapot preparálásának mondjuk. Két állapot azonos, ha preparálásuk lényeges körülményei megegyeznek. Ha a mérőkészülék kölcsönhatásba kerül a rendszerrel, és egy számot leolvasunk a készülék skáláján, akkor egy *dinamikai változót* mérünk. Dinamikai változó helyett az obszervábilis vagy mérhető fizikai mennyiség kifejezéseket is használják. Utóbbi félrevezető lehet, mert például a hőmérséklet nem mérhető mennyiség, azaz nem dinamikai változó ebben az értelemben. Ugyanakkor dinamikai változók a részecske helye, sebessége, spinje, energiája stb. Egy dinamikai változót többféleképpen is lehet mérni, a változók és a mérések közötti kapcsolat nem kölcsönösen egyértelmű.

A tradicionális kvantummechanika első posztulátuma a következő:

(A1): Minden kvantummechanikai rendszerhez tartozik egy komplex szeparábilis Hilbert-tér, a rendszer állapotai a Hilbert-tér sugarainak feleltethetők meg.

Sugár alatt egydimenziós alteret értünk, ami egy vektorral adható meg. A vektor hossza nem lényeges, de általában egységvektorral dolgozunk, amit *állapotvektornak* is neveznek. Két konstans szorzóban különböző állapotvektor, ugyanazt a sugarat határozza meg. A konstans szorzót *fázisnak* is szokták nevezni. Állapotvektorral csak az ún. *tiszta állapotok* adhatók meg, az állapot fogalmát hamarosan kiterjesszük. Egy (legegyszerűbb) dinamikai változóhoz tartozik állapotoknak egy $\{\phi_i\}$ halmaza. Ezek a változó *sajátállapotai.* Amikor a ϕ állapotban lévő rendszeren mérést hajtunk végre, akkor az a mérendő obszervábilis valamely sajátállapotába ugrik. Ez a változás sztochasztikus, a ϕ állapotból a ϕ_i állapotba ugrásnak csak egy $P(\phi, \phi_i)$ valószínűségéről beszélhetünk. Ha a kezdeti preparált állapot történetesen sajátállapot, akkor ugrás nem következik be, azaz

$$P(\phi_i, \phi_j) = 0 \quad \text{ha} \quad i \neq j \, .$$

A kvantummechanika szerint

$$P(\phi, \psi) = |\langle \phi | \psi \rangle|^2 \, .$$

Amennyiben $\{\phi_i\}$ egy ortonormált bázis, akkor

$$\sum_i P(\phi, \phi_i) = \sum |\langle \phi |, \phi_i \rangle|^2 = 1$$

a valószínűségi értelmezéssel összhangban.

1. példa: A kétdimenziós $\mathbb{C}^2$ Hilbert-tér egy elektron spinjének leírására használható a Pauli-mátrixok segítségével:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Ezek unitér ekvivalens mátrixok, tehát sajátértékeik ugyanazok. σ_3 diagonális, így sajátértékei ± 1. Az i irányú spin operátora $S_i := \frac{1}{2}\hbar\sigma_i$. Sajátértékei $\pm 1/2$, ha $\hbar = 1$ egységeket választunk. $\pm 1/2$ lehet az i-irányú spinnek a két lehetséges mért értéke. S_i spektrális előállítása

$$S_i = \frac{1}{2}E_i^{(+)} - \frac{1}{2}E_i^{(-)},$$

ahol $E_i^{\pm} := \frac{1}{2}(I \pm \sigma_i)$. (Számolással ellenőrizhetjük, hogy $E_i^{\pm}$ egy projekció, azaz $(E_i^{\pm})^2 = (E_i^{\pm})^+ = E_i^{\pm}$.) Szokásos jelölések:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ezek a vektorok S_3 sajátállapot-vektorai. Ha a spin állapotvektora ϕ, akkor a 3. irányú spint mérve

$$\langle \phi, E_3^+ \phi\rangle = |\langle \phi | \uparrow\rangle|^2$$

valószínűséggel kapunk $+\frac{1}{2}$ értéket. Az i irányú spin mérésének átlagértéke

$$\langle S_i\rangle_\phi := \frac{1}{2}\langle \phi, E_i^+ \phi\rangle - \frac{1}{2}\langle \phi, E_i^- \phi\rangle = \langle \phi, S_i \phi\rangle .$$

Az előbbi példa már tartalmazta a további posztulátumok csíráját.

(A2): Minden dinamikai változó egy önadjungált operátorral adható meg. A dinamikai változót mérve a lehetséges értékek az önadjungált operátor spektrumának pontjai.

Ha $A = \sum_i c_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ egy dinamikai változó, akkor ϕ_i a Hilbert tér ortonormált bázisa, és a c_i számok a mérés lehetséges kimenetelei. Az általános esetben az A önadjungált operátor spektrális előállítása

$$A = \int \lambda \, dE_\lambda ,$$

ahol E az ún. spektrálmérték, egy projekció értékű mérték, $\mathbb{R}$ részhalmazain. E tartója A spektruma, a $\Delta \subset \mathbb{R}$ halmazhoz tartozó spektrális projekcióra az $E_A(\Delta)$ jelölést használjuk.

3.2 Sztochasztikus megközelítés

(A3): Annak a valószínűsége, hogy a ϕ állapotban az A obszervábilist megmérve a mért érték a $\Delta \subset \mathbb{R}$ halmazba esik

$$\int_\Delta 1 \, d\langle \phi, E_\lambda \phi\rangle = \langle \phi, E_\Delta \phi\rangle$$

2. példa: A számegyenesen mozgó spin nélküli részecske Hilbert tere $L^2(\mathbb{R})$. Ebben az esetben az állapotvektorok függvények, és szokásosan hullámfüggvénynek nevezik őket. A részecske helyének operátora a változóval való szorzás:

$$(Qf)(x) = xf(x), \quad D(Q) = \{f \in L^2(\mathbb{R}) : xf(x) \in L^2(\mathbb{R})\}.$$

Q egy szorzás operátor, így spektrális projekciói is azok:

$$(E_Q(\Delta)f)(x) = (\chi_\Delta f)(x), \tag{3.1}$$

ahol χ_Δ a $\Delta \subset \mathbb{R}$ halmaz karakterisztikus függvénye. Annak a valószínűsége, hogy a részecske a Δ intervallumban van

$$\langle \phi, E_Q(\Delta)\phi \rangle = \int_\Delta |\phi(x)|^2 \, dx \, .$$

Ez volt talán az a formula, amiből az 1920-as évek elején a kvantummechanikai formalizmus sztochasztikus interpretációja kifejlődött.

A következő példa egyike a kvantummechanika sztochasztikus interpretációja kapcsán felmerülő paradoxonoknak, neve három spin paradoxon.

3. példa: Tekintsünk egy olyan rendszert, aminek Hilbert tere $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \times \mathbb{C}^2$, és építsünk fel dinamikai változókat a Pauli mátrixokból:

$$\begin{array}{ll} A_1 := \sigma_1 \otimes \sigma_2 \otimes \sigma_2 \, , & B_1 := I \otimes \sigma_2 \otimes \sigma_2 \\ A_2 := \sigma_2 \otimes \sigma_1 \otimes \sigma_2 & B_2 := \sigma_2 \otimes I \otimes \sigma_2 \\ A_3 := \sigma_2 \otimes \sigma_2 \otimes \sigma_1 & B_3 := \sigma_2 \otimes \sigma_2 \otimes I \end{array}$$

Ekkor A_i, B_i önadjungált mátrixok. A_i-k egymás között páronként felcserélhetők, mert $\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1$ és B_i-k egymás között páronként felcserélhetők, mert $\sigma_2^2 = I$. Ugyanezért $B_1B_2B_3 = I$. A_i-k és B_i-k spektruma egyaránt $\{\pm 1\}$.

A képzeletbeli (de fizikailag azért realizálható és mérhető) rendszert a

$$\phi := \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle)$$

állapotban tekintjük. Egyszerű számolással jön ki, hogy $\langle \phi, A_i\phi \rangle = 1$, $i = 1, 2, 3$. A_i-t valószínűségi változónak tekintve egy olyan véletlen mennyiség, ami ± 1 értékeket vesz fel és várható értéke 1. Ez azt jelenti, hogy -1 értéket nem is vesz fel pozitív valószínűséggel. Ugyancsak számolással győződünk meg arról, hogy $C := -A_1A_2A_3$ várható értéke -1.

Most jön az ellentmondáshoz vezető okoskodás.

Mivel

$$A_i = \sigma_1^{(i)} B_i \quad (\sigma_1^{(1)} = \sigma_1 \otimes I \otimes I \, , \; \sigma_2^{(2)} = I \otimes \sigma_2 \otimes I \, , \; \sigma_1^{(3)} = I \otimes I \otimes \sigma_1) \, ,$$

mind a három változó ± 1 értéket vesz fel, és A_i mindig 1, ezért $\sigma_i^{(i)}$ és B_i mindig ugyanazt a ± 1 értéket kell hogy adja. Ezért $\sigma_1^{(1)} \cdot \sigma_1^{(2)} \sigma_1^{(3)}$ és $B_1B_2 \cdot B_3$ várható értéke azonos kell, hogy legyen. Előbbi éppen C definíció szerint, és tudjuk, hogy -1 várható értékű. Utóbbi viszont az identitás, ami természetesen 1 várható értékkel bír. Mi az ellentmondás oka? Az, hogy az A_i, B_i és $\sigma_1^{(1)}$ dinamikai változókra a ϕ állapotban a Kolmogorov-féle valószínűségi modellt használtuk, és abban gondolkodtunk.

A paradoxon azért ügyes, mert minden egyes lépésben csak felcserélhető operátorok fordulnak elő, ezért egy-egy lépés erejéig a kolmogorovi modell használható lenne. Nevezetesen, $A_i, \sigma_1^{(i)}$ és B_i egy rögzített i-re felcserélhető operátorok, de A_1 és B_2 már nem.

3.3 A mérés

Az következő posztulátum a mérésről szól.

(A4): Ha az $A = \int \lambda\, dE_\lambda$ spektrális felbontású dinamikai változóval kapcsolatban azt a mérst hajtjuk végre, amelynek célja eldönteni, hogy a ϕ állapotban A értéke a $\Delta \subset \mathbb{R}$ intervallumba esik-e, akkor a mérés után a rendszer állapotvektora

$$\frac{E_A(\Delta)\phi}{\|E_A(\Delta)\phi\|}\,.$$

(Feltételezhetjük, hogy a nevező nem 0, ugyanis $\|E_A(\Delta)\phi\|^2$ éppen annak a valószínűsége, hogy A mért értéke a Δ intervallumba esik.)

Az (A1)–(A4) posztulátumok szerepét nem szabad túlbecsülni, de azért egy axiomatikus kiindulópontot adnak, még akkor is, ha kiterjesztésükre gyakran szükség van. Például a körpályán mozgó részecske helyzetét nem igazán jól lehetne megadni önadjungált operátorral, aminek a spektruma $\mathbb{R}$ része, sokkal természetesebb egy unitér operátor használata, aminek spektruma maga $\Pi := \{z \in \mathbb{C} : |z| = 1\}$ lehet. Az állapotvektorral sem adható meg minden fizikai modellekben előforduló fizikai állapot, szükség van a tiszta állapotok mellett ***kevert állapotok*** vagy ***statisztikai operátorok*** bevezetésére.

Legyen (ϕ_i) egy ortonormált bázis, tehát ϕ_i egy állapotvektor is. A kvantummechanikai rendszer statisztikus leírása történhet azon a módon, hogy megadjuk a valószínűségét annak, hogy a rendszer a ϕ_i állapotban van, ez mondjuk p_i, és természetesen $p_i \geq 0$, $\sum p_i = 1$. Az A változó átlagértéke ϕ_i-ben $\langle \phi_i, A\phi_i\rangle$, így a statisztikusan kevert állapotban átlagértéke

$$\sum p_i \langle \phi_i, A\phi_i\rangle = \mathrm{Tr}\, AD\,,$$

ahol $D = \sum p_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ a statisztikus operátor. A ϕ tiszta állapot statisztikus operátora $|\phi\rangle\langle\phi|$, ez a ϕ által generált lineáris altérre vetítő ortogonális projekció. A $\sum p_i|\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ alakú operátorokat tehát statisztikus operátornak nevezzük. Absztrakt módon D statisztikus operátor, ha $D \geq 0$ és $\mathrm{Tr}\, D = 1$.

4. példa: A 2×2-es önadjungált 1 nyomú mátrixok általános alakja

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+z & x - \mathrm{i}\,y \\ x + \mathrm{i}\,y & 1+z \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(I + x\sigma_1 + y\sigma_2 + z\sigma_3)\,. \tag{3.2}$$

Ez a mátrix pontosan akkor ad egy statisztikus operátort, ha $x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$. Azok az $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ pontok adnak tiszta állapotot, amelyekre $x^2 + y^2 + z^2 = 1$. (Ilyenkor a mátrix rangja 1 mert determinánsa 0.)

A statisztikus operátor bevezetésével módosítani kell az axiómákat.

(A1)' Minden kvantummechanikai rendszerhez tartozik egy Hilbert-tér, a rendszer állapotait e Hilbert-tér statisztikus operátorai írják le.

(A3)' Annak a valószínűsége, hogy a D statisztikus operátorral leírt állapotban az A dinamikai változót megmérve a mérés eredménye a $\Delta \subset \mathbb{R}$ halmazba esik

$$\mathrm{Tr}\, E_A(\Delta)D\,,$$

ahol $E_A(\Delta)$ A spektrális projekciója.

(A4)' A mérés végrehajtása után a rendszer statisztikus operátora

$$\frac{E_A(\Delta)DE_A(\Delta)}{\mathrm{Tr}\, E_A(\Delta)D}$$

lesz, ha a mérés eredménye a $\Delta \subset$ halmazba esik.

Az A és B dinamikai változókat *kompatibilisnak* mondjuk, ha a rendszer bármely állapotában először A-t megmérve majd B-t megmérve ugyanarra az eredményre jutunk, mint ha a két mérést a fordított sorrendben hajtjuk végre. Ha $\Delta_1, \Delta_2 \subset \mathbb{R}$ tetszőleges és $E_1 = E_A(\Delta_1)$, $E_2 = E_B(\Delta_2)$, akkor a kompatibilitás a

$$\frac{E_2 E_1 D E_1 E_2}{\mathrm{Tr}\, E_2 E_1 D E_1 D_2} = \frac{E_1 E_2 D E_2 E_1}{\mathrm{Tr}\, E_1 E_2 D E_2 E_1}$$

teljesülését jelenti bármilyen statisztikus operátorra.

1. tétel: *Ha A és B olyan dinamikai változók, hogy spektrális projekcióik felcserélhetők, akkor A és B kompatibilis.*

A kompatibilitás fogalmát kiterjeszthetjük akárhány változó esetére is.

5. példa: (a spinnel rendelkező részecske) $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, M_{2s+1}(\mathbb{C})) = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes M_{2s+1}(\mathbb{C})$. Legyen $(\chi_m)_{m=-s}^{s}$ egy ortonormált bázis $\mathbb{C}^{2s+1}$-ben, ennek segítségével difiniáljuk az S_1, S_2, S_3 spinoperátorokat.

$$(S_1 \pm \mathrm{i}\, S_2)\chi_m = \sqrt{(s \mp m)(s \pm m + 1)}\chi_{m\pm 1}\,, \quad S_3\chi_m = m\chi_m$$

s lehetséges értékei $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$. Például $s = \frac{1}{2}$ esetén $m = \pm\frac{1}{2}$

$$S_1 + \mathrm{i}\, S_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_3 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

és a jól ismert Pauli mátrixokhoz jutunk. Ha $s = 1$, akkor $m = -1, 0, +1$, és

$$S_1 + \mathrm{i}\, S_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad S_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Valamennyi spin operátor spektruma $\{-s, -s+1, \ldots, s\}$.

Kiszámolható, hogy

$$S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 = s(s+1)I$$

Igy a teljes spin egy olyan fizikai mennyiség, amit bármilyen állapotban mérve az $s(s+1)$ értéket kapjuk. (Ez indokolja, hogy beszélhetünk s spinű részecskéről.) Az S_1, S_2, S_3 spin operátorok nem kompatibilisak, de S_i kompatibilis bármelyik irányú helykoordináta operátorával, hiszen

$$I \otimes S_i\,, \quad Q_j \otimes I$$

felcserélhető operátorok. Szintén kompatibilis az x irányú helykoordináta és az y irányú sebesség, mint dinamikai változók.

3.4 Szuperszelekció

Az (A1) axióma azt mondta, hogy minden állapothoz tartozik egy állapotvektor a Hilbert-térben, ennek megfordításáról azonban nem beszélt. A proton és a neutron egy részecske (nukleon) két állapotának tekinthető, a megfelelő Hilbert-tér $\mathbb{C}^2$. Ha egységnyinek vesszük a proton töltését, akkor $Q = \frac{1}{2}(\sigma_3 + I)$ a töltés operátora, sajátértékei 0 és 1: $Q\psi_p = \psi_p$, $Q\psi_n = 0$. A tapasztalat szerint nemtriviális szuperpozíciója a proton és a neutron állapotnak nem létezik, nincs olyan állapotvektor, hogy $\lambda\psi_p + \mu\psi_n$ $(\lambda \cdot \mu \neq 0)$. Bizonyos vektorok tehát nem lehetnek állapotvektorok, és bizonyos önadjungált operátorok nem lehetnek dinamikai változók.

Legyen F azoknak a vektoroknak az összessége, amelyekhez tartozik fizikai állapot. Az (A4) posztulátum szerint $E_A(\Delta)F \subset F$ bármilyen A dinamikai változóra és $\Delta \subset \mathbb{R}$-re. Az a $\mathcal{H}_F$ zárt altér, amelyet F generál invariáns minden $E_A(\Delta)$ projekcióra. Ezért $\mathcal{H}_F$ bármelyik obszervábilisnak invariáns altere.

$M \subset F$ koherens, ha nem bomlik két merőleges részre. Egy maximális koherens halmaz által kifeszített alteret koherens altérnek nevezünk.

2. tétel: *Az állapot Hilbert-tér páronként ortogonális koherens alterek összege, a dinamikai változók a koherens altereket invariánsan hagyják.*

Szuperszelekciós szabálynak hívják azt a megszorítást, ami korlátozza azt, hogy bizonyos vektorai az állapot Hilbert-térnek állapotvektorok legyenek.

3.5 A projekciók alkotta logika

A dinamikai változók között vannak olyanok, amelyeket sajátállapotukban megmérve csak 0 vagy 1 értéket kaphatunk. Ezeket *0–1 kérdésnek* nevezzük. Egy 0–1 kérdés tehát a $P = P^* = P^2$ algebrai tulajdonságokkal jellemzett lineáris operátor a Hilbert-téren.

Ha egy P lineáris operátorra $P = P^2$ teljesül, akkor az képterének vektorait helyben hagyja, így a teljes teret a képterére vetíti, P egy projekció. A $P = P^*$ feltétel maga után vonja, hogy P képtere és magtere egymásra merőlegesek. Igy a $P = P^2 = P^*$ az ortogonális projekciókat jellemzi, amik kölcsönösen egyértelmű megfeleltetésben vannak a szóbanforgó Hilbert-tér zárt altereivel. A továbbiakban projekción mindig ortogonális projekciót értünk.

A projekciókon, mint dinamikai változókon, értelmezhetünk egy parciális rendezést a mérések szempontjából. $P_1 \leq P_2$, ha minden olyan állapotban, ahol P_1 a határozott 1 értéket veszi fel, ott P_2 is egy értéket vesz fel. Másként $\langle \phi, P_1\phi \rangle = 1$ esetén $\langle \phi, P_2\phi \rangle = 1$. Ez a parciális rendezés több ekvivalens módon is megadható:

(i) $P_1 \leq P_2$ akkor és csak akkor, ha $P_2 - P_1$ pozitív szemidefinit, azaz $\langle \phi, (P_2 - P_1)\phi \rangle \geq 0$ minden ϕ állapotvektorra.

(ii) $P_1 \leq P_2$ akkor és csak akkor, ha P_1 képtere benne van P_2 képterében.

(iii) $P_1 \leq P_2$ akkor és csak akkor, ha $P_1 P_2 = P_1$.

A harmadik feltétel érdekessége, hogy algebrai jellegű, és nem hivatkozik a Hilbert-térre. Egy Hilbert-tér összes projekciói az imént értelmezett parciális rendezéssel olyan halmazt alkotnak, amelynek van legnagyobb és legkisebb eleme, nevezetesen az identitás és a 0 operátor. Ez a halmaz egy teljes háló is, ami azt jelenti, hogy bármilyen véges vagy végtelen részhalmazának van legkisebb felső és legnagyobb alsó korlátja. A $\{P_i : \mathrm{i} \in I\}$ projekciók legkisebb felső korlátjára a $\vee\{P_i : \mathrm{i} \in I\}$, a legnagyobb alsó korlátra a $\wedge\{P_i : \mathrm{i} \in I\}$ jelölést használjuk. $\wedge\{P_i : \mathrm{i} \in I\}$ a P_i operátorok képterének metszetére vetítő projekció, míg $\vee\{p_i : \mathrm{i} \in I\}$ a P_i-k képtere által generált zárt altérre vetít. Használjuk a $P_1 \wedge P_2$ és $P_1 \vee P_2$ jeloleseket is. Egy Hilbert-tér összes projekciói a $\leq$ rendezéssel egy Hilbert-hálót alkotnak. A Hilbert-háló egy olyan kvantummechanikai rendszer 0–1 kérdéseit tartalmazza, amelyben nincsenek szuperszelekciós szabályok, bármely vektor lehet állapotvektor.

A kvantummechanika hálóelméleti megalapozása Neumanntól és Birkhofftól származik. Kiindulópontja a 0–1 kérdések hálója. Ez lehet a fent leírt Hilbert-háló, vagy annál általánosabb, egy Hilbert-háló részhálója, abban az esetben, amikor bizonyos projekciók nem dinamikai változók.

Legyen $\mathcal{H}$ egy szeparábilis Hilbert-tér. Az $\mathcal{M} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ halmazt Neumann-algebrának mondjuk, ha $I \in \mathcal{M}$, $\mathcal{M}$ adjungálásra, összeadásra, szorzásra és lineáris kombinációra zárt, továbbá eleget tesz a következő ekvivalens feltételeknek

(i) $\mathcal{M}$ zárt $\mathcal{B}(\mathcal{H})$-ban a gyenge operátor topológiára

(ii) $\mathcal{M}$ zárt $\mathcal{B}(\mathcal{H})$-ban az erős operátor topológiára

(iii) Ha $AX = XA$ minden $A \in \mathcal{M}$-re, akkor $X \in \mathcal{M}$.

(iv) $\mathcal{M}$ zárt a norma topológiára és valamennyi önadjungált elemének spektrális projekcióit is tartalmazza.

Az (i)–(iv) feltételek ekvivalenciája több tételt foglal magába, de velük itt nem foglalkozunk. Ha $\mathcal{M} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ egy Neumann-algebra, akkor $\mathcal{M}$ projekciói egy teljes részhálót képeznek az összes projekciók hálójában. Az ilyen részhálókat Neumann-hálóknak nevezzük. Ha $P \in \mathcal{M}$ egy projekció, akkor az $I - P$ projekció is $\mathcal{M}$-ben van. $P^\perp := I - P$ egy egyváltozós művelet a Neumann-hálóban, amit ortogonális komplementumnak nevezünk. Nyilván $P \wedge P^\perp = 0$ és $P \vee P^\perp = I$. Az "és", "vagy" és "ortogonális komplementum" műveleteket kapcsolja össze a következő tulajdonság:

$$\text{Ha } P \leq Q, \text{ akkor } Q = P \vee (P^\perp \wedge Q)\,.$$

Ennek neve: ortomodularitás. Azt szokták mondani, hogy a Neumann-hálók ortokomplementáris ortomoduláris hálók. Egy olyan struktúrában, ahol a $\vee$ művelet disztributív az $\wedge$-re nézve

$$A \vee (A^\perp \wedge B) = (A \vee A^\perp) \vee (A \vee B)\,,$$

ha $A \vee A^\perp = I$ és $I \vee C = C$, akkor ez $A \vee B$-t ad. Az ortomoduláris tulajdonság tehát egyfajta korlátozott disztributivitást jelent. A kvantummechanikai eseménytér egy nem disztributív háló. Ha $P \leq Q$, akkor a P és Q projekciók által generált részháló disztributív. Utóbbi akkor is teljesül, ha P és Q felcserélhetők, azaz kompatibilisak.

A hálóelméleti megközelítésben a kvantummechanika és a klasszikus mechanika közötti alapvető különbség abban van, hogy az események hálója a kvantummechanikában nem disztributív, míg a klasszikus esetben az.

A valószínűségelmélet Kolmogorov-féle felépítése egy $(\Omega, \mathcal{B}, P)$ valószínűségi mezővel indul, amiben Ω egy halmaz, $\mathcal{B}$ és Ω részhalmazainak σ-algebrája és P az ún. valószínűségi mérték $\mathcal{B}$-n:

(i) $P : \mathcal{B} \to [0,1]$

(ii) $P(\Omega) = 1$, $P(\emptyset) = 0$

(iii) $P(\bigcup_{i=1}^\infty A_i) = \sum_{i=1}^\infty (A_i)$, ha $A_i \cap A_j = \emptyset$ $(i \neq j)$

$\mathcal{B}$ elemei az események, és $P(A)$ az A esemény bekövetkezésének a valószínűsége. A $\mathcal{B}$ eseménytér egy disztributív háló. Valószínűségi mérték általánosabb hálókon is értelmezhető.

Legyen $\mathcal{M} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ egy Neumann-algebra és $\mathcal{P}(\mathcal{M})$ $\mathcal{M}$ projekcióinak hálója. A $P : \mathcal{P}(\mathcal{M}) \to [0,1]$ hozzárendelést valószínűségi mértéknek nevezzük, ha

(i) $P(0) = 0$, $P(I) = 1$

(ii) $P(\bigvee_{i=1}^{\infty} Q_i) = \sum_{i=1}^{\infty} P(Q_i)$ ha $Q_i Q_j = 0$ $(i \neq j)$.

Amennyiben $\varphi \in \mathcal{H}$ egy állapotvektor, akkor a $P(Q) = \langle \varphi | Q | \varphi \rangle$ várható érték egy valószínűségi mértéket értelmez a projekciókon. Általánosabban, ha D egy statisztikus operátor $\mathcal{H}$-n, akkor

$$P(Q) = \mathrm{Tr}\, QD \tag{3.3}$$

egy valószínűségi mérték. Szuperszelekciós szabály hiányában a valószínűségi mértékek és az állapotok teljesen azonosíthatók.

3. tétel: *(Gleason): Legyen $\mathcal{H}$ egy szeparábilis Hilbert-tér és $\dim \mathcal{H} \geq 3$. Ekkor minden P valószínűségi mérték egyértelműen előáll az (3.3) formulával egy D statisztikus operátorból.*

A tétel 1957-ből származik és kiterjeszthető Neumann-hálókra is. Egy lehetséges megfogalmazás a következő:

4. tétel: *Legyen $\mathcal{M} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ egy Neumann-algebra a szeparábilis $\mathcal{H}$ Hilbert-téren. Tételezzük fel, hogy nincsen olyan $v \in \mathcal{M}$ operátor, hogy vv^* és $v*v$ egymásra merőleges projekciók és $vv^* + v^*v$ felcserélhető $\mathcal{M}$ bármely elemével. Ha $P : \mathcal{P}(\mathcal{M}) \to [0,1]$ egy valószínűségi mérték, akkor létezik egy $\pi : \mathcal{M} \to \mathcal{B}(\mathcal{K})$ erősen folytonos reprezentációja $\mathcal{M}$-nek egy $\mathcal{K}$ Hilbert-téren és egy $\phi \in \mathcal{K}$ állapotvektor, amelyre*

$$P(Q) = \langle \phi \,|\, \pi(Q) \phi \rangle$$

teljesül bármely $Q \in P(\mathcal{M})$-re.

A Gleason-tétel eredeti megfogalmazása és annak kiterjesztése egyaránt kizárja a túlságosan "szűk" kétdimenziós Hilbert-teret. A kétdimenziós tér altérhálója triviális: végtelen sok nem összehasonlítható egydimenziós alteret tartalmaz, továbbá a 0 és 2 dimenziós altereket. Az egyszerű háló nagyon sok patologikus valószínűségi mértéket enged meg.

A Gleason-tétel jelentősége abban áll, hogy ha ismert a 0–1 kérdések várható értéke egy állapotban, akkor bármilyen dinamikai változó várható értéke egyértelműen meg van határozva.

3.6 Összetett rendszerek

Az (A1) axióma szerint minden kvantummechanikai rendszerhez tartozik egy Hilbert-tér. Tételezzük fel, hogy egy összetett rendszer az (1) és (2) részrendszerekből épül fel, amelyek leírása a $\mathcal{H}_1$ és $\mathcal{H}_2$ Hilbert-tereken történik.

(A5) Az összetett rendszer leírására a $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ Hilbert-tér szolgál.

Összetett rendszerre már valójában láttunk példát. A spinnel rendelkező részecske olyan összetett rendszerként fogható fel, amelynek egyik komponense egy spin nélküli részecske, a másik komponens pedig egy absztrakt, részecske nélküli, spin. A 5.. Példában láttuk, hogy a releváns Hilbert-tér $L^2(\mathbb{R}^3, M_2(\mathbb{C})$, ha 1/2 spinű részecskéről van szó.

Ha az összetett rendszer statisztikus operátora D_{12} a $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ Hilbert-téren, akkor az (1) részrendszer A dinamikai változójának várható értéke

$$\mathrm{Tr}\,(A \otimes I) D_{12}$$

Az $A \mapsto \mathrm{Tr}\,(A\otimes I)D_{12}$ funkcionál a $\mathcal{H}_1$ tér egy D_1 statisztikus operátorával is megadható, egyértelműen létezik egy D_1 statisztikus operátor, amelyre

$$\mathrm{Tr}_1\, AD_1 = \mathrm{Tr}_{12}\,(A\otimes I)D_{12}\,.$$

(minden A obszervábilisre). D_1-et redukált statisztikus operátornak hívjuk. A kvantumelmélet sajátossága az a tény, hogy D_1 esetleg kevert állapot még abban az esetben is, ha D_{12} az összetett rendszer tiszta állapota.

6. példa: Legyen $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^2$ és

$$D_{12} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad A\otimes I = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}.$$

Ekkor

$$\mathrm{Tr}_4\, A\otimes D_{12} = \frac{1}{2}(A_{22}+A_{11}) = \mathrm{Tr}_2\, A(I/2)\,;$$

azaz a redukált statisztikus operátor $I/2$, ugyanakkor D_{12} tiszta állapotot ad meg.

7. példa: Legyen $D = \sum \lambda_i\,|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ egy tetszőleges statisztikus operátor a $\mathcal{H}$ Hilbert-téren, amely spektrális felbontásával van adva (azaz $|\varphi_i\rangle$ a $\mathcal{H}$-tér bázisa).

Legyen $\Phi := \sum_i \sqrt{\lambda_i}\,|\varphi_i\rangle\otimes|\varphi_i\rangle$, ami egységvektor $\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}$-ban és így megad egy tiszta állapotot. (1) részrendszer A obszervábilisának várható értéke Φ-ben éppen $\mathrm{Tr}\,AD$:

$$\begin{aligned}\langle (A\otimes I)\Phi,\Phi\rangle &= \Big\langle \sum \sqrt{\lambda_i}\,A\,|\varphi_i\rangle\otimes|\varphi_i\rangle, \sum \sqrt{\lambda_j}\,|\varphi_j\rangle\otimes|\varphi_j\rangle\Big\rangle \\ &= \sum \lambda_i\,\langle\varphi_i|\,A\,|\varphi_i\rangle = \mathrm{Tr}\,AD\,.\end{aligned}$$

A konstrukció azt adja, hogy egy rendszer tetszőleges kevert állapota előáll egy nagyobb, "kétszer akkora", rendszer tiszta állapotának redukciójaként.

3.7 Időfejlődés

A magára hagyott kvantummechanikai rendszer időfejlődését unitér operátorokkal adhatjuk meg. Ha a $I \subset \mathbb{R}$ időintervallumban nem végzünk mérést a rendszeren és $W(t)$ jelöli a t idő ponthoz tartozó statisztikus operátort, akkor

(A6) $\qquad W_t = U(t,s)W_sU(t,s)^*, \qquad (t,s\in I)$

ahol az $U(t,s)$ unitér propagátor unitér operátorok olyan családja, hogy

(i) $U(t,s)U(s,r) = U(t,r)$

(ii) $(s,t)\mapsto U(s,t)\in B(\mathcal{H})$ erősen folytonos.

Az (A6) posztulátumból mindjárt következik, hogy a tiszta állapotban levő rendszer tiszta állapotban is marad. Másrészt az időfejlődés során az átmenetvalószínűségek változatlanok. Ha ψ_t és ϕ_t egy-egy tiszta állapot időfejlődése, akkor a

$$P(\psi_t, \phi_t) = |\langle \psi_t, \phi_t \rangle|^2$$

átmenetvalószínűség t-től független.

A rendszert *konzervatívnak* mondjuk, ha propagátorára $U(t+\tau, s+\tau) = U(t,s)$ teljesül. Ekkor $U(t) := U(t+\tau, \tau)$ egy folytonos unitér csoport, és a Stone-tétel szerint létezik önadjungált generátora, A. A következő posztulátum azt mondja, hogy $-A$ a rendszer Hamilton-operátora.

(A7) A H Hamilton-operátorú konzervatív rendszer unitér propagátora $U(t) = e^{-\mathrm{i}\,Ht}$.

5. tétel: *Ha $W_s\mathcal{D}(H) \subset \mathcal{D}(H)$ valamilyen $s \in \mathbb{R}$ esetén, akkor $t \mapsto W_t\phi$ differenciálható bármilyen $\phi \in \mathcal{D}(H)$-ra és*

$$\mathrm{i}\,\frac{d}{dt}W_t\phi = [H, W_t]\phi\,. \tag{3.4}$$

Továbbá, ha $\psi_s \in \mathcal{D}(H)$ valamilyen $s \in \mathbb{R}$-re, akkor $t \in \psi_t$ differenciálható, és

$$\mathrm{i}\,\frac{d}{dt}\psi_t = H\psi_t\,. \tag{3.5}$$

Bizonyítás: Az (A6) posztulátum szerint

$$W_t\mathcal{D}(H) = U(t-s)W_sU(s-t)\mathcal{D}(H)\,,$$

ami $\mathcal{D}(H)$-ban van, hiszen az $e^{\mathrm{i}\,tH}$ unitér csoport $\mathcal{D}(H)$-t önmagába viszi.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}W_t\phi &= \lim_{\varepsilon\to 0}\left[U(\varepsilon)W_t\frac{U(-\varepsilon)-I}{-\varepsilon}\phi - \frac{U(\varepsilon)-I}{\varepsilon}W_t\phi\right] \\ &= \mathrm{i}\,W_tH\phi - \mathrm{i}\,HW_t\phi = -\mathrm{i}\,[H, W_t]\phi\,.\end{aligned}$$

A tiszta állapotra vonatkozó állítás bizonyítása hasonló.

□

(3.4)-et és (3.5)-t Schrödinger-egyenletnek nevezik, és H-t gyakran Schrödinger operátornak mondjuk. Egy $\phi_0 \in \mathcal{D}(H) \subset \mathcal{H}$ kezdeti feltétel esetén a Schrödinger-egyenlet egyértelmű megoldása $\phi_t = e^{-\mathrm{i}\,tH}\phi_0$.

8. példa: (egydimenziós harmonikus oszcillátor) A klasszikus mechanikában a harmonikus oszcillátor Hamilton-függvénye $H_0 = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{K}{2}q^2$, ami a változók átskálázásával

$$H = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2) \tag{3.6}$$

alakot ölt. A kvantummechanikában Q a koordinátaoperátor, P pedig az impulzus operátor lesz, maga H az energia vagy Schrödinger-operátor.

A Schrödinger-féle reprezentációban H egy differenciáloperátorrá válik:

$$(Hf)(x) = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}f(x) + \frac{1}{2}x^2 f(x)\,. \tag{3.7}$$

Ahhoz, hogy összhangba legyünk a posztulátumokkal be kell látni, hogy H önadjungált operátorként értelmezhető, lásd a 2. Fejezet 14.. Példáját.

□

A hidrogén atom Schrödinger-operátorát tartalmazza a 2. Fejezet 13. példája.

Ha a rendszer Hamilton-operátora időfüggő, akkor az előző tétel képleteit posztulátumnak tekintjük.

(A8) Az időtől függő Hamilton operátorú rendszer statisztikus operátorának illetve hullámfüggvényének fejlődését az

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\,\frac{d}{dt}W_t\phi &= [H(t), W_t]\phi \\ \mathrm{i}\,\frac{d}{dt}\psi_t &= H(t)\psi_t \end{aligned}$$

egyenletek adják.

Az A dinamikai változó várható értékére a t időpontban

$$\langle A\rangle_{W_t} = \mathrm{Tr}\, Ae^{-\mathrm{i}\,H(t-s)}W_s e^{\mathrm{i}\,H(t-s)}$$

képletet írhatjuk fel. Ez az ún. *Schrödinger-képet* adja, amelyben az állapotot, ill. a statisztikus operátort tekintjük időben változó mennyiségnek. Az

$$A_H(t) = e^{\mathrm{i}\,H(t-s)}Ae^{-\mathrm{i}\,H(t-s)}$$

jelöléssel

$$\langle A\rangle_{W_t} = \mathrm{Tr}\, A_H(t)W_s = \langle A_H(t)\rangle_{W_s}$$

adja a *Heisenberg-képpel* való ekvivalenciát. A Heisenberg-képben a dinamikai változók transzformálódnak időben.

3.8 Gyakorló feladatok

1. Legyen ϕ_i és ϕ_2 egy Hilbert-tér két egységvektora, és értelmezzünk a projektorokon egy P_i valószínűséget a
$$P_i(Q) = \langle\phi_i \mid Q \mid \phi_i\rangle \qquad (i = 1, 2)$$
képlettel. Mutassa meg, hogy $P_1 = P_2$ esetén ϕ_1 és ϕ_2 egy abszolút értékű komplex fázisban különböznek!

2. Mutassa meg, hogy az E és F projekciók pontosan akkor felcserélhetők, ha $EF = E \wedge F$!

3. Mutassa meg, hogy az E és F projekciók pontosan akkor felcserélhetők, ha $E \vee F = E + F - EF$.

4. Igazolja, hogy $E \wedge F = \lim_n (EF)^n$ az erős operátor topológiában, ha E és F projekciók!

5. Adjon meg $\mathbb{C}^3$-ban olyan e_1, e_2, e_3 és f_1, f_2, f_3 bázisokat, hogy az $|\langle e_i, f_j\rangle|^2$ átmenetvalószínűség i-től és j-től független legyen!

6. Legyen D egy statisztikus operátor. Mutassa meg, hogy D akkor és csak akkor ad meg tiszta állapotot, ha $\mathrm{Tr}\, D^2 = 1$!

Negyedik fejezet

4. Koordináta és impulzus

4.1 A klasszikus mechanikától a felcserélési relációig

A klasszikus mechanika különféle formalizmusai közül a Hamilton-félétől vezet a természetes út a kvantummechanikához. A Hamilton-féle leírásban az n szabadságfokú dinamikai rendszer egy állapotát n helykoordináta, $q_1, q_2, \dots, q_n$, és n impulzuskoordináta, $p_1, p_2, \dots, p_n$ adja meg. A Hamilton-függvény a $q_1, q_2, \dots, q_n$, $p_1, p_2, \dots, p_n$ változók függvénye és a mozgásegyenlet

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}\,, \quad \dot{p}_i = \frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad (1 \le i \le n)$$

alakot ölt. Például az egydimenziós *harmonikus oszcillátor* Hamilton-függvénye

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{K}{2}q^2\,. \tag{4.1}$$

Az n helykoordináta és az n impulzus az $\mathbb{R}^{2n}$ fázistér egy pontja, és a fázistérben futó trajektóriák meghatározzák a dinamikai rendszert. A harmonikus oszcillátor trajektóriái ellipszisek.

A fázistér bizonyos transzformációit kanonikusnak nevezik, ezek azok a transzformációk, amelyek a mozgásegyenletet változatlanul hagyják. Például kanonikus az a transzformáció is, amely a koordinátát felcseréli az impulzussal, és utóbbi előjelét megváltoztatja. Ezért a Hamilton-féle formalizmus szempontjából koordináta és impulzus megkülönböztetése esetleges.

A fázistéren értelmezett U és V függvények *Poisson-zárójele*

$$[U,V] = \sum_i \left(\frac{\partial U}{\partial q_i}\frac{\partial V}{\partial p_i} - \frac{\partial U}{\partial p_i}\frac{\partial V}{\partial q_i} \right)\,.$$

A Poisson-zárójel egyrészt invariáns a kanonikus transzformációkra, másrészt eleget tesz a Jacobi-azonosságnak:

$$[U,[V,W]] + [V,[W,U]] + [W,[U,V]] = 0\,.$$

A definícióból nyomban következik, hogy a koordináta függvények Poisson-zárójelei a következők:

$$[q_i, q_j] = 0\,, \quad [p_i, p_j] = 0\,, \quad [q_i, p_j] = \delta_{ij}\,.$$

A kvantummechanika a bináris Poisson-zárójel helyébe az operátorok kommutátorát teszi, így egy szabadsági fok esetén kiindulási relációja $qp - pq = I$ lenne. Mivel önadjungált operátorok kommutátora mindig antiszimmetrikus, ez a reláció

$$QP - PQ = \mathrm{i}\,I \tag{4.2}$$

alakra módosul. (4.2)-t *kanonikus felcserélési relációnak* nevezik. Történetileg első reprezentációi Heisenberghez és Schrödingerhez nyúlik vissza. Heisenberg mátrixai a következők voltak:

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \\ & & \dots & & & \end{pmatrix} \quad P = \frac{-\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \\ -1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \\ & & \dots & & & \end{pmatrix}.$$

Ezek egyszerű tridiagonális mátrixok, a (4.2) reláció könnyen ellenőrizhető. Schrödinger operátorai:

$$\begin{array}{rclrcl} (Qf)(x) &=& xf(x) & \mathcal{D}(Q) &=& \{f \in L^2(\mathbb{R}) \; : \; xf(x) \in L^2(\mathbb{R})\}\,, \\ (Pf)(x) &=& -\mathrm{i}\, f'(x) & \mathcal{D}(P) &=& \{f \in L^2(\mathbb{R}) \; : \; f' \in L^2(\mathbb{R})\}\,. \end{array}$$

A felcserélési reláció teljesül például a $C_0^\infty(\mathbb{R})$ függvényeken.

4.2 A Weyl-féle felcserélési reláció

Q és P önadjungált operátorok, mert folytonos unitér csoportok generátorai. Ha

$$(T_a f)(x) = f(x+a) \qquad (f \in L^2(\mathbb{R})\,,\ a \in \mathbb{R})\,, \tag{4.3}$$

akkor

$$T_a T_b = T_{a+b}\,,$$

és

$$\lim_{a\to 0} \frac{T_a f - f}{a} = f'$$

normában. Igy $T_a = e^{\mathrm{i}\,aP}$. Hasonlóan,

$$(U_b f)(x) = e^{\mathrm{i}\,bx} f(x) \tag{4.4}$$

egy másik unitér csoport, amelynek önadjungált generátora Q:

$$-\mathrm{i} \lim_{b\to 0} \frac{U_b f - f}{b} = Qf\,, \quad U_b = e^{\mathrm{i}\,bU_b}\,.$$

Egyszerűen ellenőrizhető a

$$T_a U_b = e^{\mathrm{i}\,ab} U_b T_a \tag{4.5}$$

felcserélési reláció, amit *Weyl-féle felcserélési relációnak* fogunk nevezni. Ennek két oldalán unitér operátorok állnak, és az egyenlőség bármilyen $f \in L^2(\mathbb{R})$ függvényre teljesül. Ha hangsúlyozni akarjuk, hogy (4.5)-ben szereplő operátorok az eltolás és szorzáscsoportok elemei, akkor a Weyl-reláció *Schrödinger-féle reprezentációjáról* beszélünk.

Ha A egy lineáris operátor $\mathcal{D}$ értelmezési tartománnyal, akkor $\mathcal{D}_0 \subset \mathcal{D}$ *magja* A-nak, ha bármilyen $f \in \mathcal{D}$-re létezik egy $(f_n) \subset \mathcal{D}_0$ sorozat, amelyre $f_n \to f$ és $Af_n \to Af$.

1. tétel: *$C_0^\infty(\mathbb{R})$ magja Q-nak.*

A Q és P operátorok unitér ekvivalensek, az ekvivalenciát a Fourier-transzformáció valósítja meg. Ha $f \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$, akkor

$$(\mathcal{F}f)(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-\mathrm{i}\,ts} f(s)\, ds \tag{4.6}$$

definíció szerint. Jól ismert, hogy $\mathcal{F}$ megőrzi az L^2 normát, így unitérré terjeszthető ki. Inverze az $(\mathcal{F}^{-1}f)(t) = (\mathcal{F}f)(-t)$ formulával adható meg.

Mivel

$$(\mathcal{F}T_a f)(n) = (U_a \mathcal{F} f)(n)$$

egyszerű számolással, megállapíthatjuk, hogy

$$\mathcal{F} T_a \mathcal{F}^{-1} = U_a \tag{4.7}$$

és a szerint differenciálva

$$\mathcal{F} P \mathcal{F}^{-1} = Q\,. \tag{4.8}$$

1. példa: Annak a valószínűsége, hogy az egy szabadságfokú $\phi \in L^2(\mathbb{R})$ hullámfüggvényű részecske impulzusa a Δ intervallumban van $\langle \phi, E_P(\Delta)\phi \rangle$ az (A3) axioma szerint. A P és Q operátorok közötti Fourier-kapcsolat és (3.1) miatt ez a valószínűség

$$\langle \phi, E_P(\Delta)\phi \rangle = \langle \phi, \mathcal{F}^* E_Q(\Delta)\mathcal{F}\phi \rangle = \int_\Delta |\mathcal{F}(\phi)(x)|^2 \, dx \, . \tag{4.9}$$

□

Az invertálható 3×3-as

$$g(a,b,c) := \begin{bmatrix} 1 & a & c \\ 0 & 1 & b \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{4.10}$$

mátrixok csoportot alkotnak a szokásos mátrixszorzásra, ez a (polarizált) *Heisenberg-Weyl-csoport*, $\mathbf{H}_1^{\mathrm{pol}}$, egy három dimenziós Lie-csoport. Ha $g(a,b,c)$-vel jelöljük a fenti mátrixot, akkor a csoport szorzásszabálya

$$g(a_1,b_1,c_1)g(a_2,b_2,c_2) = g(a_1+a_2, b_1+b_2, c_1+c_2+a_1b_2), \tag{4.11}$$

ami teljesül a

$$g(a,b,c) = U_b T_a e^{\mathrm{i}\,c} \tag{4.12}$$

választással, amennyiben U_b és T_a a Weil-relációnak eleget tevő egyparaméteres csoportok. Valóban,

$$\begin{aligned} &(U_{b_1}T_{a_1}e^{\mathrm{i}\,c_1})\,(U_{b_2}T_{a_2}e^{\mathrm{i}\,c_2}) \\ &\quad = U_{b_1}U_{b_2}T_{a_1}T_{a_2}e^{\mathrm{i}\,(c_1+c_2+a_1b_2)} \\ &\quad = U_{b_1+b_2}T_{a_1+a_2}e^{\mathrm{i}\,(c_1+c_2+a_1b_2)} \end{aligned}$$

Tehát a Weil-reláció minden reprezentációja a Heisenberg-csoport egy ábrázolásához vezet.

Legyen W a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér korlátos operátorainak egy halmaza. Azt mondjuk, hogy W irreducibilis család, ha nincs a Hilbert-térnek olyan valódi zárt altere, amelyet W minden eleme és annak adjungáltja invariánsan hagy.

2. tétel: *A Weyl-féle felcserélési reláció Schrödinger-féle reprezentációja irreducibilis, azaz a (4.3) képlettel értelmezett T_a és (4.4)-gyel adott U_b operátorok egy irreducibilis családot alkotnak az $L^2(\mathbb{R})$ Hilbert-téren.*

Bizonyítás: Legyen $0 \neq f \in L^2(\mathbb{R})$. Elég belátni, hogy ha $\langle U_bT_af, g\rangle = 0$ minden $a,b \in \mathbb{R}$-re, akkor $g = 0$. Az $\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$ Fourier transzformáció unitér operátor, tehát $0 \neq f$ alapján $\mathcal{F}(f) \neq 0$ következik, és található olyan $[-c,c]$ intervallum, amelyben pozitív mértékű halmazt alkotnak azok az x számok, amelyre $\mathcal{F}(f)(x) \neq 0$. Válasszunk egy olyan $\hat{h}$ kompakt tartójú sima függvényt, amely $[-c,c]$-n 1 értéket vesz fel, és legyen $h = \mathcal{F}^{-1}(\hat{h})$, azaz

$$h(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{\mathrm{i}\,xs}\hat{h}(s)\,ds \, .$$

Az integrál complex x értékekre is értelmes, és a h függvény analitikus kiterjesztését szolgáltatja a teljes komplex síkra. Kétszeri parciális integrálással azt kapjuk, hogy

$$h(x) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}x^2} \int e^{\mathrm{i}\,xs}(\hat{h})''(s)\,ds \, .$$

Következésképpen $|h(x)| \leq cx^{-2}$ és $h \in L^1(\mathbb{R})$.

Legyen F az f és h függvények konvolociója:

$$F(x) = \int h(x-y) f(y)\, dy\,.$$

F-nek létezik analitikus kiterjesztése, nevezetesen

$$F(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \left(\int e^{\mathrm{i}\,(z-y)s} \hat{h}(s)\, ds \right) f(y)\, dy \qquad (z \in \mathbb{C})$$

és $\mathcal{F}(F) = 2\pi\, \hat{h}\, \mathcal{F}(f)$ a Fourier-transzformáció jól ismert tulajdonságai alapján. A $z \mapsto F(z)$ függvény analitikussága miatt $F(x) \neq 0$ majdnem minden $x \in \mathbb{R}$ számra.

Most térünk vissza az $\langle U_b T_{-a} f, g\rangle = 0$ feltételezéshez. Szorozva ezt $h(a)$-val, majd a szerint integrálva, azt kapjuk, hogy

$$0 = \langle U_b F, g\rangle = \int e^{-\mathrm{i}\,bx} \overline{F(x)} g(x)\, dx$$

minden $b \in \mathbb{R}$. Az $\overline{F}g \in L^1(\mathbb{R})$ függvény Fourier-transzformáltja azonosan 0, így $\overline{F}g = 0$ majdnem mindenütt. Mivel F csak 0-mértékű halmazon lehet 0 a fentiek szerint, így $g = 0$ majdnem mindenütt.

□

A következő tétel azt mondja, hogy bizonyos feltételek mellett a Schrödinger-reprezentáció lényegében az egyetlen ábrázolása a Weyl-féle felcserélési relációnak.

3. tétel: *A Weyl-féle reláció bármely két folytonos irreducibilis reprezentációja unitér ekvivalens.*

Legyen T'_a és U'_b két folytonos egyparaméteres csoport a $\mathcal{H}'$ Hilbert-téren, és T''_a, U''_b ugyanilyen csoportok a $\mathcal{H}''$ Hilbert-téren. Ha T'_a, U'_b és T''_a, U''_b eleget tesznek a Weyl-féle relációnak és irreducibilis családok, akkor a tétel azt mondja, hogy létezik egy $W : \mathcal{H}' \to \mathcal{H}''$ unitér operátor, amelyre

$$T''_a = W\, T'_a\, W^* \qquad \text{és} \qquad U''_b = W\, U'_b\, W^*$$

minden $a, b \in \mathbb{R}$ esetén. Másszóval, ha $\mathcal{H}'$-t és $\mathcal{H}''$-t azonosítjuk a W unitér segítségével, akkor a vesszős operátorok a megfelelő kétvesszős operátorba mennek át.

2. példa: A Q és P operátorok kielégítik a Heisenberg-féle felcserélési relációt, ezért ugyanez igaz a

$$P' = P + x \cdot I\,, \qquad Q' = Q + y \cdot I$$

operátorokra bármilyen $x, y \in \mathbb{R}$ esetén. Következésképpen a megfelelő unitér csoportok

$$T'_a = e^{\mathrm{i}\,aP'} = e^{\mathrm{i}\,ax} T_a\,, \qquad U'_b = e^{\mathrm{i}\,bQ'} = e^{\mathrm{i}\,by} U_b$$

eleget tesznek a Weyl-relációnak. Az egyértelműségi tétel szerint létezni kell olyan W unitér operátornak, amelyre

$$T'_a = W T_a W^* \quad \text{és} \quad U'_b = W U_b W^*\,.$$

W természetesen függ x-től és y-tól. Verifikálható, hogy a

$$W = T_y U_{-x}$$

unitér operátor valósítja meg az unitér ekvivalenciát.

Itt egy úgynevezett *inhomogén kanonikus transzformációra* látunk példát.

□

A két valós paraméterrel megadott T_a és U_b családokról néha érdemes áttérni egy komplex paraméter használatára. Ha $z = x + \mathrm{i}\, y$, akkor legyen

$$W_z = e^{-\frac{1}{2}\mathrm{i}\, xy} T_y U_x = e^{\frac{1}{2}\mathrm{i}\, xy} U_x T_y \,,$$

amit *Weyl-operátornak* nevezünk. A T_a és U_b operátorokra vonatkozó felcserélési szabályból látható, hogy

$$W_w W_z = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2}\,\mathrm{Im}\,\overline{w} z\right) W_{w+z} \,.$$

A $t \mapsto W_{tz}$ egyparaméteres folytonos unitér csoport, amely a Schwartz-teret önmagába képezi. A Stone-tételből tudjuk, hogy ekkor a Schwartz-tér az infinitezimális generátor magja. Másrészt egyszerű számolással

$$\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial t} W_{tz} f = (xQ + yP) f \,,$$

ha $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$. Igy megállapíthatjuk, hogy az $xQ + yP$ operátor lényegében önadjungált az $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ altéren és

$$W_z = \exp(\mathrm{i}\,(xQ + yP)) \,.$$

4.3 Kanonikus transzformációk

Legyen $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{R}$ és

$$Q' = \alpha Q + \beta P \qquad P' = \gamma Q + \delta P \,.$$

a P, Q operátorok egy lineáris transzformációja, amit a vektor-mátrix írásmódban

$$\begin{bmatrix} Q' \\ P' \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} Q \\ P \end{bmatrix}, \qquad A = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix}.$$

Mivel $[Q', P'] = (\alpha\delta - \beta\gamma)[Q, P]$ egyszerű számolással, Q' és P' pontosan akkor elégítik ki a kanonikus felcserélési relációt, ha Det $A = 1$. A 2×2-es 1 determinánsú valós mátrixok egyébként egy háromdimenziós Lie-csoportot alkotnak, amely szokásos jelölése $SL(2, \mathbb{R})$. A $Q \mapsto Q'$, $P \mapsto P'$ transzformációt kanonikusnak mondjuk, ha megőrzi a felcserélési relációt. Tehát $SL(2, \mathbb{R})$ a lineáris kanonikus transzformációk csoportja. Kanonikus transzformációval már találkoztunk. Az egydimenziós harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora $p^2/2m + Kq^2/2$.

$$p \mapsto (Km)^{1/4} P \quad \text{és} \quad q \mapsto (Km)^{-1/4} Q$$

transzformáció kanonikus. (Korábban átskálázásnak neveztük, és azért hajtottuk végre, hogy P^2 és Q^2 együtthatója azonos legyen.)

Legyen

$$\begin{aligned} {}^A U_b &= U_{b\alpha} T_{b\beta}\, e^{\mathrm{i}\, b^2 \alpha\beta/2}, \\ {}^A T_a &= U_{a\gamma} T_{a\delta}\, e^{\mathrm{i}\, a^2 \gamma\delta/2}. \end{aligned}$$

Ekkor

$$\begin{aligned} {}^A U_{b_1}\, {}^A U_{b_2} &= U_{b_1\alpha} T_{b_1\beta}\, e^{\mathrm{i}\, b_1^2 \alpha\beta/2}\, U_{b_2\alpha} T_{b_2\beta}\, e^{\mathrm{i}\, b_2^2 \alpha\beta/2}, \\ &= U_{b_1\alpha} U_{b_2\alpha} T_{b_1\beta} T_{b_2\beta}\, e^{\mathrm{i}\, b_1 b_2 \alpha\beta}\, e^{\mathrm{i}\,(b_1^2 + b_2^2)\alpha\beta/2} \\ &= U_{(b_1+b_2)\alpha} T_{(b_1+b_2)\beta}\, e^{\mathrm{i}\,(b_1+b_2)^2 \alpha\beta/2} \end{aligned}$$

és megállapíthatjuk, hogy ${}^A U_b$ egy unitér csoport. Hasonló számolás mutatja, hogy ${}^A T_a$ is az, továbbá

$$ {}^A T_a \, {}^A U_b = e^{\mathrm{i}\, ab} \, {}^A U_b \, {}^A T_a \, . $$

Igy a Weyl-reláció reprezentációjához jutottunk. A $b \mapsto {}^A U_b$ csoport generátorát differenciálással határozzuk meg:

$$ \begin{aligned} \frac{1}{\mathrm{i}} \frac{d}{db} {}^A U_b \Big|_{b=0} &= \frac{1}{\mathrm{i}} \frac{d}{db} U_{b\alpha} \Big|_{b=0} + \frac{1}{\mathrm{i}} \frac{d}{db} T_{b\beta} \Big|_{b=0} \\ &= \alpha Q + \beta P \end{aligned} $$

Hasonlóan,

$$ \frac{1}{\mathrm{i}} \frac{d}{da} {}^A T_a \Big|_{a=0} = \gamma Q + \delta P \, . $$

Ezért

$$ \begin{aligned} {}^A U_b &= e^{\mathrm{i}\, bP'} = e^{\mathrm{i}\, b(\alpha Q + \beta P)} \\ {}^A T_a &= e^{\mathrm{i}\, aQ'} = e^{\mathrm{i}\, a(\gamma Q + \delta P)} \end{aligned} $$

Érdemes megjegyezni, hogy mellékesen az is kiolvasható, hogy

$$ e^{\mathrm{i}\,(tQ+sP)} = e^{\mathrm{i}\, tQ} \, e^{\mathrm{i}\, sP} \, e^{\mathrm{i}\, ts/2} \tag{4.13} $$

Az ${}^A T_a$, ${}^A U_b$ és T_a, U_b operátorok közötti egyszerű algebrai kapcsolatból világos, hogy $L^2(\mathbb{R})$ egy altere pontosan akkor invariáns az ${}^A T_a$ és ${}^A U_b$ operátorokra, ha invariáns a T_a és U_b operátorokra. Mivel a Schrödinger-reprezentáció irreducibilis, az ${}^A T_a$ és ${}^A U_b$ unitér csoportok is irreducibilis ábrázolását adják a Weyl-relációnak. Az egyértelműségi tétel miatt léteznie kell egy W_A unitér operátornak az

$$ {}^A T_a = W_A \, T_a \, W_A^* \, , \quad {}^A U_b = W_A \, U_b \, W_A^* $$

tulajdonságokkal. Tetszőleges $A \in SL(2, \mathbb{R})$ esetén W_A-t nehéz megadni, de bizonyos esetekben W_A kiszámítható.

3. példa: Ha $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ t & 1 \end{bmatrix}$, akkor $W_A = e^{-\mathrm{i}\, tQ^2}$.

□

Először azt mutatjuk meg, hogy

$$ e^{-\mathrm{i}\, tQ^2/2} T_a = {}^A T_a e^{-\mathrm{i}\, tQ^2/2}. \tag{4.14} $$

Tetszőleges $t \in \mathbb{R}$-re és $f \in L^2(\mathbb{R})$-re kiszámítjuk (4.14) mindkét oldalát:

$$ e^{-\mathrm{i}\, tQ^2/2} T_a f(x) = e^{-\mathrm{i}\, tx^2/2} f(x+a) $$

és

$$ \begin{aligned} {}^A T_a e^{-\mathrm{i}\, tQ^2/2} f(x) &= T_a U_{at} \, e^{-\mathrm{i}\, a^2 t/2} \, e^{-\mathrm{i}\, tQ^2/2} f(x) \\ &= e^{-\mathrm{i}\, a^2 t/2} \, e^{\mathrm{i}\, at(x+a)} \, e^{-\mathrm{i}\, tQ^2/2} f(x+a) \\ &= e^{-\mathrm{i}\, a^2 t/2} \, e^{\mathrm{i}\, at(x+a)} \, e^{-\mathrm{i}\, t(x+a)^2/2)} f(x+a) \\ &= e^{-\mathrm{i}\, tx^2/2} f(x+a). \end{aligned} $$

Ez adja (4.14)-t,

$$ e^{-\mathrm{i}\, tQ^2/2} U_b = {}^A U_b \, e^{-\mathrm{i}\, tQ^2/2}, \tag{4.15} $$

kiszámolása jóval egyszerűbb, hiszen felcserélhető operátorokról van szó.

$\square$

Ha a részecske szabadsági foka n, akkor az $L^2(\mathbb{R}^n)$ Hilbert-téren a $Q_1, Q_2, \dots, Q_n$ koordináta operátorok és a $P_1, P_2, \dots, P_n$ impulzus operátorok a

$$[P_k, P_l] = 0\,, \quad [Q_k, Q_l] = 0\,, \quad [Q_k, P_l] = \delta_{kl}\, \mathrm{i}\, I$$

felcserélési relációknak tesznek eleget. Ha $x, y \in \mathbb{R}^n$, akkor bevezetjük az

$$R(x,y) = x \cdot Q + y \cdot P := \sum_{i=1}^{n} x_i\, Q_i + \sum_{i=1}^{n} y_i\, P_i \tag{4.16}$$

jelölést. Ekkor

$$[R(x,y), R(x',y')] = \mathrm{i}\,(\langle x, y'\rangle - \langle y, x'\rangle)\, I = \mathrm{i}\,(\langle J(x,y), (x',y')\rangle)\, I \tag{4.17}$$

ahol

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -I_n \\ I_n & 0 \end{pmatrix},$$

I_n az $n \times n$-es egységmátrixot jelöli. Ebből látható, hogy az $A : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}^{2n}$ lineáris transzformáció akkor lesz kanonikus, ha

$$A^t\, J\, A = J \tag{4.18}$$

teljesül. A kanonikus transzformációk csoportot alkotnak, szerepükről szól a következő példa.

4. példa: A csatolt harmonikus oszcillátor energia operátora

$$H = \frac{1}{2M} P_1^2 + \frac{1}{2m} P_2^2 + K\, Q_1^2 + k\,(Q_1 - Q_2)^2\,,$$

ami kinetikus és potenciális energiára bomlik:

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2M} P_1^2 + \frac{1}{2m} P_2^2 \\ V &= \frac{1}{2}(K+k)\, Q_1^2 - k\, Q_1\, Q_2 + \frac{k}{2} Q_2^2\,. \end{aligned}$$

Az oszcillátor megoldása kanonikus transzformációk alkalmazásával történik, $e^\lambda = \sqrt{M/m}$

$$\begin{pmatrix} Q_1' \\ Q_2' \\ P_1' \\ P_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\lambda/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\lambda/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\lambda/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{\lambda/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ P_1 \\ P_2 \end{pmatrix}.$$

Az új változókban

$$T = \frac{1}{2\sqrt{Mm}} \left[(P_1')^2 + (P_2')^2\right]$$

$$V = \frac{K+k}{2} \sqrt{m/M}\,(Q_1')^2 - k\, Q_1'\, Q_2' + \frac{k}{2}\sqrt{M/m}\,(Q_2')^2\,.$$

A kinetikus energia forgatás invariáns. Most

$$\begin{pmatrix} Q_1'' \\ Q_2'' \\ P_1'' \\ P_2'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi/2) & -\sin(\varphi/2) & 0 & 0 \\ \sin(\varphi/2) & \cos(\varphi/2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos(\varphi/2) & -\sin(\varphi/2) \\ 0 & 0 & \sin(\varphi/2) & \cos(\varphi/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_1' \\ Q_2' \\ P_1' \\ P_2' \end{pmatrix}$$

és

$$V=\frac{\alpha}{2}\left(Q_1''\right)^2+\frac{\beta}{2}\left(Q_2''\right)^2+\gamma Q_1''Q_2'',$$

ahol α és β elég hosszú formulával adhatók meg,

$$\gamma=-k\cos\varphi+\Big((K+k)\sqrt{m/M}-k\sqrt{M/m}\Big)\frac{\sin\varphi}{2}$$

továbbá T változatlan. φ alkalmas választásával $\gamma=0$ és

$$V=\frac{\alpha}{2}\left(Q_1''\right)^2+\frac{\beta}{2}\left(Q_2''\right)^2.$$

Tehát

$$H=\left[\frac{1}{2\sqrt{Mm}}\left(P_1''\right)^2+\frac{\alpha}{2}\left(Q_1''\right)^2\right]+\left[\frac{1}{2\sqrt{Mm}}\left(P_2''\right)^2+\frac{\beta}{2}\left(Q_2''\right)^2\right]$$

és H sajátfüggvényei meghatározhatók: $f_n(x)\,g_m(y)$ alakúak lesznek, ahol $f_n(x)$ az első tag egy sajátfüggvénye, $g_m(y)$ pedig a második tagé. f_n és g_m kiszámolás az egszerű harmonikus oszcillátor példájára vezetődik vissza.

□

Az (4.17) egyenlet egyszerűsödik, ha a $z=x+\mathrm{i}\,y$ komplex vektorra térünk át. Nevezetesen,

$$[R(z),R(z')]=\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,\langle z,z'\rangle\,.$$

Ekkor a Weyl-féle felcserélési reláció az

$$\exp(\mathrm{i}\,R(z))\exp(\mathrm{i}\,R(z'))=e^{-\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,\langle z,z'\rangle}\exp(\mathrm{i}\,R(z'))\exp(\mathrm{i}\,R(z'))\tag{4.19}$$

alakot ölti.

4.4 Fázis tér és határozatlanság

A következő célunk annak érzékeltetése, hogy az n szabadságfokú részecske *fázistere* a kvantummechanikában a $\mathbb{C}^n$ tér, és $z\in\mathbb{C}^n$, $z=x+\mathrm{i}\,y$ esetén a valós rész $x\in\mathbb{R}^n$ a helyzettel, a y képzetes rész pedig az impulzussal hozható összefüggésbe. Minden $f\in L^2(\mathbb{R}^n)$ hullámfüggvény létrehoz egy ρ_f valószínűségsűrűséget a $\mathbb{C}^n$ fázistéren.

Legyen

$$\rho_f(z)=\frac{1}{(2\pi)^n}\,|\langle f,\alpha_z\rangle|^2\,,\tag{4.20}$$

ahol $\alpha\in L^2(\mathbb{R}^n)$ egy egyelőre nem részletezett hullámfüggvény és

$$\alpha_z(t)=e^{\mathrm{i}\,\langle y,t\rangle}\alpha(t-x)\qquad(z=x+\mathrm{i}\,y)\,.$$

1. lemma: *$\rho_f(z)$ valószínűségsűrűség.*

Bizonyítás: Miután $\rho_f(z)\geq 0$ világos a definícióból, azt kell igazolni, hogy $\int\rho_f(z)\,dz=1$.

$$\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\langle f,\alpha_z\rangle=\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int\overline{f(t)}e^{\mathrm{i}\,\langle y,t\rangle}\alpha(t-x)\,dt\,,$$

ami rögzített x-re a $t \mapsto \overline{f(t)}\alpha(t-x)$ függvény inverz Fourier-transzformáltja. Plancheral-tétele szerint $\int |\mathcal{F}^{-1}(g)|^2 = \int |g|^2$, azaz

$$\frac{1}{(2\pi)^n}\int |\langle f, \alpha_z\rangle|^2\, dy = \int |\overline{f(t)}|^2\, |\alpha(t-x)|^2\, dt\,.$$

Ezt kell integrálni x szerint:

$$\begin{aligned}\int \left(\int |f(t)|^2\, |\alpha(t-x)|^2\, dt\right) dx &= \int |f(t)|^2 \left(\int |\alpha(t-x)|^2\, dx\right) dt \\ &= \int |f(t)|^2 \left(\int |\alpha(x)|^2\, dx\right) dt = 1\,.\end{aligned}$$

□

A kvantummechanikai határozatlanság szerint a ρ_f valószínűségsűrűség nem lehet tetszőlegesen *éles*. Egy p valószínűségsűrűség élességét kifejezhetjük, többek között, p *Boltzmann-féle entrópiájával*:

$$S(p) = -\int p(t)\, \log\, p(t)\, dt\,. \tag{4.21}$$

Ez a mennyiség tetszőleges értéket felvehet (a szórással ellentétben, ami mindig nemnegatív).

5. példa: Ha a többdimenziós normális eloszlást egy pozitív definit Σ mátrix adja meg, azaz

$$p(t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \det \Sigma}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left\langle \Sigma^{-1}t, t\right\rangle\right) \qquad (t \in \mathbb{R}^n)\,,$$

akkor $S(p) = \frac{n}{2}\log(2\pi e) + \frac{1}{2}\log\det\Sigma$ egyszerű számolással. Az entrópia Σ determinánsának növő függvénye.

□

6. példa: A $\Delta \subset \mathbb{R}^n$ tartományon egyenletes eloszlás entrópiája $\log\lambda(\Delta)$, ahol $\lambda(\Delta)$ a tartomány térfogata (vagyis Lebesgue-mértéke).

□

4. tétel: (Wehrl-Lieb) $S(\rho_f) \geq n\log 2\pi e$.

A tétel bizonyítása nehéz, Alfred Wehrl sejtette és Elliott Lieb bizonyította be 1978-ban. Mivel a tétel alsó korlátot ad a Boltzmann-entrópiára, a ρ_f valószínűségsűrűség nem lehet akármilyen éles.

Most kiszámítjuk a fenti ρ_f sűrűség marginálisait.

2. lemma:

$$\int_\Delta \left(\int_{\mathbb{R}^n} \rho_f(x,y)\, dy\right) dz = \int_\Delta |f|^2 * |\alpha|^2\, dt$$

ha $\alpha(-t) = \alpha(t)$.

Bizonyítás: Az előző lemma bizonyításához teljesen hasonlóan járunk el:

$$\begin{aligned}\int_{\Delta}\left(\int_{\mathbb{R}^n}\rho_f(x,y)\,dy\right) &= \int\left(\chi_\Delta(x)\int|f(t)|^2\,|\alpha(t-x)|^2\,dt\right)dx \\ &= \int\chi_\Delta(x)(|f|^2*|\alpha|^2)x\,dx\,.\end{aligned}$$

□

Tehát ρ_f első marginális sűrűsége sajnos nem $|f|^2$, ami a koordináta igazi sűrűsége. Ha azonban α-t úgy választjuk, hogy $|\alpha_n|^2$ egy approximatív egység legyen a konvolucióra nézve, akkor

$$|f|*|\alpha_n|^2 \to |f|^2\,.$$

(Ez teljesül, ha $|\alpha_n|^2$ normális eloszlású és a kovariancia mátrixok sorozata 0-hoz tart.) Mi történik ilyenkor az impulzussűrűségnek megfelelő második marginálissal? Ez $|\mathcal{F}(f)|^2*|\mathcal{F}\alpha|^2$, ami éppen akkor lesz $|\mathcal{F}f|^2$-hez közel, ha $|\mathcal{F}\alpha_n|^2$ approximatív egység. Igy α alkalmas megválasztásával elérhetjük azt, hogy ρ_f vagy a koordináta, vagy pedig az impulzus szempontjából megadja a korrekt valószínűségeket, de mindkét cél egyidejűleg nem elérhető. Ez a jelenség is a határozatlanság egy megnyilvánulása.

Ötödik fejezet

5. Másodkvantálás

Ha a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér kvantumrendszert ír le, akkor $\mathcal{H}^{(n)} := \mathcal{H} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}$ egy olyan összetett rendszer Hilbert-tere, amely a kiindulási rendszer n példányából áll. Ha az részrendszerek, például részecskék, megkülönböztethetetlenek, akkor szóba jövő állapotoknak bizonyos szimmetriával kell rendelkezni. Ha σ az $\{1, 2, \ldots, n\}$ halmaz egy permutációja, akkor létezik egy olyan $U_\sigma \in B(\mathcal{H}^{(n)})$ unitér operátor, hogy

$$U_\sigma(f_1 \otimes f_2 \otimes \ldots \otimes f_n) = f_{\sigma(1)} \otimes f_{\sigma(2)} \otimes \ldots \otimes f_{\sigma(n)}. \tag{5.1}$$

Ha $\xi \in \mathcal{H}^{(n)}$ egy állapotvektora az összetett rendszernek, akkor a $U_\sigma \xi$ vektornak ugyanazt az állapotot kell megani, hiszen az egyes részecskék megkülönböztethetetlenek. Tehát

$$U_\sigma \xi = e^{\mathrm{i}\,\varphi(\sigma,\xi)} \xi$$

valamilyen $\varphi(\sigma, \xi)$ valós számmal. A legegyszerűbb esetben ez nem függ magától ξ-től, és további egyszerüsödés, ha σ-tól sem függ. Az olyan ξ vektorok $\mathcal{H}^{(n)}$-ben, amelyekre $U_\sigma \xi = \xi$, alkotják a szimmetrikus alteret. $\mathcal{H}^{(n)}$-nek azt az alterét, amely az U_σ unitérek közös fixpontjaiból áll, szimmetrikus altérnek, illetve szimmetrikus tenzorszorzatnak nevezzük.

$$E_n^+ = \frac{1}{n!} \sum_\sigma U_\sigma \tag{5.2}$$

az $E_n(\mathcal{H}^{(n)}) = \mathcal{H}_+^{(n)}$ szimmetrikus altérre való projekció.

A másik lehetőség megértéséhez a permutaciókról kell néhány szót mondani. Ha σ két szomszédos elem cseréje (azaz transzpozició), akkor a $e^{\mathrm{i}\,\varphi(\sigma,\xi)}$ fázis ± 1, hiszen négyzete 1 kell, hogy legyen. Ha az elöbbi fázis minden transzpozicióra 1, akkor kapjuk a fenti szimmetrikus vektorokat. A másik lehetőség az, hogy a fázis minden transzpozicióra -1. Az olyan ξ vektorok $\mathcal{H}^{(n)}$-ben, amelyekre $U_\sigma \xi = -\xi$ minden σ transzpozicióra alkotják a $\mathcal{H}_-^{(n)}$ antiszimmetrikus alteret. Minden permutáció transzpoziciók szorzata, ha páros soké, akkor párosnak mondjuk a permutációt. A σ permutáció paritása megegyezik az inverziók $i(\sigma)$ számának paritásával. Az antiszimmetrikus altérre vetítő projekció

$$E_n^- = \frac{1}{n!} \sum_\sigma (-1)^{i(\sigma)} U_\sigma \,.$$

1. lemma: *Ha $(f_m) \subset \mathcal{H}$ egy ortonormált bázis, akkor az*

$$|f_{m_1}^{k_1}; f_{m_2}^{k_2}; \ldots; f_{m_t}^{k_t}\rangle := \sqrt{\frac{n!}{k_1! \ldots k_t!}} E_n(f_{m_1} \otimes \ldots \otimes f_{m_1} \otimes f_{m_2} \otimes \ldots f_{m_2} \otimes \ldots \otimes f_{m_t} \otimes \ldots \otimes f_{m_t})$$

vektorok $\mathcal{H}_+^{(n)}$ ortonormált bázisát alkotják, ha $m_1 < m_2 < \ldots < m_t$ és $k_1 + k_2 + \ldots + k_t = n$.

Bizonyítás: Mivel $E_n^+ U_\sigma = E_n$ a fenti vektorok teljes rendszert alkotnak. Az

$$\langle E_n^+(g_1 \otimes g_2 \otimes \ldots \otimes g_n), E_n^+(h_1 \otimes h_2 \otimes \ldots \otimes h_n\rangle =$$

$$= \frac{1}{n!} \sum_\sigma \langle g_1, h_{\sigma(1)}\rangle \langle g_2, h_{\sigma(2)}\rangle \ldots \langle g_n, h_{\sigma(n)}\rangle$$

képletből látszik a vektorok ortogonalitása, és normájuk is leolvasható.

□

Megállapodás szerint $\mathcal{H}_{\pm}^{(0)} = \mathbb{C}\Omega$, a $\mathcal{H}$ Hilbert-tértől függetlenül. Az

$$\mathcal{F}_{\pm}(\mathcal{H}) := \mathbb{C}\Omega \oplus \mathcal{H}_{\pm}^{(1)} \oplus \mathcal{H}_{\pm}^{(2)} \oplus \dots$$

végtelen direkt-összeget $\mathcal{H}$ feletti szimmetrikus, illetbe antiszimmetrikus *Fock-térnek* nevezzük. A $\mathcal{F}_{+}$ teret *Bose-Fock-térnek*, a $\mathcal{F}_{-}$ teret pedig *Fermi-Fock-térnek* is mondják. Amennyiben $\mathcal{H}$ egydimenziós, $\mathcal{F}_{+}(\mathcal{H})$ izomorf az $l^2(\mathbb{Z}^+)$ térrel, a szimmetrikus Fock-tér mindig végtelen dimenziós. A továbbiakban csak a szimmetrikus Fock-térről lesz szó, es $\mathcal{F}_{+}$ helyett egyszerűen $\mathcal{F}$-et írunk.

Az elöző lemma megadja a Fock-tér bázisát, az

$$|f_{m_1}^{k_1}; f_{m_2}^{k_2}; \dots; f_{m_t}^{k_t}\rangle$$

vektorok alkotnak egy bázist, ha $m_1 < m_2 < \dots < m_t$ egy tetsző leges novő sorozat és $k_1, k_2, \dots, k_t$ egész számok. Ha $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\oplus}\mathcal{H}_2$, akkor $\mathcal{H}$ ban ugy kapunk egy bázist, hogy egy $\mathcal{H}_1$-beli és egy $\mathcal{H}_2$-beli bázist egyesítünk. Ha $\mathcal{H}_1$ bázisa (f_i) és $\mathcal{H}_2$ bázisa (g_j), akkor $\mathcal{F}(\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2)$ bázisa

$$|f_{m_1}^{k_1}; f_{m_2}^{k_2}; \dots; f_{m_t}^{k_t}; g_{n_1}^{j_1}; g_{n_2}^{j_2}; \dots; g_{n_u}^{j_u}\rangle.$$

Ha ezt a vektort a

$$|f_{m_1}^{k_1}; f_{m_2}^{k_2}; \dots; f_{m_t}^{k_t}\rangle \otimes |g_{n_1}^{j_1}; g_{n_2}^{j_2}; \dots; g_{n_u}^{j_u}\rangle.$$

elemi tenzorral azonosítjuk, akkor az

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2) = \mathcal{F}(\mathcal{H}_1) \otimes \mathcal{F}(\mathcal{H}_2) \tag{5.3}$$

összefüggéshez jutunk.

$\mathcal{H}$ minden lineáris A operátorához értelmezhetünk egy $\mathcal{F}(A)$ lineáris operátorát $\mathcal{F}(\mathcal{H})$-nak:

$$\mathcal{F}(A)E_n(f_1 \otimes \dots \otimes f_n) = \sum_{i=1}^{n} E_n(f_1 \otimes \dots \otimes f_{i-1} \otimes Af_i \otimes f_{i+1} \otimes \dots \otimes f_n) \,.$$

Az $A = I$ választás egy olyan $N := \mathcal{F}(I)$ operátort ad, amelynek minden $\xi \in \mathcal{H}_s^{(n)}$ vektor sajátvektora n sajátértékkel. N neve *részecskeszám operátor.* Ha A korlátos, akkor tehát $\mathcal{F}(A)$ nem feltétlenül korlátos. $\mathcal{H}_s^{(n)}$ azonban invariáns altere $\mathcal{F}(A)$-nak $\|A|\mathcal{H}_s^{(n)}\| \le n\|A\|$. Ha A nem mindenütt van értelmezve, akkor természetesen $\mathcal{F}(A)$ értelmezési tartományára is figyelni kell.

Ha $U \in B(\mathcal{H})$ unitér operátor, akkor

$$\mathcal{F}^{\Pi}(U)E_n(f_1 \otimes \dots \otimes f_n) = E_n(Uf_1 \otimes Uf_2 \otimes \dots \otimes Uf_n)$$

egy unitér operátort értelmez $\mathcal{F}(\mathcal{H})$-n.

1. tétel: *Ha $U(t)$ folytonos unitér csoport $\mathcal{H}$ és A az önadjungált generátora, akkor $\mathcal{F}^{\Pi}(U(t))$ folytonos unitér csoport $\mathcal{F}(\mathcal{H})$-n és önadjungált generátora $\mathcal{F}(A)$ lezárása.*

□

Használni fogjuk a

$$\psi_n(f_1, \dots, f_n) := E_n(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n)$$

jelölést. Az $\psi_n(f_1,\dots,f_n)$ alakú vektorok lineáris burkát $\mathcal{F}_0(\mathcal{H})$-val jelöljük. Ez az altér természetesen sűrű $\mathcal{F}(\mathcal{H})$-ban. Minden $f\in\mathcal{H}$ vektorra értelmezünk egy $a^+(f)$ és egy $a(f)$ operátort $\mathcal{F}_0(\mathcal{H})$-n:

$$a^+(f)\psi_n(f_1,f_2,\dots,f_n) = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(f,f_1,f_2,\dots,f_n) \tag{5.4}$$

$$a(f)\psi_n(f_1,\dots,f_n) = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{i=1}^{n}\langle f,f_i\rangle\psi_{n-1}(f_1,\dots,f_{i-1},f_{i+1},\dots,f_n) \tag{5.5}$$

$a^+(f)$-et *keltő*, $a(f)$-et *elnyelő operátornak* nevezzük.

Ha $\mathcal{H}=\mathbb{C}$, akkor a Fock-tér $l^2(\mathbb{Z}^+)$ a (δ_n) kanonikus bázissal.

$$\begin{aligned} a^+(z)\delta_n &= \sqrt{n+1}\, z\, \delta_{n+1} \\ a(z)\delta_n &= \sqrt{n}\, \overline{z}\, \delta_{n-1} \,. \end{aligned}$$

Ebből látszik, hogy $a^+(z)$ és $a(z)$ nem korlátos, ha $z\neq 0$, $a^+(z)$ lineáris z-ben, $a(z)$ konjugált lineáris z-ben, és $a^+(1)a(1)$ nem más mint a számoperátor.

Könnyű ellenőrizni a keltő és elnyelő operátorokra vonatkozó felcserélési szabályokat:

$$\begin{aligned} [a(f),a(g)] &= 0 \\ [a^+(f),a^+(g)] &= 0 \\ [a(f),a^+(g)] &= \langle f,g\rangle\cdot I\,. \end{aligned} \tag{5.6}$$

Mivel $\langle a(f)\xi,\eta\rangle=\langle\xi,a^+(f)\eta\rangle$ $\xi,\eta\in\mathcal{F}_0(\mathcal{H})$ esetén a

$$\Phi(f):=\frac{1}{\sqrt{2}}(a(f)+a^+(f)) \tag{5.7}$$

Segal-féle mező operátor szimmetrikus $\mathcal{F}_0(\mathcal{H})$-n.

2. lemma: *Ha* $g_1,g_2,\dots,g_n,f\in\mathcal{H}$ *és* $\|f\|=1$, *akkor*

$$\|\Phi(f)\Phi(g_1)\dots\Phi(g_n)\Omega\|\le 2\sqrt{n+1}\|\Phi(g_1)\dots\Phi(g_n)\Omega\|\,.$$

□

Mivel a lineáris burka a $\Phi(g_1)\dots\Phi(g_n)\Omega$ vektoroknak pontosan $\mathcal{F}_0(\mathcal{H})$, a lemma becslése adja, hogy

$$e^{\mathrm{i}\,\Phi(tf)}\xi=\sum_{i=0}^{\infty}\frac{t^n\Phi(f)^n}{n!}\xi$$

konvergens bármilyen $\xi\in\mathcal{F}_0(\mathcal{H})$-ra. Igy egy erősen folytonos unitér csoporthoz jutunk, amelynek önadjungált generátora az eredetileg $\mathcal{F}_0(\mathcal{H})$-n értelmezett $\Phi(f)$ lezárása. A továbbiakban a $\Phi(f)$ jelölést erre az önadjungált operátorra használjuk.

A Fock-térbeli operátorok leírására az $\mathcal{F}_0(\mathcal{H})$ altér vektorai mellett az *exponenciális vektorok* is használhatók. Ha $f\in\mathcal{H}$, akkor

$$e(f):=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(1)}\otimes f^{(2)}\otimes\ldots\otimes f^{(n)})}{\sqrt{n!}}\,. \tag{5.8}$$

Nyilvánvalóan

$$\|e(f)\|^2=e^{\|f\|^2}\,,$$

vagy általánosabban

$$\langle e(f),e(g)\rangle=e^{\langle f,g\rangle}\,. \tag{5.9}$$

2. tétel: *Az exponenciális vektorok* $\{e(f) : f \in \mathcal{H}\}$ *halmaz teljes és lineárisan független* $\mathcal{F}(\mathcal{H})$*-ban.*

Bizonyítás: Fel fogjuk használni, hogy az $z \mapsto e^{tz}$ exponenciális függvények lineárisan függetlenek. Tételezzük fel, hogy

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j e(u_j) = 0 \,.$$

Bármilyen $j \neq k$-ra

$$\{u \in \mathcal{H} : \langle u, u_j \rangle \neq \langle u, u_k \rangle\}$$

sűrű nyílt halmaz, ezek metszete nem üres, így van olyan $v_0 \in \mathcal{H}$, hogy a $\langle v_0, u_1 \rangle, \langle v_0, u_2 \rangle, \dots, \langle v_0, u_n \rangle$ mind különböző számok.

Bármilyan $z \in \mathbb{C}$-re

$$0 = \langle e(\overline{z}v), \sum_{j=1}^{n} \alpha_j e(u_j) \rangle = \sum_j \alpha_j e^{z\langle v, u_j \rangle} \,,$$

amiből adódik, hogy $\alpha_1 = \alpha_2 = \ldots = \alpha_n = 0$, mert az exponenciális függvények lineárisan függetlenek.

Teljesség bizonyításához először meggondoljuk, hogy $\{f \otimes \ldots \otimes f : f \in \mathcal{H}\}$ teljes $\mathcal{H}_s^{(n)}$-ben. Elegendő véges dimenziós $\mathcal{H}$-val foglalkozni. Legyen $e_1, e_2, \dots, e_n$ ortonormált bázis $\mathcal{H}$-ban. Ha $f = \sum_i z_i e_i$, akkor

$$f \otimes \ldots \otimes f = \sum z_1^{r_1} z_2^{r_2} \ldots z_n^{r_n} E_n(e_1^{(1)} \otimes \ldots \otimes e_1^{(r_1)} \otimes e_2^{(1)} \ldots e_2^{(r_2)} \ldots e_n^{(r_n)}) =$$

$$= \sum z_1^{r_1} z_2^{r_2} \ldots z_n^{r_n} \sqrt{\frac{r_1! \ldots r_n!}{n!}} |e_1^{r_1}; \ldots; e_n^{r_n}\rangle \,.$$

Mivel

$$\langle \sum \alpha(r_1, \dots, r_n) |e_1^{r_1}; \ldots; e_n^{r_n}\rangle, f(z_1, z_2, \dots, z_n) \rangle =$$

$$= \sum z_1^{r_1} z_2^{r_2} \ldots z_n^{r_n} \overline{\alpha}(r_1, \dots, r_n) \sqrt{\frac{r_1! \ldots r_n!}{n!}} \,,$$

ez csak úgy lehet 0 minden $z_1, z_2, \dots, z_n \in \mathbb{C}$-re, ha $\alpha(r_1, r_2, \dots, r_n) = 0$. (Az összegzések mindig a $r_1 + r_2 + \ldots + r_n = n$, $r_i \in \mathbb{Z}^+$ feltételekre történtek.)

Ezekután elég bizonyítani, hogy $u^{\otimes n}$ tetszőleges módon közelíthető exponenciális vektorok lineáris kombinációival. Ennek bizonyítása n szerinti indukcióval megy. $n = 0$ a vákuumvektort adja, ami maga is exponenciális vektor, $\Omega = e(0)$. Az indukciós lépés:

$$u^{\otimes(n+1)} = \sqrt{(n+1)!} \lim_{\varepsilon \to 0} \varepsilon^{-(n+1)} \left[e(\varepsilon u) - \sum_{r=0}^{n} \frac{\varepsilon^r}{\sqrt{r!}} u^{\otimes r} \right] \,.$$

□

Az exponenciális vektorokon a számunkra fontos operátorok hatása egyszerűen írható le. Az elnyelő operátor definíciója szerint

$$a(f)\psi_n(g, \ldots g) = \sqrt{n} \langle f, g \rangle \psi_{n-1}(g, \dots, g) \,.$$

Ezt $\sqrt{n}!$-sal osztva és n-re összegezve kapjuk, hogy

$$a(f)e(g) = \langle f, g \rangle e(g) \,, \tag{5.10}$$

azaz az exponenciális vektorok sajátvektorai az elnyelő operátoroknak.

$$e(g+tf)=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}\frac{\psi_n(g^{n-k},f^k)t^k}{\sqrt{n!}}\,,$$

amit $t=0$-ban differenciálva

$$\sum_{n=1}^{\infty}\sqrt{n}\frac{\psi_n(g^{n-1},f)}{\sqrt{(n-1)!}}=a^+(f)e(g)\,.$$

Tehát

$$a^+(f)e(g)=\frac{d}{dt}e(g+tf)\Big|_{t=0}\,. \tag{5.11}$$

Ezek után megmutatjuk, hogy

$$U_t: e(g)\mapsto \exp\big(-t^2\|f\|^2/2-t\langle f,g\rangle\big)e(tf+g)$$

egy folytonos unitér csoport, és generátora $a^+(f)-a(f)$. Az első állítás elég nyilvánvaló, a második pedig differenciálást igényel:

$$\frac{d}{dt}\exp\big(-t^2\|f\|^2/2-t\langle f,g\rangle\big)e(tf+g)=-\langle f,g\rangle e(g)+\frac{d}{dt}e(tf+g)$$

ami $[a^+(f)-a(f)]e(g)$ (5.10) és (5.11) alapján.

A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér

$$(u,U): v\mapsto Uv+u \tag{5.12}$$

alakú transzformációját mozgatásnak nevezzük, ha U egy unitér operátor és $u\in\mathcal{H}$ egy vektor. A (5.12) mozgatás egy U-val való "forgatást", majd egy u-val való eltolást jelent. A mozgatások csoportot alkotnak:

$$\begin{aligned}(u_1,U_1)(u_2,U_2)v &= (u_1,U_1)(U_2v+u_2)\\ &= U_1U_2v+U_1u_2+u_1\\ &= (u_1+U_1u_2,U_1U_2)v\,.\end{aligned}$$

A szorzási szabály

$$(u_1,U_1)(u_1U_2) = (u_1+U_1u_2,U_1U_2) \tag{5.13}$$

és

$$(u_1,U_2)^{-1} = (-U^{-1}u,U^{-1})\,. \tag{5.14}$$

Igy kapjuk a $E(\mathcal{H})$ *euklideszi csoportot*, ami egyébként az unitér csoport és a transzláció csoport *féldirekt szorzata.*

A hozzárendelés

$$\pi(u,U): e(v)\mapsto \exp\left(-\frac{1}{2}\|u\|^2-\langle u,Uv\rangle\right)e(Uv+u) \tag{5.15}$$

egy $\pi(u,U)$ unitér operátort ad meg az $\mathcal{F}_+(\mathcal{H})$ Fock-téren. Az $(u,U)\mapsto\pi(u,U)$ megfeleltetés az euklideszi csoport projektív ábrázolását adja. Ez azt jelenti, hogy az $\pi((u_1,U_1)(u_2,U_2))$ és $\pi(u_1,U_1)\pi(u_2,U_2)$ unitérek egy fázisban különböznek. Nevezetesen,

$$\pi(u_1,U_1)\pi(u_2,U_2)=e^{-\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,\langle u_1,U_1u_2\rangle}\pi((u_1,U_1)(u_2,U_2))\,. \tag{5.16}$$

Az egyenlőséget természetesen könnyű ellenőrizni a (5.15) definíció alapján az exponenciális vektorokon.

Az euklideszi csoport $\{(u,U): u=0\}$ részcsoportja maga az unitér csoport. A $\pi((0,U))\in\mathcal{F}_+(\mathcal{H})$ unitér operátor is nevezetes, nem más mint $\mathcal{F}^{\Pi}(U)$.

$\{(u,U) : U = I\}$ másik nevezetes részcsoportja maga $\mathcal{H}$, azaz $\mathcal{H}$ transzlációcsoportja, és

$$\pi(u,I) = W(u) := e^{a^+(u)-a(u)} .$$

Mivel az unitér csoportoknak önadjumgált generátorral való megadását részesítjük elönyben

$$W(u) = \exp\big(\mathrm{i}\,(a^+(-\mathrm{i}\,u) + a(\mathrm{i}\,u))\big) = \exp \mathrm{i}\,\Phi(\mathrm{i}\,\sqrt{2}u) . \tag{5.17}$$

A $W(u)$ unitér operátort *Weyl-operátornak* mondjuk. Az elnevezést a

$$W(f)W(g) = e^{-\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,\langle f,g\rangle} W(f+g) \tag{5.18}$$

reláció is indokolja, ami (5.16) átírása. Ebből

$$W(f)W(g) = e^{-2\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,\langle f,g\rangle} W(g)W(f)$$

és ha

$$U_a := W(af/\sqrt{2}) , \quad T_b := W(\mathrm{i}\,bf/\sqrt{2}) , \quad \|f\| = 1$$

akkor

$$U_b T_a = e^{-\mathrm{i}\,ab} T_a U_b ,$$

ami azonos a (4.5) felcserélési relációval. Igy tehát megkonstruáltuk a Weyl-féle felcserélési reláció reprezentációját a Fock-téren. Ez a reláció *Fock-reprezentációja.*