

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dP(\lambda)$$

Neumann János
A kvantum-
mechanika
matematikai
alapjai

AKADÉMIAI KIADÓ, BUDAPEST

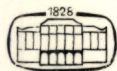
Neumann János

A kvantum- mechanika matematikai alapjai

Az iskolákat teremtő Neumann János időálló életművének egyik kiemelkedő dokumentuma ez a könyv. Magyar nyelvű kiadása tisztelgés a magyar származású nagy matematikus előtt, aki (mint könyve is bizonyítja) a fizikában is alapvetőt alkotott. Túl a könyv dokumentumjellegén, ismerete nélkülözhetetlen azok számára, akik a kvantumelméletnek a 60-as években újra-éledő és ma is virágzó axiomatikus iskoláival akarnak megismerkedni. A kvantummechanikának ebben a könyvben lefektetett alapelveit és axiómáit veszi kiindulási alapul a Wightman által fémjelzett axiomatikus kvantumtérelmélet.

A kvantumelméletet algebrai eszközökkel, ill. kvantumlogikai módszerekkel megközelítő irányzatok gyökerei is ebben a könyvben (és a szerző további munkáiban) találhatóak.

A könyv szinte utolérhetetlenül egyszerű, eredeti és világos gondolatmenetéhez a legteljesebb matematikai precizitás társul, s feloldja a kvantummechanika születésének korában felmerült komoly matematikai nehézségeket, az elvi és értelmezési problémákat. A könyvben lefektetett apparátus a kvantummechanika teljes és máig kielégítő elmélete.

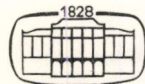


AKADÉMIAI KIADÓ
BUDAPEST

A KVANTUMMECHANIKA
MATEMATIKAI ALAPJAI

NEUMANN JÁNOS

A KVANTUMMECHANIKA MATEMATIKAI ALAPJAI



AKADÉMIAI KIADÓ · BUDAPEST 1980

Az eredeti mű adatai

ИОГАНН ФОН НЕЙМАН
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ
ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
МОСКВА 1964

Fordította
SEBESTYÉN ÁKOS
a fizikai tudományok kandidátusa

Ellenőrző szerkesztő
ABONYI IVÁN
a fizikai tudományok kandidátusa

ISBN 963 05 2295 0

© Akadémiai Kiadó, Budapest

Printed in Hungary

TARTALOM

A magyar kiadás elé	7
Előszó	9
I. Bevezető megfontolások	11
1. A transzformációelmélet eredete	11
2. A kvantummechanika első megfogalmazásai	12
3. A két elmélet ekvivalenciája: a transzformációelmélet	16
4. A két elmélet ekvivalenciája: a Hilbert-tér	22
II. Az absztrakt Hilbert-tér	26
1. A Hilbert-tér definíciója	26
2. A Hilbert-tér geometriája	32
3. Az A.—E. feltevések diszkussziója	39
4. Zárt lineáris sokaságok	47
5. Operátorok a Hilbert-térben	54
6. A sajátérték-feladat	62
7. Folytatás	65
8. Tájékozódás a sajátérték-feladatról	71
9. A sajátérték-feladat megoldásai létezésének és egyértelműségének diskussziója	86
10. Felcserélhető operátorok	101
11. A spur.	105
III. A kvantumstatisztika	115
1. A kvantummechanika statisztikus állításai	115
2. A statisztikus értelmezés	120
3. Több mennyiség egyidejű megmérése és a mérhetőség általában.	123
4. A határozatlansági relációk	133

5. A projektorok mint állítások	143
6. Sugárzáselmélet	147
IV. Az elmélet deduktív felépítése	173
1. A statisztikus elmélet alapjai	173
2. A statisztikus képletek bizonyítása	181
3. A kísérletek tanulságai	187
V. Általános megfontolások	198
1. A mérés és a reverzibilitás	198
2. Termodinamikai megfontolások	205
3. Az egyensúly és a reverzibilitás problémái	214
4. A makroszkopikus mérés	228
VI. A mérési folyamat	238
1. A probléma megfogalmazása	238
2. Összetett rendszerek	240
3. A mérési folyamat vizsgálata	249
Jegyzetek	255
Név- és tárgymutató	281

A MAGYAR KIADÁS ELÉ

NEUMANN JÁNOS: „A kvantummechanika matematikai alapjai” c. művét 1932-ben adta ki a Springer Verlag. Az azóta eltelt mintegy fél évszázad során kitűnt, hogy ez a mű valóban beváltotta a címében rejlő ígéretekét. Első monografikus feldolgozása volt a megjelenése előtt szűk évtizede kialakult „modern” kvantumelméletnek, a kvantummechanikának. Logikailag következetes felépítést ad azoknak az új matematikai módszereknek, amelyeket a kvantummechanika kifejezési eszközül használ; arra törekedve, hogy ebben a felépítésben ne maradjon tisztázatlanul egyetlen fogalom sem.

Ez a belső célkitűzés és a megvalósítás csodálatos eredményei készítetik az olvasót, hogy egy másik „Principia mathematica...” jusson eszébe, amely ugyancsak egy újszülött tudomány, az újkori fizika kvantitatív kísérleti vizsgálati módszereivel megindított folyamat első eredményei után nyúlt az alapelveknek a matematikai analízis módszereivel való megfogalmazásához. S ahogyan NEWTON-nak is lépten nyomon meg kellett küzdenie a matematikai módszerek fizika igényelte továbbfejlesztéséért, úgy NEUMANN JÁNOS sem csak regisztrálta és sorba rakta az alapelveket, hanem számos helyen éppen a feladat vállalásából adódó felismerések eredményeképpen mondott ki és bizonyított be új tételeket és nyitott meg új kutatási területeket.

NEUMANN által itt használt fejezete a matematikának, a *Hilbert*-térben értelmezett önadjungált operátorok spektrál-elmélete. S az új irány, amit a kvantummechanika szükségletei nyomán nyitott, a nemkorlátos önadjungált operátorok elmélete — aminek azután a kvantumelméleten túlmutató jelentősége is bebizonyosodott.

NEUMANN JÁNOS könyve egyáltalán nem törekszik arra, hogy a kvantummechanika valamilyen praktikus kézikönyve is legyen. Az állításokat, tételeket általános fizikai mivoltukban elemzi, nem illusztrálja ezeket konkrét fizikai problémákra vonatkozó feladatokon. Művének megjelenésekor ilyen praktikusabb kézikönyvek már hozzáférhetőek voltak, gondoljunk pl. A. SOMMERFELD „Atombau und Spektrallinien” című monográfiájának híres „hullámmechanikai pótkötetére”, vagy W. PAULI nagy tanulmányára a kék „Handbuch der Physik”-ben. NEUMANN kivételt csak a III/6 fejezetben tesz, mikor a második kvantálás módszerét és az átmeneti valószínűségek kiszámítását az elektromágneses erőter egyébként centrális fontosságú konkrét problémáján mutatja be.

NEUMANN JÁNOS monográfiáját kézben tarva a matematikai teljesítmény mellett nem feledkezhetünk el azokról a fizikai eredményekről sem, amelyek a Szerzőnek

éppen ezzel a vállalkozásával kapcsolatosak. NEUMANN érdeme a kvantummechanika statisztikus aspektusának az elmélet belső koherenciáját (értelmezését) illető mély elemzése, amely egyszerre szolgálja a mikrofizikában használt statisztikus fogalmak pontos kvantumelméleti meghatározását is. NEUMANN nevéhez fűződik a tiszta mellett a kevert állapotok szerepének felismerése és a sűrűségmátrix bevezetése is.

„A kvantummechanika matematikai alapjai”-nak 1932. évi német kiadása óta 1955-ben a Princeton University Press kiadónál R. T. BEYER angol fordításban, 1964-ben M. K. POLIVANOV és B. M. SZTYEPANOV orosz fordításban a Nauka Kiadónál, majd az 1932. évi német eredeti *változatlan* formájában 1968-ban ismét a Springer Verlagnál jelent meg. Érdemes a két német kiadás évét megnézni, a köztük eltelt 36 esztendő a világ és a tudomány arculatán mekkora változások tanúja! Kevés szakkönyvről mondható el manapság, hogy az elmúlt négy-öt évtized fejlődése nem viselte volna meg állításait.

Jelen kiadás, miközben elsődleges célja, hogy a kvantummechanikának ez az eleven — mert még ma is ható — dokumentuma magyar nyelven is hozzáférhető legyen, szerény tisztelgés kíván lenni a magyar származású NEUMANN JÁNOS korszakalkotó matematikai és fizikai munkássága előtt.

ABONYI IVÁN

ELŐSZÓ

E könyv célja az új kvantummechanika olyan egységes ismertetése, amely — amennyire csak lehetséges és hasznos — matematikai szempontból szigorú. Eme új kvantummechanika lényeges részei az elmúlt esztendőök során határozott matematikai formát öltöttek; ez a formalizmus az ún. „transzformációelmélet”. Ezért a hangsúlyt az eme elmélettel kapcsolatos általános és alapvető kérdésekre helyezzük. Nevezetesen, az interpretáció nehéz problémáit — ezek közül számosat még máig sem oldottak meg kielégítően — részletesen fogjuk megvizsgálni. Ezzel kapcsolatban a kvantummechanika viszonya a statisztikához és a klasszikus statisztikus mechanikához különösen fontos. A kvantummechanikai módszerek alkalmazását az egyes problémákra általában nem taglaljuk és nem foglalkozunk az általánosból leszármaztatott speciális elméletekkel sem, legalábbis akkor nem, ha így nem kerül veszélybe az alapvető összefüggések megértése. Ez azért tűnik tanácsosnak, mert e problémák számos kiváló tárgyalása már nyomdában, vagy kiadás közben van.¹

Ismertetjük azonban az elmülethez szükséges matematikai eszközöket, nevezetesen a *Hilbert*-terek és az ún. *hermitikus operátorok* elméletét. Ehhez szükséges lesz a nem korlátos operátorok pontos ismertetése, vagyis az elmélet kiterjesztése a klasszikus határokon túlra (ezt HILBERT, E. HELLINGER, F. RIESZ, E. SCHMIDT és O. TOEPLITZ végezte el). A tárgyalás során általában a fizikai mennyiségeket reprezentáló operátorokkal és nem azok mátrixaival fogunk számolni; e mátrixok az operátorokból csupán a *Hilbert*-tér tetszőleges — speciális — koordináta-rendszereinek bevezetésével állnak elő. E „koordinátamentes”, tehát invariáns, erősen geometriai jellegű módszernek figyelemre méltó formális előnyei vannak.

DIRAC mind a nemrég kiadott könyvében, mind pedig számos cikkében² a kvantummechanikát felülmúlhatatlanul elegánsan, tömören és ugyanakkor invariáns formában fogalmazta meg. Ezért talán helyénvaló, hogy a mi módszerünk mellett — ez DIRACÉTÓL lényegesen eltér — néhány érvert sorakoztassunk fel.

DIRAC fent említett módszere (és erről világossága és eleganciája miatt, a kvantummechanika irodalmának nagy részében manapság elfeledkeznek) nem elégti ki a matematikai szigorúság követelményeit még akkor sem, ha azokkal szemben az elméleti fizika egyéb ágaiban közismert és természetes módon engedményeket teszünk. E módszer például erősen tapad ahhoz a fikcióhoz, hogy minden önadjungált operátor diagonális alakra hozható. Az olyan operátoroknál, ahol ez nem lehetséges, önellentmondó tulajdonságokkal rendelkező különleges

függvények bevezetésére van szükség. Az ilyen matematikai „fikciókra” DIRAC módszerében még akkor is szükség van, amikor szemléletesen definiált kísérlet eredményének numerikus kiszámítására kerül sor. Nem lenne helye az ellenvetésnek akkor, ha ezekre az analízis jelenlegi kereteibe bele nem illő fogalmakra a fizikai elmélet sajátos szerkezete miatt szükség volna. Arra gondolhatnánk, hogy amint NEWTON mechanikája maga után vonta az eredeti formájában kétségtelenül ellentmondásos infinitezimális kalkulus fejlődését, úgy a kvantummechanika is „a végtelen sok változó analízisének” új formáját sugallja, vagyis, hogy a matematika apparátusát kell megváltoztatni, nem pedig a fizikai elméletet. A helyzet azonban semmi esetre sem ez. Hangsúlyozni kell, hogy a kvantummechanika „transzformációelméletét” olyan alakba lehet önteni, amely világos, egyértelmű és matematikai szempontból sem kifogásolható. Rá kell mutatnunk arra, hogy ez a korrekt felépítés nem abban áll, hogy DIRAC módszerét pontosítjuk és megmagyarázzuk, hanem az alapoktól kezdve más eljárásra lesz szükségünk; ez az eljárás az operátorok Hilbert-féle spektrál elméletére támaszkodik.

Az alapkérdések elemzésében megmutatjuk, hogy a kvantummechanika statisztikus formulái miként vezethetők le néhány kvalitatív jellegű alapfeltevésből. Részletesen megvizsgáljuk továbbá, hogy a kvantummechanika statisztikus jellegéből lehet-e a természet leírásában bizonyos többértelműsége (nem teljes leírásra) következtetni. Az ilyen következtetés természetes folyománya volna annak az általános elvnek, hogy minden valószínűségi állítás ismereteink hézagos voltában gyökeredzik. Már többször felmerült ilyen, a „rejtett paramétereken” alapuló okfejtés, valamint az is, hogy e „rejtett paraméterek” a megfigyelő és nem a megfigyelt rendszer jellemzői. Kiténik majd, hogy az ilyen következtetés aligha lehet sikeres, pontosabban, hogy összeegyeztethetetlen a kvantummechanika bizonyos kvalitatív alapfeltevésével.³

Szemügyre vesszük e statisztika és a termodinamika viszonyát is. Tüzetesebb vizsgálat megmutatja, hogy a klasszikus mechanikának a termodinamika megalapozásához szükséges „rendezetlenségi” feltevésével kapcsolatos nehézségek elkerülhetők.⁴

I. BEVEZETŐ MEGFONTOLÁSOK

1. A transzformációelmélet eredete

Nem akarjuk ezen a helyen ecsetelni a kvantumelmélet segítségével az 1900-tól 1925-ig terjedő időszakban elért és PLANCK, EINSTEIN, valamint BOHR nevével fémjelzett nagyszerű eredményeket.⁵ Eme időszak vége felé minden kétséget kizáróan világossá vált, hogy minden olyan elemi folyamatban, vagyis minden atomi-molekuláris nagyságrendben lefolyó jelenségben a kvantumok „nemfolytonos” törvényei érvényesülnek. Majdnem minden területen olyan kvantitatív kvantumelméleti módszerek álltak rendelkezésre, amelyek a kísérletekkel jól vagy legalábbis kielégítően egyező eredményeket szolgáltatottak. Még sokkal nagyobb jelentőségű volt az, hogy az elméleti fizikában polgárjogot nyert a gondolat, hogy a makroszkopikus világban mindenütt megfigyelhető folytonossági elv („natura non facit saltus”) egy olyan világban végbemenő átlagolóadás félrevezető eredménye, amely belső természetét szerint nem folytonos jellegű. Az ember általában sok milliárd elemi folyamatot érzékel és a nagy számok kiegyenlítő törvénye elmosza az egyes folyamatok valódi természetét.

Az előbb említett időszakban azonban még nem állt rendelkezésre a kvantumelmélet olyan matematikai-fizikai rendszere, amelynek segítségével az addigi ismeretek egységes képbe lettek volna foglalhatók, s amely alátámaszthatta volna a mechanika, elektrodinamika és a relativitáselmélet monumentális egységét (a kvantumjelenségek épp ezt az egységet zavarták meg). A kvantumelmélet annak ellenére, hogy méltán formált jogot az egyetemességre, a formális és a fogalmi eszközök híján csupán egymástól lényegesen különböző, független, heterogén és egymásnak részben még ellent is mondó töredékek halmazából állt. Ebben a vonatkozásban a legszembetűnőbb volt a korrespondencia elve, amely félig a klasszikus mechanikához és elektrodinamikához tartozott (és amely a problémák végső tisztázásában meghatározó szerepet játszott), a fény kettős, — ellentmondásos — természete (hullám és részecske, lásd az 5. és a 148. jegyzetet) és végül nemkvantált (aperiodikus) és kvantált (periodikus) mozgások létezése.⁶

Az 1925. év hozta meg a megoldást. A HEISENBERG által vázolt elképzeléseket BORN, HEISENBERG, JORDAN, majd kissé később DIRAC fejlesztette ki a fizika első teljes kvantumelméleti rendszerévé. Valamivel később SCHRÖDINGER egészen más alapról kiindulva ugyanolyan céllal kidolgozta a „hullámmechanikát”, amelyről csakhamar bebizonyosodott, hogy (legalábbis matematikai értelemben, lásd I. 3. és 4. fejezet) ekvivalens a HEISENBERG, BORN, JORDAN, DIRAC elmélettel.⁷ BORNNAK a természet kvantumelméleti leírására adott statisztikai értelmezése⁸ alapján DIRAC

és JORDAN a kettőt a „transzformációelméletben” egyesítette.⁹ Ebben a két elmélet egymást kiegészíti és a fizikai problémák matematikai szempontból különösen egyszerűen ragadhatók meg.

Azt is meg kell említenünk (noha nem tartozik közvetlenül tárgyunkhoz), hogy miután GOUDSMIT és UHLENBECK felfedezték az elektron spinjét és mágneses momentumát, a korábbi kvantumelmélet majdnem minden nehézsége elszlott, s ma már legalább olyan jó, mint kielégítő mechanikai rendszer birtokában vagyunk. Megjegyezzük azonban, hogy az elméletet az elektrodinamikával és a relativitáselmélettel még nem sikerült a korábban említett egységbe foglalni, de legalább megvan az egyetemesen érvényes mechanika, amelybe a kvantumtörvények természetes módon illenek bele és amely kísérleteink többségét kielégítően megmagyarázza.¹⁰

2. A kvantummechanika első megfogalmazásai

Bevezetésként röviden vázoljuk a Heisenberg—Born—Jordan-féle „mátrixmechanikát” és SCHRÖDINGER „hullámmechanikáját”.

Mindkét elmélet kiindulópontja a $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ Hamilton-függvénnyel jellemzett klasszikus mechanikai probléma. (Ez, amint azt a mechanika tankönyvek részletezik, a következőt jelenti: legyen a rendszer k szabadsági fokú, vagyis jellemezze valamely állapotát a k számú q_1, \dots, q_k koordináta számszerű értéke. Az energia a koordinátáknak és azok időderiváltjainak függvénye:

$$E = L(q_1, \dots, q_k, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k),$$

ez általában a q_1, \dots, q_k deriváltak másodfokú függvénye. A q_1, \dots, q_k koordináták p_1, \dots, p_k konjugált impulzusait a

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1}, \dots, p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$$

összefüggések adják meg. Ezek a fenti feltevés szerint a $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k$ -k lineáris függvényei. Ha szükséges, a q_1, \dots, q_k -kat p_1, \dots, p_k segítségével kiküszöbölhetjük, tehát

$$E = L(q_1, \dots, q_k, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k) = H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k).$$

Ez a H a Hamilton-függvény.) Mindkét elméletben e Hamilton-függvény segítségével kell a rendszer igazi — vagyis kvantummechanikai — viselkedését felderíteni. Először is meg kell határoznunk¹¹ a lehetséges energiaszinteket, majd az ezeknek megfelelő „stacionárius állapotokat”, ki kell számítani az „átmeneti valószínűségeket” stb.¹²

A mátrixmechanika a probléma megoldására a következő utasítást adja: fel kell kutatni a $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ mátrixok¹³ ama rendszerét, amely először eleget tesz a

$$\left. \begin{aligned} Q_m Q_n - Q_n Q_m = 0, \quad P_m P_n - P_n P_m = 0, \\ P_m Q_n - Q_n P_m = \begin{cases} 0, & \text{ha } m \neq n, \\ \frac{h}{2\pi i} 1, & \text{ha } m = n \end{cases} \end{aligned} \right\} (m, n = 1, \dots, k)$$

összefüggéseknek és másodsor, amelyre a

$$W = H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$$

mátrix diagonális. (Nem megyünk bele annak részleteibe, hogy honnan eredtek ezek az egyenletek, különösen az első csoport, az ún. „felcserélési szabályok”, amelyek eme elmélet egész nem kommutatív mátrixkalkulusán uralkodnak. E tárgykör kimerítő tárgyalását az olvasó az 1. jegyzetben felsorolt művekben megtalálhatja. A h a Planck-állandó.) W -nek w_1, w_2, \dots diagonális elemei a rendszer megengedett energiaszintjei. A Q_1, \dots, Q_k mátrixok $q_{mn}^{(1)}, \dots, q_{mn}^{(k)}$ mátrixelemei szolgáltatják — bizonyos szabályok szerint — a w_m energiájú m -edik állapotból az w_n energiájúba ($w_m > w_n$) sugárzás kibocsátásával történő átmenet valószínűségét.

Meg kell még jegyeznünk, hogy a

$$W = H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$$

mátrixot a $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ mátrixok és a

$$H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$$

klasszikus mechanikai Hamilton-függvény nem határozza meg teljesen, mivel Q_i és P_k nem mind cserélhetők fel egymással (ha összeszorozzuk őket), míg a klasszikus mechanikai értelemben $p_1 q_1$ és $q_1 p_1$ között a $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ függvényben nincs értelme különbséget tenni. Ezért H tagjaiban — s ez H klasszikus jelentéséből nem hámozható ki — a q_i -k és p_k -k sorrendjét meg kell adnunk. Ezt az eljárást — noha egészen általánosan nem határozták meg — a fontosabb speciális esetekre azonban ismerjük. (A legegyszerűbb esetben, amikor a vizsgált rendszer részecskéből áll s ezért $k = 3v$ számú q_1, \dots, q_{3v} koordinátája van, például a μ -edik részecske ($\mu = 1, 2, \dots, v$) Descartes-koordinátái $q_{3\mu-2}, q_{3\mu-1}, q_{3\mu}$, és a részecskék kölcsönhatását $V(q_1, \dots, q_{3v})$ alakú potenciális energia írja le, akkor a fenti probléma nem merül fel. Ekkor a klasszikus Hamilton-függvény a következő:

$$H(q_1, \dots, q_{3v}, p_1, \dots, p_{3v}) = \sum_{\mu=1}^v \frac{1}{2m_\mu} (p_{3\mu-2}^2 + p_{3\mu-1}^2 + p_{3\mu}^2) + V(q_1, \dots, q_{3v}),$$

ahol m_μ a μ -edik részecske tömege, $p_{3\mu-2}, p_{3\mu-1}, p_{3\mu}$ pedig impulzusának komponensei. Ennek jelentése a $Q_1, \dots, Q_{3v}, P_1, \dots, P_{3v}$ mátrixok behelyettesítése után is világos, a potenciális energia sem jelent nehézséget, hiszen Q_1, \dots, Q_{3v} felcserélhető egymással.) Fontos, hogy csak hermitikus mátrixokat használhatunk, vagyis olyan $A = \{a_{mn}\}$ mátrixokat, amelyekre $a_{mn} = \overline{a_{nm}}$ (az a_{mn} elemek komplexek is lehetnek!).

Így $H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$ szükségképpen hermitikus, ha $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ is az. A tényezők sorrendjében bizonyos megkötések adódnak, de az előbb említett probléma teljesen nem oldódik meg; e megkötések nem elégségesek ahhoz, hogy $H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$ -t a klasszikus $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ -ből egyértelműen meghatározzuk.¹⁴

Ezzel szemben a hullámmechanika szabályai a következők: képezzük először a $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ Hamilton-függvényt, majd a

$$H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_2}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right) \psi(q_1, \dots, q_k) = \lambda \psi(q_1, \dots, q_k)$$

differenciálegyenletet a konfigurációs téren értelmezett $\psi(q_1, \dots, q_k)$ függvénnyel (nem a fázistéren értelmeztük ψ -t: a p_1, \dots, p_k ψ -nek nem változója). Könnyen érthető módon a $H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right)$ funkcionáloperátorként tekintendő. Így például ez az operátor az előbbi esetben a következő:

$$H(q_1, \dots, q_{3\nu}, p_1, \dots, p_{3\nu}) = \sum_{\mu=1}^{\nu} \frac{1}{2m_{\mu}} (p_{3\mu-2}^2 + p_{3\mu-1}^2 + p_{3\mu}^2) + V(q_1, \dots, q_{3\nu}),$$

s ez a $\psi(q_1, \dots, q_{3\nu})$ függvényt a

$$\sum_{\mu=1}^{\nu} \frac{1}{2m_{\mu}} \left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial q_{3\mu-2}^2} \psi + \frac{\partial^2}{\partial q_{3\mu-1}^2} \psi + \frac{\partial^2}{\partial q_{3\mu}^2} \psi\right) + V\psi$$

függvénybe transzformálja (elhagytuk a $q_1, \dots, q_{3\nu}$ változót). A $q_1 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}$ operáció különbözik a $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} q_1$ operációtól,¹⁵ s így itt is felmerül a

$H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ függvényében szereplő p_m és q_m mennyiségek határozatlan sorrendű szorzataiból adódó bizonytalanság. Schrödingernek sikerült azonban variációs elv segítségével e bizonytalanságot kiküszöbölnie, s pedig úgy, hogy a variációs elv önadjungált egyenletet szolgáltatott.¹⁶

E differenciálegyenlet (a „hullámegyenlet”) sajátérték-probléma jellegű, amennyiben λ -t sajátérték-paraméterként értelmezzük és amennyiben megköveteljük, hogy a konfigurációs térben a $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k)$ sajátfüggvény legyen reguláris és egyértékű, valamint, hogy tűnjék el a q_1, \dots, q_k tér határain. A hullámelmélet értelmében a λ sajátértékek (mind a diszkrét, mind a folytonos spektrumban)¹⁷ a megengedett energiaszintek. Az ezeknek megfelelő (komplex) sajátfüggvények (BOHR értelmezése szerint) a rendszer stacionárius állapotaihoz tartoznak. ν elektronból álló rendszernél ($k=3\nu$ mint előbb, e az elektron töltése) a μ -edik elektronnak az x, y, z pontban mért töltéssűrűségét az

$$e \int \dots \int |\psi(q_1, \dots, q_{3\mu-3}, x, y, z, q_{3\mu+1}, \dots, q_{3\nu})|^2 dq_1 \dots dq_{3\mu-3} dq_{3\mu+1} \dots dq_{3\nu}$$

(3 ν -3)-szoros

kifejezés szolgáltatja, vagyis SCHRÖDINGER szerint úgy kell az elektront elképzelni, mintha szét volna „kenve” az egész $x, y, z (=q_{3\mu-2}, q_{3\mu-1}, q_{3\mu})$ térben. (A teljes töltés e , így ψ -t az

$$\int \dots \int_{(3\nu)\text{-szörös}} |\psi(q_1, \dots, q_{3\nu})|^2 dq_1 \dots dq_{3\nu} = 1$$

feltétellel normálnunk kell. Itt mind a 3ν változóra kell integrálni. Ugyanez az egyenlet adódik az összes $\mu = 1, 2, \dots, \nu$ esetben.)

A hullámmechanika szerint, olyan rendszereken is végezhető megfigyelés, amelyek nem a Bohr-féle stacionárius állapotokban vannak.¹⁸ Ha t_0 az állapot nem stacionárius, vagyis időben változik, akkor a $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k; t)$ a t időt tartalmazza és változását a

$$H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right) \psi(q_1, \dots, q_k; t) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_1, \dots, q_k; t) \quad 19$$

differenciálegyenlet írja le. Eszerint ψ tetszőlegesen adható meg $t = t_0$ -ban, és ezzel tetszőleges t -ben egyértelműen meghatározódik. Voltaképpen még a stacionárius ψ is időfüggő; a két Schrödinger-egyenlet összehasonlításából látszik, hogy az időfüggés ilyenkor

$$\psi(q_1, \dots, q_k; t) = e^{-\frac{2\pi i}{h} \lambda t} \psi(q_1, \dots, q_k),$$

vagyis t csupán olyan egységnyi abszolút értékű tényezőben fordul elő, amely q_1, \dots, q_k -től független (tehát a konfigurációs térben állandó), s így például az előbb definiált töltéssűrűség állandó. (Általában sejthető — s ez később részletesebb megfontolások alapján megerősítést nyert —, hogy a ψ egységnyi abszolút értékű és a konfigurációs térben állandó tényezője megfigyelhetetlen).

Mint hogy az első differenciálegyenlet sajátfüggvényei teljes ortogonális rendszert alkotnak,²⁰ így minden $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k)$ e függvényrendszer szerint kifejtethető. Ha ψ_1, ψ_2, \dots az (időtől független) sajátfüggvények és $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ a megfelelő sajátértékek, akkor e kifejtés

$$\psi(q_1, \dots, q_k) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(q_1, \dots, q_k). \quad 21$$

Ha ψ még az időtől is függ, akkor az a_n együtthatók tartalmazni fogják a t -t (a ψ_1, ψ_2, \dots sajátfüggvényeket viszont itt és a következőkben mindenütt az időtől függetlennek kell tekinteni). Ezért, ha a szóban forgó $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k)$ voltaképpen egy $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k; t_0)$, akkor a

$$\psi = \psi(q_1, \dots, q_k; t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \psi_n$$

függvényre kapjuk, hogy

$$H\psi = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) H\psi_n = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \lambda_n \psi_n,$$

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \psi = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\hbar}{2\pi i} \dot{a}_n(t) \psi_n,$$

s a két jobb oldal együtthatóit egyenlővé téve:

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \dot{a}_n(t) = -\lambda_n a_n(t), \quad a_n(t) = c_n e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \lambda_n t},$$

tehát

$$a_n(t) = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \lambda_n (t-t_0)} a_n(t_0) = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \lambda_n (t-t_0)} a_n$$

és

$$\psi = \psi(q_1, \dots, q_k; t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \lambda_n (t-t_0)} a_n \psi_n(q_1, \dots, q_k)$$

Ha tehát ψ nem stacionárius, vagyis akár csak egyetlen a_n nem tűnik el, akkor ψ a t változótól már nem csupán egy egységnyi abszolút értékű, térben állandó tényezőn keresztül függ. Ezért általában a töltéssűrűségek is változnak, tehát elektromos rezgés is létrejöhet.²²

Látható, hogy mind az alapvető elképzelések, mind pedig a gyakorlati módszerek jelentősen különböznek a két elméletben. Ennek ellenére kezdettől fogva megegyező eredményeket szolgáltatottak, még akkor is, ha a kvantummechanika régebbi fogalmaihoz mérve a részletes számítások újszerűek voltak.²³ E különös helyzetre — amint arra az I. 1. fejezetben már utaltunk — SCHRÖDINGERnek az a bizonyítása derített fényt,²⁴ mely szerint a két elmélet matematikailag egyenértékű. Most, miközben megvilágítjuk a Dirac—Jordan-féle általános transzformációelméletet, figyelmünket eme ekvivalencia-bizonyításra összpontosítjuk.

3. A két elmélet ekvivalenciája: a transzformációelmélet

A mátrixelmélet alapfeladata az, hogy megtaláljuk azokat a $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ mátrixokat, amelyek egyrészt kielégítik az I. 2. fejezetben felírt felcserélési relációkat, másrészt pedig, amelyeknek bizonyos $H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$ függvénye diagonális mátrix. E feladatot már az első publikációjukban BORN és JORDAN két részre osztotta.

Először olyan $\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k$ mátrixokat kell találni, amelyek csupán a felcserélési összefüggéseket elégítik ki. Ez könnyen végrehajtható,²⁵ ám általában ilyenkor

$$\bar{H} = H(\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k)$$

még nem diagonális mátrix. Ekkor a helyes megoldások a

$$Q_1 = S^{-1} \bar{Q}_1 S, \dots, Q_k = S^{-1} \bar{Q}_k S;$$

$$P_1 = S^{-1} \bar{P}_1 S, \dots, P_k = S^{-1} \bar{P}_k S$$

alakban keresendők. Itt S tetszőleges mátrix (attól eltekintve, hogy léteznie kell az S^{-1} inverz mátrixnak, amelyre $S^{-1}S = SS^{-1} = 1$). A $\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k$ felcserélési szabályai érvényben maradnak $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ -ra is (mégpedig S tulajdonságai értelmében azonosan);

$$\bar{H} = H(\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k)$$

pedig a

$$H = S^{-1}\bar{H}S = H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k) \quad 26$$

mátrixba megy át. Így S -re csak az a megkötés, hogy adott \bar{H} -ra $S^{-1}\bar{H}S$ legyen diagonális. (Természetesen annak is utána kellene nézni, hogy vajon mind Q_1 mind pedig $S^{-1}\bar{Q}_1S$ stb. hermitikus-e. Részletesebb vizsgálattal azonban kimutatható, hogy ezt az újabb S -re vonatkozó megkötést később mindig ki lehet elégíteni s így bevezető megfontolásainkban nem foglalkozunk vele.)

Tehát az adott \bar{H} -t az $S^{-1}\bar{H}S$ képlet alapján diagonális alakra kell transzformálni. Fogalmazzuk meg pontosan, hogy ez mit jelent.

Jelölje $h_{\mu\nu}$ a \bar{H} mátrix, $s_{\mu\nu}$ pedig a keresett S mátrix elemeit. Legyen w_μ az ugyancsak ismeretlen H diagonális mátrix diagonális eleme, az általános elem tehát $w_\mu \delta_{\mu\nu}$.²⁷

A $H = S^{-1}\bar{H}S$ így is írható: $SH = \bar{H}S$; ez pedig azt jelenti (a mátrixszorzás jól ismert szabályát felhasználva és az egyenlet két oldalának megfelelő elemeit egyenlővé téve), hogy

$$\sum_{\nu} s_{\mu\nu} \cdot w_\nu \delta_{\nu\rho} = \sum_{\nu} h_{\mu\nu} \cdot s_{\nu\rho},$$

vagyis

$$\sum_{\nu} h_{\mu\nu} \cdot s_{\nu\rho} = w_\rho \cdot s_{\mu\rho}.$$

Az S mátrix ρ -adik oszlopának elemei $s_{1\rho}, s_{2\rho}, \dots$ ($\rho = 1, 2, \dots$). Látható tehát, hogy ezek az oszlopvektorok és a H mátrix megfelelő w_ρ diagonális elemei külön-külön megoldásai a

$$\sum_{\nu} h_{\mu\nu} x_\nu = \lambda \cdot x_\mu \quad (\mu = 1, 2, \dots)$$

sajátértékfeladatnak. (Az $x_1 = x_2 = \dots = 0$ triviális megoldást természetesen kizárjuk.) Valóban $x_\nu = s_{\nu\rho}$, $\lambda = w_\rho$ ilyen megoldás. (Az $x_\nu \equiv 0$, vagyis $s_{\nu\rho} \equiv 0$ (minden ν -re) valóban nem engedhető meg, mert ekkor S -nek ρ -adik oszlopa azonosan eltűnnék, ami lehetetlen, mert S -nek létezik az S^{-1} inverze.) Érdemes megjegyezni, hogy lényegében csak ezek a megoldások léteznek.

A fenti egyenlet valójában a következőt jelenti: az $x = \{x_1, x_2, \dots\}$ vektornak λ -szorosát kapjuk, ha azt \bar{H} -sal transzformáljuk. Az $x = \{x_1, x_2, \dots\}$ vektort S^{-1} -nel transzformálva az $y = \{y_1, y_2, \dots\}$ vektort kapjuk. Az y -t a H -val transzformálva ugyanazt kapjuk, mint akkor, amikor x -et a

$$HS^{-1} = S^{-1}\bar{H}S \cdot S^{-1} = S^{-1} \cdot \bar{H}$$

mátrixszal transzformáljuk, ez tehát λx -nek transzformáltja S^{-1} -nel, vagyis λy . A $H y$ komponensei

$$\sum_{\nu} w_{\mu} \delta_{\mu\nu} y_{\nu} = w_{\nu} y_{\nu},$$

λy komponensei pedig a λy_{μ} -k. Kell tehát, hogy $w_{\mu} y_{\mu} = \lambda y_{\mu}$, az összes $\mu = 1, 2, \dots$ esetén, vagyis, hogy $y_{\mu} = 0$ valahányszor $w_{\mu} \neq \lambda$. Legyen η^{ρ} az a vektor, amelynek ρ -adik komponense 1, az összes többi pedig 0. Ekkor y ama η^{ρ} -k lineáris kombinációja, amelyekre $w_{\rho} = \lambda$, tehát például zérus akkor, ha ilyen nincs. Az x úgy áll elő, hogy y -ra S -et alkalmazunk, ezért az nem más, mint a lineáris kombinációi az előző η^{ρ} -k S -sel való transzformáltjainak. Az $S\eta^{\rho}$ -nak μ -edik komponense (tekintve, hogy η^{ρ} -nak ν -edik komponense $\delta_{\nu\rho}$)

$$\sum_{\nu} s_{\mu\nu} \delta_{\nu\rho} = s_{\mu\rho}.$$

Az S -nek ρ -adik oszlopát, $\{s_{1\rho}, s_{2\rho}, \dots\}$ -t vektorként tekintve, az x mindazon oszlopok lineáris kombinációja, amelyekre $w_{\rho} = \lambda$, tehát például zérus, ha ilyen nem fordul elő. Következésképpen állításunkat bebizonyítottuk: a lehetséges sajátértékek w_1, w_2, \dots ; az $x_{\nu} = s_{\nu\rho}$ és $\lambda = w_{\rho}$ lényegében az egyedüli lehetséges megoldás.

Ez nagyon fontos, mert így nem csupán a sajátérték-feladat minden megoldását határozhatjuk meg S és H ismeretében, hanem fordítva, a sajátérték-feladat teljes megoldásával meghatározhatjuk S -et és H -t. A H esetében például a w_{μ} -k nem egyebek, mint a λ megoldások, és minden ilyen λ annyiszor fordul elő a w_1, w_2, \dots sorozatban, ahány lineárisan független x_1, x_2, \dots megoldás létezik,²⁸ így w_1, w_2, \dots már meghatározódik a sorrendtől eltekintve.²⁹

A mátrixelmélet alapfeladata tehát az

$$\mathbf{E}_1 \cdot \quad \sum_{\nu} h_{\mu\nu} x_{\nu} = \lambda x_{\mu} \quad (\mu = 1, 2, \dots)$$

sajátérték-egyenlet megoldása.

Térjünk át most a hullámelméltre. Itt az alapegyenlet az

$$\mathbf{E}_2 \cdot \quad H\varphi(q_1, \dots, q_k) = \lambda\varphi(q_1, \dots, q_k)$$

hullámeqyenlet, amelyben H a már megvizsgált differenciáloperátor. Keressük az összes $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ és λ megoldást a $\varphi(q_1, \dots, q_k) = 0$ triviális esettől eltekintve. A feladat hasonló \mathbf{E}_1 -hoz: az x_1, x_2, \dots sorozat, amely a nem folytonos ν változó (ahol a változó az $1, 2, \dots$ értékeket veheti fel) x_{ν} függvényének tekinthető, megfelel a $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ -nak, amely viszont a q_1, \dots, q_k folytonos változók függvénye. A λ mindkét esetben ugyanazt a szerepet játssza. Az

$$x_{\mu} \rightarrow \sum_{\nu} h_{\mu\nu} x_{\nu}$$

transzformáció azonban nem nagyon hasonlít a

$$\varphi(q_1, \dots, q_k) \rightarrow H\varphi(q_1, \dots, q_k)$$

leképezéshez. Hogyan lehet itt mélyebb analógiát találni?

A v indexet változónak tekintettük és a k számú q_1, \dots, q_k változónak feleltettük meg, tehát pozitív egészt hoztunk kapcsolatba a k -dimenziós konfigurációs tér (ezt mostantól Ω -nak nevezzük) egy pontjával. Nem várható hát, hogy a \sum_v összegként

vihető át Ω -ba. Inkább az várható, hogy a helyes analógia az $\int_{\Omega} \dots dq_1 \dots dq_k$

lesz (ezt a $dv = dq_1 \dots dq_k$ térfogatelemmel röviden így írhatjuk: $\int_{\Omega} \dots dv$). A két

index típusú változótól függő $h_{\mu\nu}$ mátrixelemnek a

$$h(q_1, \dots, q_k, q'_1, \dots, q'_k)$$

függvény felel meg, ebben q_1, \dots, q_k és q'_1, \dots, q'_k egymástól függetlenül a teljes Ω -t futja be. Az

$$x_{\mu} \rightarrow \sum_v h_{\mu\nu} x_{\nu}, \text{ vagy másként az } x_{\nu} \rightarrow \sum_{v'} h_{\nu v'} x_{v'}$$

transzformáció a

$$\varphi(q_1, \dots, q_k) \rightarrow \int_{\Omega} h(q_1, \dots, q_k, q'_1, \dots, q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k$$

kifejezésbe megy át.

Az E_1 sajátérték-problémát így is írhatjuk:

$$E_1. \quad \sum_{v'} h_{vv'} x_{v'} = \lambda x_v,$$

ezt így kellene átírni:

$$E_3. \quad \int_{\Omega} h(q_1, \dots, q_k, q'_1, \dots, q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k = \lambda \varphi(q_1, \dots, q_k).$$

Az E_3 . típusú sajátérték-feladatot, mely integrálegyenlet néven ismeretes a matematikában, már alaposan megvizsgálták és valóban kitűnt, hogy az messzemenően hasonlatos az E_1 . feladathoz.³⁰

Sajnos azonban E_2 . nem ilyen alakú és csak akkor hozható ilyen alakra, ha a

$$H = H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right)$$

differenciáloperátorhoz található olyan $h(q_1, \dots, q_k, q'_1, \dots, q'_k)$ függvény, hogy

$$I. \quad H\varphi(q_1, \dots, q_k) = \int_{\Omega} h(q_1, \dots, q_k, q'_1, \dots, q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k$$

azonosan [vagyis minden $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ -ra] teljesüljön. Ha létezik ilyen $h(q_1, \dots, q_k, q'_1, \dots, q'_k)$, akkor azt a H funkcionáloperátor „magjának” nevezzük, H ilyenkor „integráloperátor”.

Ilyen transzformáció viszont általában nem lehetséges, vagyis a H differenciáloperátorok általában nem integráloperátorok. Még a legegyszerűbb funkcionáloperátor, amelynek egységoperátor a neve és φ -t önmagába transzformálja, sem ilyen. Győződjünk meg erről! Legyen $k=1$ és keressük a megfelelő $h(q, q')$ függvényt, vagyis követeljük meg, hogy

$$\Delta_1. \quad \varphi(q) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} h(q, q') \varphi(q') dq'$$

legyen. Alkalmazzuk ezt a $\varphi(q + q_0)$ függvényre és legyen $q = 0$, továbbá vezessük be a $q'' = q' + q_0$ integrációs változót! Ekkor

$$\varphi(q_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(0, q'' - q_0) \varphi(q'') dq''.$$

Írjunk most q_0 és q'' helyébe $q-t$, illetőleg $q'-t$, ekkor látható, hogy $h(q, q')$ mellett még $h(0, q' - q)$ is megoldása a feladatnak, tehát feltehető, hogy $h(q, q')$ csak $q' - q$ -tól függ. Így az is megkövetelhető, hogy

$$\Delta_2. \quad \varphi(q) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} h(q' - q) \varphi(q') dq', \quad [(h(q, q') = h(q' - q)].$$

Ha most $q = 0$, akkor ez ilyen alakú:

$$\Delta_3. \quad \varphi(0) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} h(q) \varphi(q) dq.$$

A $\varphi(q)$ -t $\varphi(-q)$ -val helyettesítve látható, hogy $h(q)$ -val együtt $h(-q)$ is megoldás. Megoldás tehát a $h_1(q) = \frac{1}{2}[h(q) + h(-q)]$ páros függvény is.

Világos, hogy ezek a követelmények nem teljesíthetők. Legyen ugyanis $\varphi(q) > 0$ $q \geq 0$ -ra és $\varphi(0) = 0$, ekkor Δ_3 . szerint $h(q) = 0$ ha $q \geq 0$.³¹ De ha $\varphi(q) \equiv 1$ -et választjuk

$$\int_{-\infty}^{+\infty} h(q) dq = 1,$$

míg az előző választásból levont tanulság szerint

$$\int_{-\infty}^{+\infty} h(q) dq = 0.$$

Mindazáltal DIRAC felteszi, hogy létezik ilyen függvény:

$$\Delta_4. \quad \delta(q) = 0, \quad \text{ha } q \geq 0 \text{ és } \delta(q) = \delta(-q), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(q) dq = 1.$$

Így már kielégíthető lenne Δ_3 . (tehát Δ_1 . és Δ_2 . is):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(q) \delta(q) dq = \varphi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(q) dq +$$

$$+ \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(q) [\varphi(q) - \varphi(0)] dq = \varphi(0) \cdot 1 + \int_{-\infty}^{+\infty} 0 \cdot dq = \varphi(0).$$

Ezt úgy kell elképzelni, hogy e függvény az origótól eltekintve mindenütt zérus, de ott olyan erősen végtelen, hogy $\delta(q)$ integrálja mégis 1.³²

Ha ezt a fikciót egyszer elfogadtuk, akkor már a legkülönbözőbb differenciáloperátorok is integráloperátorként írhatók fel, csak még $\delta(q)$ mellett annak deriváltjait is be kell vezetni. Ekkor

$$\frac{d^n}{dq^n} \varphi(q) = \frac{d}{dq^n} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(q-q') \varphi(q') dq' =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^n}{\partial q^n} \delta(q-q') \varphi(q') dq' = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(n)}(q-q') \varphi(q') dq',$$

$$q^n \varphi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(q-q') q^n \varphi(q') dq' = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(q-q') q'^n \varphi(q') dq'.$$

Vagyis $\frac{d^n}{dq^n}$ és q^n magja $\delta^{(n)}(q-q')$, illetőleg $\delta(q-q')q^n$. E séma szerint bonyolultabb differenciáloperátorok magjai is vizsgálhatók. Több változó esetén a deltafüggvények szorzata vezet célhoz, például:

$$\int_{\Omega} \dots \int \delta(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) \dots \delta(q_k - q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} [\dots [\int_{-\infty}^{+\infty} [\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(q'_1, \dots, q'_k) \delta(q_1 - q'_1) dq'_1] \delta(q_2 - q'_2) dq'_2] \dots] \times$$

$$\times \delta(q_k - q'_k) dq'_k = \int_{-\infty}^{+\infty} [\dots [\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(q_1, q'_2, \dots, q'_k) \delta(q_2 - q'_2) dq'_2] \dots] \times$$

$$\times \delta(q_k - q'_k) dq'_k = \dots = \varphi(q_1, \dots, q_k),$$

$$\int_{\Phi} \dots \int \delta'(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) \dots \delta(q_k - q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k =$$

$$= \frac{d}{dq_1} \int_{\Omega} \dots \int \delta(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) \dots \delta(q_k - q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k =$$

$$= \frac{d}{dq_1} \varphi(q_1, \dots, q_k), \quad \text{és így tovább.}$$

Ezért az integráleroállítás a gyakorlatban minden operátorra felírható.

E reprezentáció birtokában az E_1 - és E_3 -feladat analógiája teljessé válik. A v, v' ; \sum_v ; x helyébe rendre $q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k; \int \dots \int_{\Omega} \dots dq'_1 \dots dq'_k; \varphi$ kerül.

Mivel a $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ függvény az x vektornak felel meg, a $h(q_1, \dots, q_k, q'_1, \dots, q'_k)$ mag szükségképpen a $h_{vv'}$ mátrix megfelelője. Hasznosabb azonban, ha magát a magfüggvényt tekintjük mátrixnak, és a q_1, \dots, q_k -t a v -nek megfelelő sorindexnek, illetve a q'_1, \dots, q'_k -t pedig a v' -nek megfelelő oszlopindexnek. Így az 1, 2, ... számokkal jellemzett „értelmezési tartományú” diszkrét sorokkal és oszlopokkal rendelkező $[h_{vv'}]$ mátrixok mellett léteznek még a $[h(q_1, \dots, q_k, q'_1, \dots, q'_k)]$ mátrixok (a magok) is, ezek értelmezési tartománya a k változóval jellemzett teljes Ω .

Ez az analógia formálisnak tűnhet, valójában azonban nem az. A v és v' indexek az állapotter koordinátáinak tekinthetők, nevezetesen: ha ezek kvantumszámokat jelentenek a Bohr-elmélet értelmében: olyan számokat, amelyek a kvantumfeltételek megszorításai miatt diszkrétnek és a fázistérben a lehetséges pályákat jellemzik.

Nem kívánjuk tovább követni ezt a gondolatmenetet, amelyet DIRAC és JORDAN a kvantumfolyamatok egységes elméletévé kovácsolt. Az „illetlen” függvények [mint például a $\delta(x)$ és a $\delta'(x)$], amelyek ennek kiépítésében meghatározó szerepet játszottak, az általánosan használt matematikai módszerek területén kívül esnek, és a mi célunk éppen az, hogy a kvantummechanikát ez utóbbi módszerekkel írjuk le. Így áttérünk a két elmélet egyesítésének másik, SCHRÖDINGERTŐL származó eljárására.

4. A két elmélet ekvivalenciája: a Hilbert-tér

Az I. 3. fejezetben vázolt eljárással analógiát építettünk ki $Z = (1, 2, \dots)$ indexek „diszkrét” tere és a mechanikai rendszerek folytonos Ω állapottere (Ω k -dimenziós; k a klasszikus mechanikai szabadsági fokok száma) között. Nem meglepő, hogy ezt csak a matematikai formalizmus bizonyos mértékű megsértése árán érthettük el. A Z és Ω tér a valóságban egymástól erősen különbözik és minden olyan vállalkozás, amellyel a kettőt ilyen összefüggésbe kívánjuk hozni, szükségképpen komoly nehézségekbe ütközik.³³

Valójában ilyen kapcsolatban nem is a Z és az Ω tér áll egymással, hanem az ezeken a tereken értelmezett függvények, tehát az x_1, x_2, \dots sorozatok és a $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ függvények; az előbbiek Z -n, az utóbbiak Ω -n értelmezett függvények. Tulajdonképpen ezek játsszák a legfontosabb szerepet a kvantummechanika problémáiban.

A Schrödinger-féle elméletben lényeges, hogy az

$$\int_{\Omega} \dots \int |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

eggyel legyen egyenlő; ilyenkor φ fizikailag interpretálható (lásd az I. 2. fejezetet). A mátrixelméletben az x_1, x_2, \dots vektor játssza a lényeges szerepet (lásd az I. 3.-ban az E_1 feladatot). Az ilyen sajátérték-problémák Hilbert-féle elméletében e vektorra mindig fel kell tenni, hogy $\sum_v |x_v|^2$ véges (lásd a 30. jegyzetben szereplő hivatkozást).

Az is szokásos — tekintve, hogy az $x_v = 0$ triviális esetet kizártuk —, hogy x_v -t normáltnak tételezzük fel: $\sum_v |x_v|^2 = 1$. Világos, hogy ilyen módon korlátozódik a Z -n és Ω -n megengedhető függvények köre azokra, amelyekre

$$\sum_v |x_v|^2, \text{ illetve } \int_{\Omega} \dots \int |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

véges, mert csak ezekre tehető a \sum_v , illetve az $\int_{\Omega} \dots \int$ egyenlővé egygyel, vagyis csak

ezek normálhatók a szokásos értelemben úgy, hogy állandóval megszorozzuk őket.³⁴ Jelölje az ilyen függvények összességét F_Z , illetve F_{Ω} .

Ezekre a következő tétel érvényes (FISCHER és F. RIESZ³⁵): F_Z és F_{Ω} izomorfak egymással. Pontosabban ez a következőt jelenti: Egy-egy értelmű megfeleltetés létezik F_Z és F_{Ω} között, vagyis minden olyan x_1, x_2, \dots sorozathoz, amelyre $\sum_v |x_v|^2$ véges, tartozik olyan $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ függvény, amelyre az $\int_{\Omega} \dots \int |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$ véges és megfordítva. Ez a megfeleltetés

lineáris és izometrikus. A linearitás azt jelenti, hogy ha $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ -nak x_1, x_2, \dots , $\psi(q_1, \dots, q_k)$ -nak pedig y_1, y_2, \dots felel meg, akkor ax_1, ax_2, \dots és $x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots$ az $a\varphi(q_1, \dots, q_k)$ -nak, ill. $\varphi(q_1, \dots, q_k) + \psi(q_1, \dots, q_k)$ -nak a megfelelője. Az izometria azt jelenti, hogy ha x_1, x_2, \dots a $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ -hoz tartozik, akkor

$$\sum_v |x_v|^2 = \int_{\Omega} \dots \int |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k.$$

(Az izometria szó onnan ered, hogy ha, amint az szokásos, x_1, x_2, \dots -t és $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ -t vektornak tekintjük, akkor e vektorok „hossza”:

$$\sqrt{\sum_v |x_v|^2},$$

illetőleg

$$\sqrt{\int_{\Omega} \dots \int |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k}.$$

Ezenkívül még ha x_1, x_2, \dots és y_1, y_2, \dots felel meg $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ -nak, ill. $\psi(q_1, \dots, q_k)$ -nak, akkor

$$\sum_v x_v \bar{y}_v = \int_{\Omega} \dots \int \varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k$$

(és mindkét oldal abszolút konvergencia). Az izometriával kapcsolatban meg kell jegyeznünk, hogy megkövetelhetjük volna a

$$\sum_v x_v = \int_{\Omega} \dots \int \varphi(q_1, \dots, q_k) dq_1 \dots dq_k$$

teljesülését is, amellyel teljes analógiát teremthetnénk az egyik oldalon az összegezés és a másik oldalon az integrálás között, azonban a részletes vizsgálat azt mutatja, hogy a kvantummechanikában a \sum_v összegezés és az

$$\int_{\Omega} \dots \int \dots dq_1 \dots dq_k$$

integrálás csak x_v, \bar{y}_v , ill. $\varphi(q_1, \dots, q_k), \psi(q_1, \dots, q_k)$ típusú mennyiségekre fordul elő.

A következő fejezetben éppen a leglényegesebb az lesz, hogy miként deríthető fel megfeleltetés, így itt most nem foglalkozunk ezzel tovább. Hangsúlyozni kívánjuk azonban, hogy Z és Ω egymástól igen különbözik, köztük a közvetlen kapcsolat létesítése matematikailag megoldhatatlan nehézségekhez vezet. Az F_Z és F_{Ω} izomorf egymással, vagyis belső szerkezetükre nézve azonosak (vagyis bennük ugyanazon absztrakt tulajdonságok valósulnak meg különböző matematikai formában) — és voltaképpen ezekben (és nem Z -ben, vagy Ω -ban) sűrűsödik össze a mátrix-, illetőleg a hullámmechanika analitikai tartalma; tehát ez az izomorfia azt jelenti, hogy a két elméletnek szükségképpen mindig egyforma numerikus eredményeket kell szolgáltatnia. Más szóval ez az izomorfia vezet ahhoz, hogy a

$$\bar{H} = H(\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k)$$

mátrix, illetőleg a

$$H = H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right)$$

operátor egymásnak megfelelője. Mivel mindkettő ugyanolyan algebrai operációval kapható, egyrészt a \bar{Q}_l, \bar{P}_l ($l=1, 2, \dots, k$) mátrixokból, másrészt a $q_1, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$ ($l=1, 2, \dots, k$) funkcionáloperátorokból, azért elég megmutatni, hogy a q_l -nek a \bar{Q}_l mátrix, $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l}$ -nek a \bar{P}_l mátrix felel meg. \bar{Q}_l -re és \bar{P}_l -re azonban semmi egyebet nem követeltünk meg, mint az I. 2. fejezetben felírt felcserélési összefüggéseket:

$$\left. \begin{aligned} \bar{Q}_m \bar{Q}_n - \bar{Q}_n \bar{Q}_m &= 0, & \bar{P}_m \bar{P}_n - \bar{P}_n \bar{P}_m &= 0, \\ \bar{Q}_m \bar{P}_n - \bar{P}_n \bar{Q}_m &= \begin{cases} 0, & \text{ha } m \neq n, \\ \frac{h}{2\pi i} 1, & \text{ha } m = n \end{cases} \end{aligned} \right\} (m, n = 1, 2, \dots).$$

Ám ha a $q_1, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots$ operátoroknak megfelelő mátrixok is eleget tesznek ezeknek a kikötéseknek, akkor a $q_1, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots$ funkcionáloperátoroknak maguknak is megvannak ezek a tulajdonságai és ezek az F_Z -re való izomorf áttéréskor nem vesznek el.

Mintthogy az F_Z és az F_Ω rendszer izomorf, és a rajtuk felépített kvantummechanikai elméletek matematikailag egyenértékűek, elvárható, hogy egy egységes kvantumelmélet felépítése, amely független a kiválasztott formai keretek esetlegességeitől és amely csak a kvantummechanika tárgyyszerűen lényeges vonásait tartalmazza, akkor érhető el, amikor a belső, F_Z -ben és F_Ω -ban közös tulajdonságait mutatjuk ki és ezeket választjuk kiindulási pontként.

Az F_Z rendszer „Hilbert-tér” néven ismeretes. Ezért első feladatunk a „Hilbert-tér” alapvető tulajdonságainak vizsgálata, függetlenül F_Z vagy F_Ω speciális alakjától. Az e tulajdonságokkal jellemzett matematikai struktúra neve „absztrakt Hilbert-tér”. Ez, speciális esetben, ekvivalens módon testesül meg az F_Z -n, vagy az F_Ω -n végzett számításokban, de e számolásoknál az „absztrakt Hilbert-tér” az általános esetekben könnyebben kezelhető.

Célunk tehát az absztrakt Hilbert-tér leírása és a következő megállapítások szigorú bizonyítása:

1. Az absztrakt Hilbert-teret a lerögzített tulajdonságai egyértelműen jellemzik, tehát lényegesen különböző megvalósulásai nincsenek.

2. Tulajdonságai mind F_Z -re, mind pedig F_Ω -ra is jellemzők.

(Az I. 4. fejezetben csupán kvalitatíve elemzett sajátságokat még pontosabban meg kell vizsgálnunk.) Ha ezzel végeztünk, akkor az így elsajátított matematikai módszert felhasználjuk a kvantummechanika szerkezetének felépítésére.

II. AZ ABSZTRAKT HILBERT-TÉR

1. A Hilbert-tér definíciója

Most kivitelezzük az I. 4. fejezet végén felvázolt programot: meghatározzuk a Hilbert-teret, amely majd a kvantummechanika kezeléséhez szükséges matematikai alapot szolgáltatja, mégpedig az abban használatos fogalmak segítségével. E fogalmak jelentése ugyanaz az x_v ($v = 1, 2, \dots$) sorozatok „diszkrét” F_Z függvény terében és a $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ hullámfüggvények folytonos Ω terében (q_1, \dots, q_k a teljes Ω konfigurációs teret futja be). E fogalmak, amint már utaltunk rájuk, a következők:

α) „Szorzás skalárral”, vagyis a komplex a szám és a Hilbert-tér valamely f elemének szorzata: af . F_Z -ben x_v -ből így ax_v , F_Ω -ban $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ -ből a $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ keletkezik.

β) A Hilbert-tér valamely f és g elemének összeadása és kivonása $f \pm g$. Így F_Z -ben x_v -ből és y_v -ből $x_v \pm y_v$, F_Ω -ban $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ -ből és $\psi(q_1, \dots, q_k)$ -ből $\varphi(q_1, \dots, q_k) \pm \psi(q_1, \dots, q_k)$ keletkezik.

γ) A Hilbert-tér valamely f és g elemének „skaláris szorzata”. α)-tól és β)-tól eltérően e művelet (f, g) eredménye komplex szám és nem a Hilbert-tér valamely eleme. Így F_Z -ben x_v -ből és y_v -ből a $\sum_v x_v \bar{y}_v$ szám, F_Ω -ban pedig $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ -ből és

$\psi(q_1, \dots, q_k)$ -ből az

$$\int_{\Omega} \varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1, \dots, dq_k$$

szám keletkezik. (F_Z és F_Ω definíciója még kiegészítendő a megfelelő konvergencia-bizonyításokkal; ezeket a II. 3. fejezetben adjuk meg.)

A továbbiakban $f, g, \dots, \varphi, \psi, \dots$ jelöli majd a Hilbert-tér pontjait, a, b, \dots, x, y, \dots a komplex számokat, $k, l, m, \dots, \mu, \nu, \dots$ pedig az egész számokat. A Hilbert-teret \mathfrak{R}_∞ -nel is jelöljük (ez a „ ∞ -dimenziós euklideszi tér” rövidítése hasonlóan a szokásos \mathfrak{R}_n -hez, amely az n -dimenziós euklideszi tér rövidítése).

Vegyük észre, hogy az $af, f \pm g, (f, g)$ operációk éppen a vektoralgebra alpműveletei; az euklideszi geometriában a távolságokkal és a szögekkel, a pontmechanikában pedig az erővel és a munkával a számolást éppen ezek teszik lehetővé. A hasonlóság F_Z esetén világossá válik, ha \mathfrak{R}_∞ x_1, x_2, \dots pontjai helyett \mathfrak{R}_n -nek x_1, \dots, x_n pontjait tekintjük (ezekre az α), β), γ) műveletek hasonlóan definiálhatók). Az $n = 3$ esetén a közönséges tér szokásos műveleteire ismerünk rá.

Esetenként az x_1, x_2, \dots, x_n komplexust jobb nem pontnak, hanem a $0, \dots, 0$ pontból az x_1, \dots, x_n pontba mutató vektornak tekinteni. Az absztrakt Hilbert-tér definíciójánál az $af, f \pm g, (f, g)$ vektorműveleteket vesszük alapul. A vizsgálat, ahogy az majd kitűnik, \mathfrak{R}_∞ mellett minden \mathfrak{R}_n -re is kiterjed. Ezért nem teszünk \mathfrak{R}_∞ és \mathfrak{R}_n között különbséget s a szóbanforgó teret egyszerűen \mathfrak{R} -rel jelöljük.

Először is szögezzük le \mathfrak{R} -nek a vektorterekre jellemző tulajdonságait.³⁷

A. Az \mathfrak{R} lineáris tér.

Ez azt jelenti, hogy \mathfrak{R} -ben értelmezve van az $f+g$ összeadás és az af szorzás skalárral (f és g \mathfrak{R} -nek eleme, a komplex szám, $f+g$ és af \mathfrak{R} -nek eleme); \mathfrak{R} -nek van zérus eleme.³⁸ A vektoralgebra jól ismert szabályai érvényesek e térben:

$$\begin{array}{ll}
 f+g=g+f & \text{(az összeadás kommutatív),} \\
 (f+g)+h=f+(g+h) & \text{(az összeadás asszociatív),} \\
 (a+b)f=af+bf & \text{(a szorzás skalárral mindkét értelemben} \\
 a(f+g)=af+ag & \text{disztributív),} \\
 (ab)f=a(bf) & \text{(a szorzás asszociatív),} \\
 0 \cdot f=0, \quad 1 \cdot f=f & \text{(így szorzunk 0-val és 1-gyel).}
 \end{array}$$

Az itt nem szereplő szabályok ezen feltevések következményei. Ilyen például a zérusvektor szerepe az összeadásnál:

$$f+0=1 \cdot f+0 \cdot f=(1+0) \cdot f=1 \cdot f=f.$$

Ilyen a kivonás egyértelműsége. Legyen

$$-f=(-1) \cdot f, \quad f-g=f+(-g),$$

ekkor

$$\left. \begin{array}{l}
 (f-g)+g=(f+(-g))+g \\
 \quad =f+((-g)+g), \\
 (f+g)-g=(f+g)+(-g) \\
 \quad =f+(g+(-g)),
 \end{array} \right\} \begin{array}{l}
 =f+((-1) \cdot g+1 \cdot g) \\
 =f+((-1)+1) \cdot g \\
 =f+0 \cdot g=f+0=f.
 \end{array}$$

Ilyen a szorzás és a kivonás disztributív szabálya:

$$\begin{aligned}
 a(f-g) &=af+a(-g)=af+a((-1) \cdot g)= \\
 &=af+(a(-1)) \cdot g=af+((-1) \cdot a) \cdot g= \\
 &=af+(-1) \cdot (ag)=af+(-ag)=af-ag,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (a-b)f &=af+(-b) \cdot f=af+((-1) \cdot b) \cdot f= \\
 &=af+(-1) \cdot (bf)=af+(-bf)=af-bf.
 \end{aligned}$$

Mindezt nem érdemes tovább részletezni, világos, hogy a vektoralgebra szabályai érvényesek.

Ilyen módon bevezethető \mathfrak{R} -ben a lineáris függetlenség fogalma is, miként a vektoroknál:

1. *Definíció:* Az \mathfrak{R} -nek f_1, \dots, f_k elemei lineárisan függetlenek, ha az

$$a_1 f_1 + \dots + a_k f_k = 0$$

(a_1, \dots, a_k komplex számok) egyenletből következik, hogy $a_1 = \dots = a_k = 0$.

Bevezethető továbbá a vektoralgebrából ismert lineáris sokaság fogalma is (ilyen az origón áthaladó egyenes, sík stb.).

2. *Definíció:* Az \mathfrak{R} -nek \mathfrak{M} részhalma lineáris sokaság, ha tartalmazza az \mathfrak{M} -nek bármely k számú ($k=1, 2, \dots$) f_1, \dots, f_k eleméből képezett összes $a_1 f_1 + \dots + a_k f_k$ lineáris kombinációt.³⁹ Ha \mathfrak{A} az \mathfrak{R} -nek tetszőleges részhalma, akkor az $a_1 f_1 + \dots + a_k f_k$ lineáris kombinációk halmaza ($k=1, 2, \dots$; a_1, \dots, a_k komplex számok; f_1, \dots, f_k az \mathfrak{A} -nak tetszőleges elemei) lineáris sokaság, amely nyilvánvalóan tartalmazza \mathfrak{A} -t. Az is nyilvánvaló, hogy ez részhalma minden \mathfrak{A} -t tartalmazó lineáris sokaságnak. Ennek neve az „ \mathfrak{A} által kifeszített lineáris sokaság” és $\{\mathfrak{A}\}$ -val fogjuk jelölni.

Mielőtt e fogalomkörrel tovább foglalkoznánk, fogalmazzuk meg a vektoralgebra másik alapelvét; azt, hogy létezik skalárszorzat.

B. Az \mathfrak{R} -ben hermitikus skalárszorzat van értelmezve.

Ez azt jelenti, hogy ha f és g az \mathfrak{R} eleme, akkor tartozik hozzájuk olyan (f, g) komplex szám, amelynek tulajdonságai a következők:

$$(f' + f'', g) = (f', g) + (f'', g) \quad (\text{az első tényező disztributivitása}),$$

$$(a \cdot f, g) = a \cdot (f, g) \quad (\text{az első tényező és a számmal való szorzás asszociativitása}),$$

$$(f, g) = \overline{(g, f)} \quad (\text{a hermitikus szimmetria}),$$

$(f, f) \geq 0$ ⁴⁰; akkor és csakis akkor zérus, ha $f=0$ (definit forma).

A második tényezőre vonatkozó megfelelő összefüggések a hermitikus szimmetria miatt az első tényezőre felírt két tulajdonságból következnek (az f -et és a g -t fel kell cserélni és mindkét oldal komplex konjugáltját kell venni):

$$(f, g' + g'') = (f, g') + (f, g''),$$

$$(f, ag) = \bar{a}(f, g).$$

A skalárszorzat jelentősége igen nagy, mert segítségével távolságot tudunk definiálni.

Az euklideszi térben az f vektor hosszát így definiáljuk: $\|f\| = \sqrt{(f, f)}$ ⁴¹, az f és g pontok távolsága pedig $\|f-g\|$. Ennek mása a

3. *Definíció:* Az \mathfrak{R} f elemének hossza $\|f\| = \sqrt{(f, f)}$, f és g távolsága $\|f-g\|$.⁴²

Belátjuk, hogy e fogalom rendelkezik a távolság tulajdonságaival. Először bebizonyítjuk, hogy igaz az

1. Tétel: $|(f, g)| \leq \|f\| \cdot \|g\|$.

Bizonyítás: Először egy másik egyenlőtlenséget látunk be:

$$\|f\|^2 + \|g\|^2 - 2\operatorname{Re}(f, g) = (f, f) + (g, g) - (f, g) - (g, f) = (f - g, f - g) \geq 0,$$

vagyis

$$\operatorname{Re}(f, g) \leq \frac{1}{2}(\|f\|^2 + \|g\|^2),$$

(az u és v valós számból képezett $z = u + iv$ komplex számra $\operatorname{Re} z$ és $\operatorname{Im} z$ annak valós, illetőleg képzetes részét jelenti, tehát $\operatorname{Re} z = u$, $\operatorname{Im} z = v$). Ha az a pozitív valós számmal képezett af -et és $\frac{1}{a}g$ -t írjuk f , illetőleg g helyére, akkor, amint az könnyen belátható, a bal oldal nem változik, a jobb oldalra viszont azt kapjuk, hogy

$$\frac{1}{2}(a^2\|f\|^2 + \frac{1}{a^2}\|g\|^2).$$

E kifejezés nagyobb vagy egyenlő, mint $\operatorname{Re}(f, g)$, következésképpen a minimuma is az. A minimum $\|f\| \cdot \|g\|$; ezt pedig $f, g \neq 0$ esetén az

$$a = \sqrt{\frac{\|f\|}{\|g\|}}$$

helyen veszi fel, ha pedig $f=0$ vagy $g=0$, akkor az $a \rightarrow +\infty$, illetőleg az $a \rightarrow +0$ határértékeknél. Ezért

$$\operatorname{Re}(f, g) \leq \|f\| \cdot \|g\|$$

Ha ebben f -et $e^{i\alpha}f$ -fel (α valós) helyettesítjük, akkor a jobb oldal nem változik (mert

$$(af, af) = a\bar{a}(f, f) = |a|^2(f, f),$$

tehát

$$\|af\| = |a| \cdot \|f\|,$$

így, ha $|a|=1$, akkor $\|af\| = \|f\|$). A bal oldal viszont a

$$\operatorname{Re}(e^{i\alpha}(f, g)) = \cos \alpha \operatorname{Re}(f, g) - \sin \alpha \operatorname{Im}(f, g)$$

kifejezésbe megy át. Világos, hogy ennek maximuma

$$\sqrt{(\operatorname{Re}(f, g))^2 + (\operatorname{Im}(f, g))^2} = |(f, g)|,$$

amiből következik az

$$|(f, g)| \leq \|f\| \cdot \|g\|$$

állítás.

Következmény. Az egyenlőség akkor és csak akkor érvényes, ha f és g egy állandó (komplex) tényezőtől eltekintve egyenlő egymással.

Bizonyítás. A

$$\operatorname{Re}(f, g) \leq \frac{1}{2}(\|f\|^2 + \|g\|^2)$$

összefüggésben az egyenlőség akkor igaz, ha $(f-g, f-g)$ zérus, vagyis ha $f=g$. Amikor az

$$|(f, g)| \leq \|f\| \cdot \|g\|$$

összefüggésre térünk át, akkor f -et és g -t $e^{i\alpha}af$ -fel, illetőleg $\frac{1}{a}g$ -vel helyettesítettük, ha $f, g \neq 0$ (a, α valós; $a > 0$). Ha tehát ebben is az egyenlőség érvényes, akkor szükségképpen

$$e^{i\alpha}af = \frac{1}{a}g, \quad g = a^2e^{i\alpha}f = cf \quad (c \neq 0).$$

Ha pedig vagy f vagy g zérus, vagy $g=cf$, akkor világos, hogy az egyenlőség érvényes.

2. *Tétel.* $\|f\| \geq 0$ és csak akkor zérus, ha $f=0$. Továbbá

$$\|a \cdot f\| = |a| \cdot \|f\|$$

és

$$\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\|,$$

itt az egyenlőség akkor és csak akkor érvényes, ha az f és a g valós tényezőtől eltekintve egyenlő egymással.

Bizonyítás: Az első két állítás helyességét már beláttuk. A harmadik egyenlőtlen-
séget így bizonyítjuk be:

$$\begin{aligned} (f + g, f + g) &= (f, f) + (g, g) + (f, g) + (g, f) = \|f\|^2 + \|g\|^2 + 2\operatorname{Re}(f, g) \leq \\ &\leq \|f\|^2 + \|g\|^2 + 2\|f\| \cdot \|g\| = (\|f\| + \|g\|)^2, \end{aligned}$$

$$\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\|.$$

Ha pedig az egyenlőség érvényes, akkor $\operatorname{Re}(f, g)$ szükségképpen egyenlő $\|f\| \cdot \|g\|$ -vel, ami vagy úgy teljesül, hogy f vagy g zérus, vagy pedig úgy, hogy $g = a^2f = cf$ (c valós), ez a következmény bizonyításánál használt megfontolásainkból látszik. Fordítva világos, hogy ebben az esetben az egyenlőség érvényes.

A 2. *Tétel*ből azonnal következik, hogy az $\|f-g\|$ távolság a következő tulajdonságokkal rendelkezik: f és g távolsága csak akkor 0, ha $f=g$, máskor sosem. Az f és g távolsága ugyanakkora, mint a g és f távolsága. Az f és h távolsága vagy kisebb, mint f és g meg g és h távolságának összege, vagy egyenlő vele; az egyenlőség csak akkor igaz, ha $g = af + (1-a)h$ (a valós, $0 \leq a \leq 1$)⁴³. Az af és ag távolsága f és g távolságának $|a|$ -szerese.

A távolságnak éppen ezek azok a tulajdonságai, amelyek lehetővé teszik a geometriában (és a topológiában), hogy a folytonosság, határérték, határpont stb. fogalmát a távolság fogalmának alapján megalkossuk. Ezt felhasználva definiáljuk a következőket:

Az \mathfrak{R} -en értelmezett $F(f)$ függvény (f \mathfrak{R} -nek eleme, és e függvény lehet olyan, hogy értéke ismét \mathfrak{R} eleme, de lehet olyan is, hogy értéke komplex szám) folytonos

az \mathfrak{R} -nek f_0 pontjában, ha minden $\varepsilon > 0$ -ra létezik olyan $\delta > 0$, hogy ha $\|f - f_0\| < \delta$, akkor $\|F(f) - F(f_0)\| < \varepsilon$ vagy $|F(f) - F(f_0)| < \varepsilon$ (aszerint, hogy F értékei \mathfrak{R} pontjai, vagy komplex számok). Az ilyen függvény korlátos \mathfrak{R} -en, vagy \mathfrak{R} valamely adott részhalmazán, ha $\|F(f)\| < c$ vagy $|F(f)| < c$ (c megfelelően választott, rögzített állandó). Hasonló definíciók érvényesek több változó esetén is. Az f_1, f_2, \dots sorozat f -hez konvergál, vagy limesze f , ha az $\|f_1 - f\|, \|f_2 - f\|, \dots$ számok zérushoz konvergálnak. Valamely pont az \mathfrak{A} halmaz határpontja (\mathfrak{A} az \mathfrak{R} -nek részhalmaza), ha valamely \mathfrak{A} -ban fekvő sorozat limesze.⁴⁴ Az \mathfrak{A} -t zártnak nevezzük, ha tartalmazza valamennyi határpontját, az \mathfrak{A} -t mindenütt sűrűnek mondjuk, ha határpontjainak halmaza éppen \mathfrak{R} .

Be kell még bizonyítani, hogy $af, f + g, (f, g)$ folytonos minden változójában. Tekintve, hogy

$$\|a \cdot f - a \cdot f'\| = |a| \cdot \|f - f'\|$$

és

$$\|(f + g) - (f' + g')\| = \|(f - f') + (g - g')\| \leq \|f - f'\| + \|g - g'\|,$$

az első két függvény valóban folytonos. Továbbá, ha

$$\|f - f'\| < \varepsilon, \quad \|g - g'\| < \varepsilon$$

és ha $\varphi \equiv f' - f, \quad \psi \equiv g' - g$, akkor

$$\|(f, g) - (f', g')\| = \|(f, g) - (f + \varphi, g + \psi)\| = \|(\varphi, g) + (f, \psi) + (\varphi, \psi)\| \leq$$

$$\leq \|(\varphi, g)\| + \|(f, \psi)\| + \|(\varphi, \psi)\| \leq$$

$$\leq \|\varphi\| \cdot \|g\| + \|f\| \cdot \|\psi\| + \|\varphi\| \cdot \|\psi\| \leq \varepsilon(\|f\| + \|g\| + \varepsilon).$$

Ha $\varepsilon \rightarrow 0$, ez a kifejezés zérushoz tart és bármely $\delta > 0$ -nál kisebbé tehető.

Az **A.** és **B.** tulajdonság alapján, amint láttuk, nagyon sok mindent megállapíthatunk \mathfrak{R} -ről, ám ezek nem elégségesek ahhoz, hogy a különböző \mathfrak{R}_n -ek és \mathfrak{R}_∞ között különbséget tegyünk. Nem tettünk említést eddig a dimenziószámról. Ez a fogalom nyilvánvalóan kapcsolatban áll a lineárisan független vektorok maximális számával. Ha $n = 0, 1, 2, \dots$ ilyen maximum, akkor ezen n -ről a következőket állíthatjuk:

C⁽ⁿ⁾. Pontosan n lineárisan független vektor létezik.

Tehát n ilyen vektor mindig található, $n + 1$ azonban nem.

Ha nincs maximális n szám, akkor:

C^(\infty). Tetszőleges számú lineárisan független vektor létezik.

Tehát tetszőleges $k = 1, 2, \dots$ esetén található k ilyen vektor.

A **C.** így nem lényegesen új alapfeltevés: ha **A.** és **B.** érvényes, akkor vagy **C⁽ⁿ⁾.**, vagy pedig **C^(\infty).** szintén érvényes.

Attól függően kapunk más és más \mathfrak{R} teret, hogy melyiket fogadjuk el. Meglátjuk majd, hogy **C⁽ⁿ⁾.** esetében \mathfrak{R} az n -dimenziós (komplex) euklideszi tér minden tulajdonságával rendelkezik. A **C^(\infty).** viszont nem elég biztosíték arra, hogy \mathfrak{R} lényegében azonos legyen az \mathfrak{R}_∞ Hilbert-térrel. Ebben az esetben két további **D.** és

E. posztulátumra van még szükségünk. Pontosabban a helyzet a következő: megmutatjuk, hogy az **A.**, **B.**, $C^{(n)}$ tulajdonságokkal rendelkező \mathfrak{R} az \mathfrak{R}_n összes tulajdonságaival, többek között az alább kimondható **D.** és **E.** tulajdonságokkal is rendelkezik. (E két utóbbi ebben az esetben **A.**, **B.** és $C^{(n)}$ következménye.) Megmutatjuk aztán, hogy az **A.**, **B.**, $C^{(\infty)}$, **D.** és **E.** tulajdonságú \mathfrak{R} rendelkezik \mathfrak{R}_∞ összes tulajdonságával, de ebben az esetben **D.** és **E.** lényeges (tehát nem következménye **A.**, **B.** és $C^{(\infty)}$ -nek). Fogalmazzuk meg hát **D.**-t és **E.**-t, viszont a bizonyítást, hogy az összes \mathfrak{R}_n és az \mathfrak{R}_∞ rendelkezik ezekkel a tulajdonságokkal, később adjuk meg (lásd II. 3. fejezet).

D. Az \mathfrak{R} teljes.⁴⁵

Ez azt jelenti, hogy ha \mathfrak{R} -ben valamely f_1, f_2, \dots sorozat kielégíti a Cauchy-konvergenciakritériumot (mely szerint minden $\varepsilon > 0$ -hoz található olyan $N = N(\varepsilon)$, hogy ha $m, n \geq N$, akkor $\|f_m - f_n\| < \varepsilon$) akkor konvergens, vagyis létezik f limesze (e fogalom definícióját az előbb megadtuk).

E. Az \mathfrak{R} szeparábilis.

Ez azt jelenti, hogy van \mathfrak{R} -nek olyan f_1, f_2, \dots sorozata, amely mindenütt sűrű \mathfrak{R} -ben.

A II. 2. fejezetben, amint azt megígértük, e feltevések alapján felépítjük \mathfrak{R} „geometriáját” és megállapítjuk, hogy az vagy valamely \mathfrak{R}_n -nel vagy \mathfrak{R}_∞ -nel azonos.

2. A Hilbert-tér geometriája

Két definícióval kezdjük. Az első éppen annyi trigonometriát tartalmaz, amennyire majd szükségünk lesz; ez a derékszög — az ortogonalitás — fogalma.

4. *Definíció:* \mathfrak{R} -nek két, f és g eleme ortogonális egymásra, ha $(f, g) = 0$. Két lineáris sokaság, \mathfrak{M} és \mathfrak{N} ortogonális, ha \mathfrak{M} bármely eleme ortogonális \mathfrak{N} bármely elemére. A \mathfrak{D} halmaz ortonormált, ha \mathfrak{D} bármely f és g elemére

$$(f, g) = \begin{cases} 1, & \text{ha } f = g, \\ 0, & \text{ha } f \neq g \end{cases}$$

(vagyis bármely elempár ortogonális egymásra és minden elem hossza 1⁴⁶). A \mathfrak{D} -t teljesnek mondjuk, ha nem valódi részhalmaza egyetlen ortonormált halmaznak sem.⁴⁷

Vegyük észre, hogy ha a \mathfrak{D} ortonormált halmaz teljes, az azt jelenti, hogy nincs olyan f , $\|f\| = 1$, amelyik ortogonális lenne \mathfrak{D} -re (lásd a 46. jegyzetet). Ha f csupán zérustól különböző és ortogonális \mathfrak{D} -re, akkor az előbbieket érvényesek lennének f' -re, ahol

$$f' = \frac{1}{\|f\|} f$$

(természetesen $\|f\| > 0$), mert

$$\|f'\| = \frac{1}{\|f\|} \|f\| = 1,$$

s f' ortogonális \mathfrak{D} -re. Ezért \mathfrak{D} teljessége azt jelenti, hogy minden olyan f -nek el kell tűnnie, amely az egész \mathfrak{D} -re ortogonális.

A második definíció csupán \mathfrak{R}_∞ -ben érdekes, mert \mathfrak{R}_∞ -ben minden lineáris sokaság olyan típusú, amilyenről e definícióban szó van (lásd a II. 3. fejezet végét). Ezért nem adható az értelmére intuitív geometriai kép.

5. *Definíció:* Ha valamely lineáris sokaság zárt, akkor zárt lineáris sokaságnak nevezzük. Ha \mathfrak{A} az \mathfrak{R} -nek valamely részhalma és $\{\mathfrak{A}\}$ -hoz (az \mathfrak{A} által kifeszített lineáris sokasághoz) hozzávesszük $\{\mathfrak{A}\}$ határpontjait, akkor olyan zárt lineáris sokaságot kapunk, amely \mathfrak{A} -t tartalmazza.⁴⁸ Ez egyben minden \mathfrak{A} -t tartalmazó zárt lineáris sokaság részhalma. Ezt $[\mathfrak{A}]$ -val jelöljük és az „ \mathfrak{A} által kifeszített zárt lineáris sokaságnak” nevezzük.

Rátérünk \mathfrak{R} -nek és különösen a teljes ortonormált rendszereknek a vizsgálatára. Az **A.** és **B.** mellett még a $C^{(n)}$ -et, vagy a $C^{(\infty)}$, **D.** és **E.** feltevéseket megkövetelő tételeket az ⁽ⁿ⁾ illetőleg a ^(\infty) indexekkel látjuk el. Ilyen index a mindkét esetre vonatkozó tételknél nem szerepel.

3⁽ⁿ⁾. *Tétel:* Bármely ortonormált rendszer elemeinek száma $\leq n$ és akkor és csak akkor teljes, ha n eleme van.

Megjegyzés: Az első állításból következik, hogy az ortonormált rendszerek elemszámának van maximuma; az olyan ortonormált rendszer, amelynek elemszáma e maximumot eléri, definíció szerint teljes. E tétel értelmében $C^{(n)}$ esetén vannak teljes ortonormált rendszerek, ezeknek a fentiek szerint n elemük van: $\varphi_1, \dots, \varphi_n$.

Bizonyítás: Minden ortonormált rendszer (ha véges) lineárisan független. Jelölje $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m$ az elemeket. Így, ha az

$$a_1\varphi_1 + \dots + a_m\varphi_m = 0$$

egyenletnek és φ_μ -nek ($\mu = 1, 2, \dots, m$) skaláris szorzatát képezzük, azt kapjuk, hogy $a_\mu = 0$. Következésképpen $C^{(n)}$ miatt a rendszernek nem lehet $n+1$ eleme; tetszőleges ortonormált rendszernek ezért nem lehet $n+1$ elemű alrendszere. Ezért véges és elemeinek száma legfeljebb n .

Az ilyen n elemű rendszer nem terjeszthető ki és ezért teljes. Az olyan rendszer viszont, amelynek n -nél kevesebb m számú $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ eleme van, nem teljes. Valóban, az $a_1\varphi_1 + \dots + a_m\varphi_m$ lineáris kombinációk közt nem lehet $n > m$ lineárisan független. Így $C^{(n)}$ miatt léteznie kell olyan f elemnek, amely nem egyenlő egyetlen $a_1\varphi_1 + \dots + a_m\varphi_m$ elemmel, vagyis amelyre

$$\psi = f - a_1\varphi_1 - \dots - a_m\varphi_m$$

sosem zérus. Ha mármost $(\psi, \varphi_\mu) = 0$, akkor $a_\mu = (f, \varphi_\mu)$, ($\mu = 1, 2, \dots, m$). E feltétel tehát minden $\mu = 1, 2, \dots, m$ értékre egyidejűleg kielégíthető, így előállítható ψ , ami azt mutatja, hogy a $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ rendszer nem teljes.

3^(\infty). *Tétel:* Valamely ortonormált rendszer véges, vagy (megszámlálhatóan) végtelen sorozat, ha pedig teljes, akkor szükségképpen végtelen.

Megjegyzés: Ezért minden ortonormált rendszer sorozat alakjában írható: $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (amelynek esetleg vége szakad, ha véges). Ezt meg is tesszük.

Hangsúlyozzuk, hogy a rendszer elemszámának végtelen volta szükséges, de a $C^{(n)}$ esettől eltérően nem elégséges ahhoz, hogy a rendszer teljes legyen.⁴⁹

Bizonyítás: Legyen f és g a \mathfrak{D} ortonormált rendszer két különböző eleme. Ekkor

$$(f-g, f-g) = (f, f) + (g, g) - (f, g) - (g, f) = 2, \quad \|f-g\| = \sqrt{2}.$$

Legyen f_1, f_2, \dots az \mathfrak{R} -ben mindenütt sűrű sorozat. Ilyen sorozat \mathbf{E} értelmében létezik. A \mathfrak{D} -nek minden f eleméhez található olyan f_m , hogy $\|f - f_m\| < \frac{1}{2}\sqrt{2}$. Az f -nek és g -nek megfelelő $f_m = f_n$ -ből következnek, hogy

$$\|f-g\| = \|(f-f_m) - (g-f_m)\| \leq \|f-f_m\| + \|g-f_m\| < \frac{1}{2}\sqrt{2} + \frac{1}{2}\sqrt{2} = \sqrt{2}.$$

Ezért \mathfrak{D} minden f eleméhez hozzárendelhető az f_1, f_2, \dots sorozatból valamelyik f_m elem úgy, hogy különböző f -ekhez különböző f_m -ek tartozzanak hozzá, tehát \mathfrak{D} vagy véges, vagy egy sorozat.

Amiként a $3^{(n)}$. Tétel bizonyításában, itt is belátható, hogy ha \mathfrak{R} -ben m -nél több lineárisan független elem van, akkor a $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m$ rendszer nem lehet teljes. Ám $C^{(\infty)}$ miatt ez minden m -re igaz, tehát a teljes rendszer szükségképpen végtelen.

A most következő tételek, amennyiben a konvergenciával kapcsolatosak, csak a $C^{(\infty)}$ esetre vonatkoznak. Általános megfogalmazásuk azonban azért kívánatos, mert másutt is alkalmazhatók.

4. Tétel: Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszer, ekkor minden $\sum_v (f, \varphi_v) \overline{(g, \varphi_v)}$ alakú sor, amennyiben végtelen sok tagja van, abszolút konvergens. Ha $f=g$, akkor $\sum_v |(f, \varphi_v)|^2 \leq \|f\|^2$.

Bizonyítás: Legyen $a_v = (f, \varphi_v)$, $v=1, 2, \dots$, ekkor $\psi = f - \sum_{v=1}^N a_v \varphi_v$ ortogonális minden φ_v -re ($v=1, 2, \dots, N$) (lásd a $3^{(n)}$. Tétel bizonyítását). Mivel $f = \sum_{v=1}^N a_v \varphi_v + \psi$, azért

$$\begin{aligned} (f, f) &= \sum_{\mu=1}^N a_\mu \bar{a}_\mu (\varphi_\mu, \varphi_\mu) + \sum_{v=1}^N a_v (\varphi_v, \psi) + \sum_{v=1}^N \bar{a}_v (\psi, \varphi_v) + (\psi, \psi) = \\ &= \sum_{v=1}^N |a_v|^2 + (\psi, \psi) \geq \sum_{v=1}^N |a_v|^2, \end{aligned}$$

vagyis

$$\sum_{v=1}^N |a_v|^2 \leq \|f\|^2.$$

Ha a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszer véges, akkor rögtön következik, hogy $\sum_v |a_v|^2 \leq \|f\|^2$; ha végtelen, akkor $N \rightarrow \infty$ azt adja, hogy $\sum_v |a_v|^2$ abszolút konvergens és kisebb $\|f\|^2$ -nél. Így megkaptuk a második állítást. Ám

$$|(f, \varphi_v) \cdot \overline{(g, \varphi_v)}| \leq \frac{1}{2} \{ |(f, \varphi_v)|^2 + |(g, \varphi_v)|^2 \},$$

így az első állításban szereplő általános konvergencia a most megállapított konvergencia következménye.

5. Tétel: Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ végtelen ortonormált rendszer. A $\sum_{v=1}^{\infty} x_v \varphi_v$ sor akkor és csakis akkor konvergens, ha a $\sum_{v=1}^{\infty} |x_v|^2$ sor konvergál (az utóbbi tagjai valós nemnegatív számok, s így a sor vagy konvergens, vagy $+\infty$ -hez tart).

Bizonyítás: Ennek az állításnak csak a $C^{(\infty)}$ esetben van értelme, így felhasználhatjuk a D. feltevést, vagyis a Cauchy-konvergenciakritériumot. A $\sum_{v=1}^{\infty} x_v \varphi_v$ összeg konvergens, vagyis a $\sum_{v=1}^N x_v \varphi_v$ részletösszegek sorozata akkor konvergál, ha bármely $\varepsilon > 0$ -hoz található olyan $N = N(\varepsilon)$, hogy ha $L, M \geq N$, akkor

$$\left\| \sum_{v=1}^L x_v \varphi_v - \sum_{v=1}^M x_v \varphi_v \right\| < \varepsilon.$$

Tegyük fel, hogy $L > M \geq N$, ekkor

$$\left\| \sum_{v=1}^L x_v \varphi_v - \sum_{v=1}^M x_v \varphi_v \right\| = \left\| \sum_{v=M+1}^L x_v \varphi_v \right\| < \varepsilon,$$

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{v=M+1}^L x_v \varphi_v \right\|^2 &= \left(\sum_{v=M+1}^L x_v \varphi_v, \sum_{v=M+1}^L x_v \varphi_v \right) = \sum_{\mu, v=M+1}^L x_{\mu} \bar{x}_v (\varphi_{\mu}, \varphi_v) = \\ &= \sum_{v=M+1}^L |x_v|^2 = \sum_{v=1}^L |x_v|^2 - \sum_{v=1}^M |x_v|^2, \end{aligned}$$

ezért

$$0 \leq \sum_{v=1}^L |x_v|^2 - \sum_{v=1}^M |x_v|^2 < \varepsilon^2.$$

Ez azonban éppen a Cauchy-konvergenciakritérium a

$$\sum_{v=1}^N |x_v|^2, \quad N \rightarrow \infty$$

sorozatra, vagyis a

$$\sum_{v=1}^{\infty} |x_v|^2$$

sorra.

Következmény: Ha $f = \sum_v x_v \varphi_v$, akkor $(f, \varphi_v) = x_v$ (akár véges, akár végtelen az ortonormált rendszer, az utóbbi esetben természetesen feltételezzük a konvergenciát).

Bizonyítás: $N \geq v$ esetén

$$\left(\sum_{\mu=1}^N x_{\mu} \varphi_{\mu}, \varphi_v \right) = \sum_{\mu=1}^N x_{\mu} (\varphi_{\mu}, \varphi_v) = x_v.$$

Véges $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszer esetén N legyen a legnagyobb index, végtelen rendszernél a skaláris-szorzatra tekinthetjük az $N \rightarrow \infty$ határátmenetet. Mindkét esetben az eredmény $(f, \varphi_\mu) = x_\mu$.

6. *Tétel*: Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszer, f tetszőleges. Ekkor az $f' = \sum_v x_v \varphi_v$ sor, amelyben $x_v = (f, \varphi_v)$, mindig konvergens, ha a sor végtelen. Az $f - f'$ ortogonális a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszerre.

Bizonyítás: A konvergencia a 4. és az 5. *Tétel*ből következik. Az 5. *Tétel* következménye szerint

$$(f', \varphi_v) = x_v = (f, \varphi_v), \quad (f - f', \varphi_v) = 0.$$

Eme előkészítés után megadjuk az ortonormált rendszer teljességének általános — vagyis a $C^{(\infty)}$, esetre is vonatkozó — feltételeit.

7. *Tétel*: Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszer. Az alábbiak közül bármelyik e rendszer teljességének szükséges és elégséges feltétele.

α) A $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszer által kifeszített $[\varphi_1, \varphi_2, \dots]$ zárt lineáris sokaság megegyezik \mathfrak{R} -rel.

β) Bármely f -re igaz, hogy $f = \sum_v x_v \varphi_v$ és $x_v = (f, \varphi_v)$ ($v = 1, 2, \dots$; konvergencia a 6. *Tétel* alapján.)

γ) Bármely f -re és g -re igaz, hogy

$$(f, g) = \sum_v (f, \varphi_v) \overline{(g, \varphi_v)}$$

(abszolút konvergencia a 4. *Tétel* alapján).

Bizonyítás: Ha $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes, akkor $f - \sum_v x_v \varphi_v$ zérus ($x_v = (f, \varphi_v)$, $v = 1, 2, \dots$), hiszen a 6. *Tétel* értelmében ortogonális a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszerre. Így β) kielégül. Ha β) teljesül, akkor minden f a

$$\sum_{v=1}^N x_v \varphi_v, \quad (N \rightarrow \infty)$$

részletösszegek limesze (ha $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ egyáltalában végtelen) s ezért $[\varphi_1, \varphi_2, \dots]$ -höz tartozik. Ilyen módon α) teljesül. Ha α) igaz, akkor így okoskodunk: ha f ortogonális a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszerre, akkor ortogonális ennek minden lineáris kombinációjára, tehát határátmenettel a teljes $[\varphi_1, \varphi_2, \dots]$ sokaságra is. Ilyen módon ortogonális az egész \mathfrak{R} -re s így önmagára is: $(f, f) = 0$, $f = 0$. Következésképpen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes.

A következő logikai sémára jutottunk:

$$\text{teljesség} \rightarrow \beta) \rightarrow \alpha) \rightarrow \text{teljesség,}$$

vagyis α) és β) szükséges és elégséges feltétel.

A γ -ból következik, hogy ha f ortogonális a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszerre és ha $f=g$, akkor $(f, f) = \sum_v 0 \cdot 0 = 0, f=0$; más szóval $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes. Másrészt β) miatt (amely ekvivalens a teljességgel)

$$\begin{aligned} (f, g) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{v=1}^N (f, \varphi_v) \cdot \varphi_v, \sum_{v=1}^N (g, \varphi_v) \cdot \varphi_v \right) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{\mu, v=1}^N (f, \varphi_\mu) \overline{(g, \varphi_v)} (\varphi_\mu, \varphi_v) \right) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{v=1}^N (f, \varphi_v) \overline{(g, \varphi_v)} = \sum_{v=1}^{\infty} (f, \varphi_v) \overline{(g, \varphi_v)} \end{aligned}$$

(ha a rendszer véges, akkor a határátmenet szükségtelen). Tehát γ) teljesül. Így γ) is szükséges és elégséges feltétel.

8. *Tétel:* Bármely f_1, f_2, \dots sorozathoz tartozik olyan $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszer, amely ugyanazt a lineáris sokaságot feszíti ki (bármelyik rendszer lehet véges is).

Bizonyítás: Először is f_1, f_2, \dots helyett annak olyan g_1, g_2, \dots részsorozatát választjuk ki, amely ugyanazt a lineáris sokaságot feszíti ki, ám elemei lineárisan függetlenek. Ez a következőképpen történik: legyen g_1 az első olyan az f_n -ek közül, amelyik nem zérus; g_2 legyen az első olyan az f_n -ek közül, amely nem $a_1 g_1$ alakú; g_3 legyen az első olyan az f_n -ek közül, amely nem $a_1 g_1 + a_2 g_2$ alakú; \dots (ha bármely p -re nincs olyan f , amely nem $a_1 g_1 + \dots + a_p g_p$ alakú, akkor g_p -vel befejezzük a kiválogatást). Így megkapjuk a kívánt g_1, g_2, \dots rendszert. Legyen ezek után

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= g_1, & \varphi_1 &= \frac{1}{\|\gamma_1\|} \cdot \gamma_1, \\ \gamma_2 &= g_2 - (g_2, \varphi_1) \cdot \varphi_1, & \varphi_2 &= \frac{1}{\|\gamma_2\|} \cdot \gamma_2, \\ \gamma_3 &= g_3 - (g_3, \varphi_1) \cdot \varphi_1 - (g_3, \varphi_2) \cdot \varphi_2, & \varphi_3 &= \frac{1}{\|\gamma_3\|} \cdot \gamma_3 \\ & & & \vdots \\ & & & \vdots \\ & & & \vdots \end{aligned}$$

(ez az ún. *Schmidt*-féle „ortogonalizálási eljárás”). Bármely φ_p megalkotható, vagyis a $\|\gamma_p\|$ nevező nem tűnik el, hiszen ha $\gamma_p = 0$ volna, akkor g_p a $\varphi_1, \dots, \varphi_{p-1}$ -nek, vagyis g_1, \dots, g_{p-1} -nek lineáris kombinációja volna, ami a konstrukció miatt lehetetlen. Világos továbbá, hogy g_p a $\varphi_1, \dots, \varphi_p$ -nek és φ_p a g_1, \dots, g_p -nek lineáris kombinációja így g_1, g_2, \dots és $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ugyanazt a lineáris sokaságot feszítik ki.

Végül a konstrukció miatt $q < p$ -re $(\gamma_p, \varphi_q) = 0$, tehát $(\gamma_p, \gamma_q) = 0$, p és q felcserélésével azt kapjuk, hogy az utóbbi állítás $q \neq p$ -re igaz, tehát $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszer.

9. *Tétel*: Bármely \mathfrak{R} zárt lineáris sokasághoz tartozik olyan ortonormált rendszer, amely által kifeszített zárt lineáris sokaság éppen \mathfrak{R} .

Bizonyítás: A $C^{(n)}$ esetben a tétel azonnal belátható: \mathfrak{R} eleget tesz **A.**, **B.**, és $C^{(n)}$ -nek, tehát \mathfrak{R} -nek bármely \mathfrak{M} lineáris sokasága eleget tesz **A.**, **B.** és $C^{(m)}$ -nek, ahol $m \leq n$. Tehát a 3⁽ⁿ⁾. *Tételt* követő megjegyzés alkalmazható \mathfrak{M} -re; létezik olyan $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ ortonormált rendszer, amely \mathfrak{M} -ben teljes. A 7. *Tétel* α) pontja miatt éppen ez az az állítás, amelyet be kellett bizonyítani (látható, hogy ebben az esetben nem kell külön kikötni, hogy \mathfrak{M} zárt. Lásd az 5. *Definícióval* kapcsolatos állításokat).

A $C^{(\infty)}$ esetben arra hivatkozunk, hogy **E.** értelmében \mathfrak{R} szeparábilis. Megmutatjuk, hogy \mathfrak{M} is szeparábilis; sőt, hogy \mathfrak{R} minden részhalmaza szeparábilis. Tekintsük az \mathfrak{R} -ben mindenütt sűrű f_1, f_2, \dots sorozatot (lásd a II. 1. fejezetben az **E.** feltevést). Minden f_n -hez és az $m = 1, 2, \dots$ számokhoz képezzük azt a $\mathfrak{R}_{n,m}$ gömböt, amelynek f pontjaira $\|f - f_n\| < \frac{1}{m}$. Minden olyan $\mathfrak{R}_{n,m}$ gömbből, amely tartalmaz \mathfrak{M} -ből pontot, válasszunk ki egy ilyen $g_{n,m}$ \mathfrak{M} -be eső pontot. E pontok sorozatot alkotnak \mathfrak{M} -ben, noha előfordulhat, hogy bizonyos n és m esetén ilyen pont nem létezik.⁵⁰ Legyen f \mathfrak{M} -nek tetszőleges pontja és legyen $\varepsilon > 0$. Ekkor létezik olyan m , hogy $\frac{1}{m} < \frac{\varepsilon}{2}$ és olyan f_n , hogy $\|f_n - f\| < \frac{1}{m}$. Tekintve, hogy $\mathfrak{R}_{n,m}$ ekkor tartalmaz \mathfrak{M} -ből pontot (nevezetesen éppen f -et), $g_{n,m}$ létezik és $\|f_n - g_{n,m}\| < \frac{1}{m}$. Így $\|f - g_{n,m}\| < \frac{2}{m} < \varepsilon$. Tehát f tetszőleges környezetében található a $g_{n,m}$ sorozat pontja, tehát e sorozat \mathfrak{M} -ben mindenütt sűrű.

Legyen f_1, f_2, \dots \mathfrak{M} -nek \mathfrak{M} -ben mindenütt sűrű sorozata. Az e sorozat által kifeszített $[f_1, f_2, \dots]$ zárt lineáris sokaság minden határpontját, tehát \mathfrak{M} -et is tartalmazza, ám mivel \mathfrak{M} zárt lineáris sokaság, amely az f_1, f_2, \dots sorozatot tartalmazza, ezért tartalmazza az $[f_1, f_2, \dots]$ sokaságot is, tehát $[f_1, f_2, \dots]$ azonos \mathfrak{M} -mel. Előállítjuk most a 8. *Tétel* értelmében azt a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált sorozatot, amelyre $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots\} = \{f_1, f_2, \dots\}$, ha itt a határpontokat mindkét oldalhoz hozzávesszük, akkor azt kapjuk, hogy $[\varphi_1, \varphi_2, \dots] = [f_1, f_2, \dots] = \mathfrak{M}$, ám éppen ezt kellett bizonyítani.

Legyen a 9. *Tételben* $\mathfrak{M} = \mathfrak{R}$ így a 7. *Tétel* α) pontja szerint $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszer. Tehát létezik teljes ortonormált rendszer és ezzel megmutathatjuk, hogy \mathfrak{R} vagy egy \mathfrak{R}_n vagy pedig \mathfrak{R}_∞ (attól függően, hogy $C^{(n)}$ vagy $C^{(\infty)}$ érvényes), s így \mathfrak{R} tulajdonságait teljesen meghatároztuk.

Meg kell még mutatni, hogy \mathfrak{R} egy egyértelműen leképezhető az (x_1, \dots, x_n) vagy pedig az (x_1, x_2, \dots) sorozatok halmazára (az utóbbi esetben kikötjük, hogy

$\sum_{v=1}^{\infty} |x_v|^2$ véges) oly módon, hogy

1. $af \leftrightarrow (ax_1, ax_2, \dots)$ az $f \leftrightarrow (x_1, x_2, \dots)$ következménye,

2. $f + g \leftrightarrow (x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots)$ az $\left\{ \begin{array}{l} f \leftrightarrow (x_1, x_2, \dots) \\ g \leftrightarrow (y_1, y_2, \dots) \end{array} \right\}$ következménye,

3. $(f, g) = \sum_{v=1}^{n \text{ vagy } \infty} x_v \bar{y}_v$ az $\left\{ \begin{array}{l} f \leftrightarrow (x_1, x_2, \dots) \\ g \leftrightarrow (y_1, y_2, \dots) \end{array} \right\}$ következménye.

(A végtelen esetben 3.-nál az abszolút konvergenciát meg kell mutatni). Megadjuk most az $f \leftrightarrow (x_1, x_2, \dots)$ leképezést.

Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszer; a $C^{(n)}$ esetben ez φ_n -nel lezárul, a $C^{(\infty)}$ esetben pedig végtelen ($3^{(n)}$ és $3^{(\infty)}$). *Tételek*. Így

$$f = \sum_{v=1}^{n \text{ vagy } \infty} x_v \varphi_v.$$

Az 5. *Tétel* értelmében ez a sor még a végtelen esetben is konvergens (mivel

$\sum_{v=1}^{\infty} |x_v|^2$ véges), vagyis így \mathfrak{R}_n illetőleg \mathfrak{R}_{∞} valamennyi eleme felírható. A 7. *Tétel* β pontja értelmében és mivel $\sum_{v=1}^{n \text{ vagy } \infty} |(f, \varphi_v)|^2$ véges (4. *Tétel*), az $x_v = (f, \varphi_v)$ megfelelte-

téssel az (x_1, x_2, \dots) sorozatok halmazát is kimerítettük. Világos, hogy minden (x_1, x_2, \dots) -nek egyetlen f felel meg, míg a fordított állítás az 5. *Tétel* következménye miatt igaz.

Az 1. és 2. állítás nyilvánvalóan igaz, a 3. pedig a 7. *Tétel* γ) pontjának következménye.

3. Az A.—E. feltevések diszkussziója⁵¹

Még igazolnunk kell az I. 4. fejezet végén tett 2. állításunkat, mely szerint F_Z és F_{Ω} valóban kielégíti az A.—E. feltevéseket. Elég azonban F_{Ω} -t megvizsgálunk, hiszen a II. 2. fejezetben már megmutattuk, hogy az olyan \mathfrak{R} , amely A.—E.-nek eleget tesz, minden tulajdonságára nézve megegyezik \mathfrak{R}_{∞} -nel, vagyis F_Z -vel s így F_Z biztosan kielégíti A.—E.-t. Megmutatjuk továbbá, hogy a D., E. feltétel, amint azt már a II. 2. fejezetben jeleztük, A.— $C^{(\infty)}$ -től független és azt is, hogy az A.— $C^{(n)}$ -ből viszont következik, vagyis, hogy \mathfrak{R} -re teljesül. E tisztán matematikai kérdések képezik e fejezet tárgyát.

Először bebizonyítjuk, hogy F_{Ω} -ra A.—E. érvényes. Eközben az integrál *Lebesgue*-féle értelmezésére támaszkodunk. Ennek megalapozása a tárgyra vonatkozó szakirodalomban található meg.⁵² (A *Lebesgue*-integrál itt lényeges, ismerete a további fejezetekhez nem szükséges.)

Az I. 4. fejezetben bevezettük Ω -t, mint a q_1, \dots, q_k koordináták k -dimenziós terét és F_{Ω} -t, az olyan $f(q_1, \dots, q_k)$ függvények halmazát, amelyekre

$$\int_{\Omega} \dots \int |f(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

véges. A q_1, \dots, q_k $-\infty$ -tól $+\infty$ -ig változik. Minden levezetésünk érvényben maradna és még a bizonyítások is legnagyobb részben szó szerint alkalmazhatók lennének arra az esetre is, ha q_1, \dots, q_k tartományát korlátoznánk (így például Ω lehetne a féltér, vagy a kocka, esetleg gömb belseje, vagy külseje stb.). Az Ω -t még valamilyen görbült felületnek (például a gömb felületének) is választhatnánk. Vizsgálatainkat azonban az először említett legegyszerűbb esetre korlátozzuk, hogy a szükségtelen bonyodalmak útvesztőjében el ne tévedjünk (ezeket az eseteket az olvasó a tipikus bizonyítások segítségével maga is nehézség nélkül végiggondolhatja). Most sorra vesszük az **A**—**E**. feltevéseket.

ad A. Meg kell mutatnunk, hogy ha f és g az F_Ω eleme, akkor af és $f \pm g$ is az, más szóval, ha

$$\int_{\Omega} |f|^2, \quad \int_{\Omega} |g|^2$$

véges (ezt a rövidítést használjuk az

$$\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |f(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

és az

$$\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} |g(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

kifejezés helyett, hiszen félreértés nem lehetséges), akkor

$$\int_{\Omega} |af|^2 = |a|^2 \cdot \int_{\Omega} |f|^2, \quad \int_{\Omega} |f \pm g|^2$$

is az. Az első eset triviális, a másodikat így igazoljuk:

$$|f \pm g|^2 = |f|^2 + |g|^2 \pm 2\operatorname{Re}(f, g)^{53}$$

és

$$\int_{\Omega} |f\bar{g}| = \int_{\Omega} |f| \cdot |g|,$$

továbbá:

$$|f| \cdot |g| \leq \frac{1}{2}(|f|^2 + |g|^2),$$

s így a második eset is következik.

ad B. Definíció szerint (f, g) legyen $\int_{\Omega} f\bar{g}$. Ez az integrál, amint azt már láttuk, abszolút konvergens. A **B**. pontban tett feltevések közül majdnem minden világos, kivéve azt, hogy $(f, f) = 0$ következtében $f \equiv 0$. Ám $(f, f) = 0$ azt jelenti hogy

$$\int_{\Omega} |f|^2 = 0,$$

vagyis ama pontok halmazának, amelyeken

$$|f|^2 > 0, \quad \text{tehát } f(q_1, \dots, q_k) \neq 0,$$

zérus *Lebesgue*-mértékűeknek kell lennie. De két olyan f és g függvényt, amelyek csupán egy zérus *Lebesgue*-mértékű q_1, \dots, q_k halmazon nem egyenlők egymással (vagyis $f(q_1, \dots, q_k) \neq g(q_1, \dots, q_k)$), lényegében egymással azonosnak tekintünk, így kimondhatjuk, hogy $f \equiv 0$.⁵⁴

ad C. Legyen O_1, \dots, O_n n számú olyan tartomány Ω -ban, hogy páronként nincs közös pontjuk és mindegyikőjüknek pozitív, de véges *Lebesgue*-mértéke van. Legyen $f_i(q_1, \dots, q_k)$ az O_i tartományban egy, és másutt zérus. Az $\int_{\Omega} |f_i|^2$ az O_i mértékével egyenlő, ezért f_i az F_{Ω} -hoz tartozik ($i=1, 2, \dots$). Éme f_1, \dots, f_l függvények lineárisan függetlenek, ezért az $a_1 f_1 + \dots + a_l f_l = 0$ egyenletből következik, hogy a bal oldalon álló függvény nem csupán egy zérus *Lebesgue*-mértékű halmazon különbözhet zérustól, vagyis minden O_i tartományban vannak zérushelyei. Viszont O_i -ben $a_i =$ állandó, tehát kell, hogy $a_i = 0$ legyen. Ez a konstrukció minden n -re érvényes, ezért $C^{(\infty)}$ érvényes.

ad D. Elégítse ki az f_1, f_2, \dots sorozat a *Cauchy*-konvergenciakritériumot, tehát bármely $\varepsilon > 0$ -hoz tartozzék olyan $N = N(\varepsilon)$, hogy $\int_{\Omega} |f_m - f_n|^2 < \varepsilon$ teljesüljön, ha $n, m \geq N$. Legyen $n_1 = N\left(\frac{1}{8}\right)$; $n_2 \geq n_1$, $N\left(\frac{1}{8^2}\right)$; $n_3 \geq n_1, n_2$, $N\left(\frac{1}{8^3}\right)$; \dots . Így $n_1 \leq n_2 \leq \dots$; $n_v \geq N\left(\frac{1}{8^v}\right)$, következésképpen

$$\int_{\Omega} |f_{n_{v+1}} - f_{n_v}|^2 < \frac{1}{8^v}.$$

Tekintsük most ama pontok $P^{(v)}$ halmazát, amelyekben

$$|f_{n_{v+1}} - f_{n_v}| > \frac{1}{2^v}.$$

Ha ennek *Lebesgue*-mértéke $\mu^{(v)}$, akkor

$$\int_{\Omega} |f_{n_{v+1}} - f_{n_v}|^2 \geq \mu^{(v)} \left(\frac{1}{2^v}\right)^2 = \frac{\mu^{(v)}}{4^v}; \quad \frac{\mu^{(v)}}{4^v} < \frac{1}{8^v}; \quad \mu^{(v)} < \frac{1}{2^v}.$$

Tekintsük most a $P^{(v)}, P^{(v+1)}, P^{(v+2)}, \dots$ halmazok $Q^{(v)}$ egyesítését. Ennek *Lebesgue*-mértéke kisebb, mint

$$\mu^{(v)} + \mu^{(v+1)} + \mu^{(v+2)} + \dots < \frac{1}{2^v} + \frac{1}{2^{v+1}} + \frac{1}{2^{v+2}} + \dots = \frac{1}{2^{v-1}}.$$

A $Q^{(v)}$ külsejében

$$|f_{n_{v+1}} - f_{n_v}| < \frac{1}{2^v}, \quad |f_{n_{v+2}} - f_{n_{v+1}}| < \frac{1}{2^{v+1}},$$

$$|f_{n_{v+3}} - f_{n_{v+2}}| < \frac{1}{2^{v+2}} \dots$$

ezért általában, ha $v \leq v' \leq v''$

$$|f_{n_{v'}} - f_{n_v}| \leq |f_{n_{v'+1}} - f_{n_v}| + |f_{n_{v'+2}} - f_{n_{v'+1}}| + \dots + |f_{n_{v''}} - f_{n_{v''-1}}| < \\ < \frac{1}{2^{v'}} + \frac{1}{2^{v'+1}} + \dots + \frac{1}{2^{v''-1}} < \frac{1}{2^{v'-1}}.$$

Ez tehát, amint $v' \rightarrow \infty$, a v'' -től függetlenül zérushoz tart, más szóval az f_{n_1}, f_{n_2}, \dots sorozat kielégíti a *Cauchy*-konvergenciakritériumot, ha q_1, \dots, q_k nem esik $Q^{(v)}$ -be. Tekintve, hogy (rögzített q_1, \dots, q_k esetén) számokkal van dolgunk, e sorozat konvergens is. A fordított kijelentés így hangzik: ha valamely q_1, \dots, q_k pontban az f_{n_1}, f_{n_2}, \dots sorozat nem konvergál, akkor e pont $Q^{(v)}$ -be esik. Legyen Q mindazon pontok halmaza, amelyekben nincs konvergencia. A Q így $Q^{(v)}$ részhalma, s mértéke, mely nem lehet $Q^{(v)}$ mértékénél nagyobb, nyilván kisebb, mint $\frac{1}{2^{v-1}}$.

Ennek minden v -re érvényesnek kell lennie, hiszen Q -t a v -től függetlenül határoztuk meg. Közvetkezésképpen Q *Lebesgue*-mértéke zérus. Így valamennyi f_n zérussal tehető egyenlővé Q -ban, s így elérhető, hogy f_{n_1}, f_{n_2}, \dots a Q -ban is, tehát mindenütt konvergens legyen.

Ilyen módon f_1, f_2, \dots olyan f_{n_1}, f_{n_2}, \dots részsorozatát választottuk ki, amely minden q_1, q_2, \dots, q_k pontban konvergens (az f_1, f_2, \dots nem szükségképpen az). Legyen f_{n_1}, f_{n_2}, \dots határfüggvénye $f = f(q_1, \dots, q_k)$. Be kell bizonyítanunk, hogy

1. f az F_Ω -hoz tartozik, más szóval, hogy $\int_\Omega |f|^2$ véges;

2. f az f_{n_1}, f_{n_2}, \dots sorozatnak nemcsak a q_1, \dots, q_k pontokban vett határértéke, hanem a *Hilbert*-tér távolságfogalmának értelmében vett határfüggvénye is, tehát $\|f - f_{n_n}\| \rightarrow 0$, vagyis $\int_\Omega |f - f_{n_n}|^2 \rightarrow 0$;

3. ebben az értelemben f az egész f_1, f_2, \dots sorozat határfüggvénye, vagyis $\|f - f_n\| \rightarrow 0$, illetőleg $\int_\Omega |f - f_n|^2 \rightarrow 0$.

Legyen $\varepsilon > 0$ és válasszuk meg v_0 -t úgy, hogy $n_{v_0} \geq N(\varepsilon)$ (legyen például $\frac{1}{8^{v_0}} \leq \varepsilon$), legyen továbbá $v \geq v_0$, $n \geq N(\varepsilon)$. Ekkor $\int_\Omega |f_{n_v} - f_n|^2 < \varepsilon$. A $v \rightarrow \infty$ esetben az integrandus $|f - f_n|^2$ -hoz tart, tehát (a *Lebesgue*-integrálok egy konvergenciátételének értelmében) $\int_\Omega |f - f_n|^2 \leq \varepsilon$ (lásd az 52. jegyzetet). Következésképpen $f - f_n$ és így f_n -nel együtt f is F_Ω -hoz tartozik, így 1.-et bizonyítottuk. A fenti egyenlőtlenségből az is következik, hogy $\int_\Omega |f - f_n|^2 \rightarrow 0$, ha $n \rightarrow \infty$, tehát 2. és 3. is igaz.

ad E. Találnunk kell F_Ω -ban mindenütt sűrű f_1, f_2, \dots függvénysorozatot.

Legyen $\Omega_1, \Omega_2, \dots$ az Ω olyan tartományainak sorozata, amelyek mindegyike véges mértékű, s amelyek egyesítése lefedi Ω -t (ilyen például az origó körüli N sugarú Ω_N gömbök sorozata). Legyen $f = f(q_1, \dots, q_k)$ az F_Ω tetszőleges eleme. Definiáljuk az $f_N = f_N(q_1, \dots, q_k)$ függvényeket a következőképpen az $N = 1, 2, \dots$ esetben:

$$f_N(q_1, \dots, q_k) = \begin{cases} f(q_1, \dots, q_k) & \begin{cases} \text{ha } q_1, \dots, q_k \text{ az } \Omega_N\text{-nek eleme} \\ \text{és ha } |f(q_1, \dots, q_k)| \leq N \end{cases} \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases}$$

Ha $N \rightarrow \infty$, az $f_N(q_1, \dots, q_k) \rightarrow f(q_1, \dots, q_k)$ (bizonyos N -től kezdve egyenlőséget kapunk), így $|f - f_N|^2 \rightarrow 0$. Továbbá: $f - f_N$ vagy zérus, vagy f -fel egyenlő, tehát $|f - f_N|^2 \leq f^2$. Az $\int_{\Omega} |f - f_N|^2$ integrálok tehát valamennyien kisebbek a véges $\int_{\Omega} |f|^2$ -nél; ezek az integrandusokkal együtt zérushoz tartanak (lásd az előbb idézett konvergenciatételt).

Legyen G az összes olyan $g = g(q_1, \dots, q_k)$ függvények osztálya, amelyekre az összes $g \neq 0$ tulajdonságú pont mértéke véges, és amelyek az egész térben kielégítik a $g \leq C$ egyenlőtlenséget egy tetszőleges, de rögzített C mellett. A fenti f_N függvények valamennyien G -hez tartoznak, tehát az előbbieik értelmében G mindenütt sűrű F_{Ω} -ban.

Tekintsük G valamely g elemét és legyen $\varepsilon > 0$, a $g \neq 0$ halmaz mértéke M , és $|g|$ felső határa C . Ekkor választhatók olyan ρ_1, \dots, ρ_t racionális számok, hogy

$$-C < \rho_1 < \rho_2 < \dots < \rho_t < C$$

és

$$\rho_1 < -C + \varepsilon, \rho_2 < \rho_1 + \varepsilon, \dots, \rho_t < \rho_{t-1} + \varepsilon, C < \rho_t + \varepsilon$$

teljesüljön.

Változtassuk meg $\operatorname{Re} g(q_1, \dots, q_k)$ értékét, ha az zérustól különbözik úgy, hogy legyen egyenlő a hozzá legközelebb eső ρ_s -sel ($s = 1, 2, \dots, t$), ha pedig zérus, akkor maradjon is az. Így olyan új $h_1(q_1, \dots, q_k)$ függvényt kapunk, amely $\operatorname{Re} g$ -től mindenütt legfeljebb ε -nal különbözik. Ugyanilyen módon alkotjuk meg az új $h_2(q_1, \dots, q_k)$ függvényt az $\operatorname{Im} g$ -ből. Így a $h = h_1 + ih_2$ függvényre érvényes lesz, hogy

$$\int_{\Omega} |g - h|^2 = \int_{\Omega} |\operatorname{Re} g - h_1|^2 + \int_{\Omega} |\operatorname{Im} g - h_2|^2 \leq M\varepsilon^2 + M\varepsilon^2 = 2M\varepsilon^2,$$

$$\|g - h\| \leq \sqrt{2M} \varepsilon.$$

Adott δ -hoz $\varepsilon < \delta / \sqrt{2M}$ választás mellett $\|g - h\| < \delta$.

Nevezzük H -nak ama $h = h(q_1, \dots, q_k)$ függvények osztályát, amelyek csupán véges számú, egymástól különböző értéket vesznek fel, nevezetesen éppen a $\rho + i\sigma$ alakú értékeket, ahol ρ és σ racionális szám, és csak véges mértékű halmazon különböznek zérustól. A fenti h -k a H -hoz tartoznak, így H a G -ben és következésképpen az F_{Ω} -ban is mindenütt sűrű.

Tetszőleges véges *Lebesgue*-mértékű halmaz jelölésére a továbbiakban a Π betűt használjuk. Határozzuk meg az $f_{\Pi} = f_{\Pi}(q_1, \dots, q_k)$ függvényt az alábbi módon:

$$f_{\Pi}(q_1, \dots, q_k) = \begin{cases} 1 & \Pi\text{-ben,} \\ 0 & \text{egyébütt.} \end{cases}$$

A H osztály nyilvánvalóan a

$$\sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} \quad (t = 1, 2, \dots; \rho_s, \sigma_s \text{ racionális})$$

alakú függvényekből áll.

Megkeressük most a Π halmazok olyan $\Pi^{(1)}, \Pi^{(2)}, \dots$ sorozatát, hogy bármely Π halmazhoz és $\varepsilon > 0$ -hoz található legyen olyan $\Pi^{(n)}$ halmaz, hogy a Π -hez tartozó, de $\Pi^{(n)}$ -hez nem tartozó és a $\Pi^{(n)}$ -hez tartozó, de Π -hez nem tartozó pontok halmazának mértéke kisebb, mint ε (e halmaz neve Π és $\Pi^{(n)}$ szimmetrikus különbség-halmaza). Ha sikerül ilyen sorozatot találni, akkor a

$$\sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n)}}$$

függvények halmaza H -ban mindenütt sűrű, tudniillik, ha Π_s -hez a fentiek alapján választjuk meg $\Pi^{(n)}$ -et, akkor

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left| \sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} - \sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n)}} \right|^2 \leq \\ & \leq \sum_{s=1}^t \int_{\Omega} |(\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} - (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n)}}|^2 = \sum_{s=1}^t (\rho_s^2 + \sigma_s^2) \int_{\Omega} |f_{\Pi_s} - f_{\Pi^{(n)}}|^2 = \\ & = \sum_{s=1}^t (\rho_s^2 + \sigma_s^2) [(\Pi_s, \Pi^{(n)}) \text{ szimmetrikus különbség-halmazának mértéke}] < \\ & < \sum_{s=1}^t (\rho_s^2 + \sigma_s^2) \cdot \varepsilon. \end{aligned}$$

Adott $\delta > 0$ esetén az

$$\varepsilon = \delta^2 / \left(\sum_{s=1}^t \rho_s^2 + \sigma_s^2 \right)$$

választással kapjuk, hogy

$$\left\| \sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} - \sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n)}} \right\| < \delta.$$

Ám a

$$\sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n)}}$$

függvények megfelelő módon sorozatba rendezhetők. Ez a következőképpen végezhető el. Legyen a $\rho_1, \sigma_1, \dots, \rho_t, \sigma_t$ számok közös nevezője τ , és az ennek megfelelő számlálók legyenek $\rho'_1, \sigma'_1, \dots, \rho'_t, \sigma'_t$. Így a fenti függvények a következőképpen írhatók:

$$\frac{1}{\tau} \sum_{s=1}^t (\rho'_s + i\sigma'_s) f_{\Pi^{(n_s)}},$$

itt $t, \tau = 1, 2, \dots$; az $s = 1, 2, \dots, r$ -re a ρ_s, σ_s számok a $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ sorozatból, az n_s számok az $1, 2, \dots$ sorozatból kerülnek ki. E függvényeket sorozatba rendezni ugyanaz, mint a $t, \tau, \rho'_1, \sigma'_1, \dots, \rho'_t, \sigma'_t, n_1, \dots, n_t$ számkomplexusokat sorozatba rendezni. E számkomplexusok közül először azokat foglaljuk egy csoportba, amelyekre az

$$I = t + \tau + |\rho'_1| + |\sigma'_1| + \dots + |\rho'_t| + |\sigma'_t| + n_1 + \dots + n_t$$

egész szám ugyanazt az értéket veszi fel. E csoportok nyilvánvalóan véges számú komplexusokból állnak (természetesen rögzített I esetén). Ha e véges halmazokat növekvő I szerint sorba állítjuk és az egyes halmazokon belül valamilyen tetszőleges sorrendet választunk, akkor olyan sorozatot kapunk, amely minden komplexust tartalmaz.

Hátra van még a fent említett $\Pi^{(1)}, \Pi^{(2)}, \dots$ sorozat felkutatása. Használjuk fel azt a tényt, hogy bármely véges M Lebesgue-mértékű Π halmazhoz és $\delta > 0$ -hoz található olyan Π' nyílt ponthalmaz, amely Π -t lefedi és amelynek mértéke M -et δ -nál kevesebbel haladja meg (lásd a 45. és 52. jegyzet hivatkozásait a „nyílt halmaz” fogalmával kapcsolatban). Ám minden nyílt Π' -höz és $\delta > 0$ -hoz található olyan Π'' , amely véges számú Π' -be eső kockából áll és Π' mértéke Π'' mértékénél δ -val nagyobb. Világos, hogy e kockák élleinek hossza és középpontjaik koordinátái racionális számoknak választhatók. Könnyen belátható, hogy Π és Π'' szimmetrikus különbségalmazának mértéke $\delta + \delta = 2\delta$ -nál, tehát $\delta = \frac{\varepsilon}{2}$ esetén ε -nál kisebb.

Feladatunk végére érünk, ha a mondott kockák halmazait sorozatba rendezzük.

E kockahalmazokat a kockák száma, $n = 1, 2, \dots$, a kockák $\kappa^{(v)}$ élhosszúsága és középpontjainak $\xi_1^{(v)}, \dots, \xi_k^{(v)}$ ($v = 1, \dots, n$) koordinátái egyértelműen jellemzi. A $\kappa^{(v)}$ és $\xi_1^{(v)}, \dots, \xi_k^{(v)}$ racionális; legyen közös nevezőjük ($v = 1, 2, \dots, n$ -re) η ($\eta = 1, 2, \dots$), az új számlálók ekkor

$$\kappa^{(v)} = 1, 2, \dots; \xi_1^{(v)}, \dots, \xi_k^{(v)} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Így a kockahalmazokat a

$$\kappa, \eta, \kappa^{(1)}, \xi_1^{(1)}, \dots, \xi_k^{(1)}, \dots, \kappa^{(n)}, \xi_1^{(n)}, \dots, \xi_k^{(n)}$$

számkomplexusok egyértelműen jellemzik. Ha ezeket az

$$n + \eta + \kappa^{(1)} + |\xi_1^{(1)}| + \dots + |\xi_k^{(1)}| + \dots + \kappa^{(n)} + |\xi_1^{(n)}| + \dots + |\xi_k^{(n)}|$$

pozitív egész szám növekedése szerint csoportosítjuk, ismét sorozatot kapunk, mint az előbb a függvények lineáris kombinációinak leszámolásakor.

Mielőtt tovább mennénk, válaszoljunk a következő kérdésre: ha \mathfrak{R} kielégíti az **A.**—**E.** feltételeket ($C^{(\infty)}$ -nel), akkor \mathfrak{R} -nek milyen \mathfrak{R} részhalmazán érvényes **A.**—**E.**? (Az $af, f \pm g$ és (f, g) definícióját természetesen nem változtatjuk meg.)

Az \mathfrak{M} -nek lineáris sokaságnak kell lennie ahhoz, hogy **A.** teljesüljön. A **B.** érvényben marad. A **C.**-t későbbre hagyjuk, ám mindenesetre $C^{(n)}$. vagy a $C^{(\infty)}$. teljesülni fog. A **D.** azt jelenti, hogy ha \mathfrak{M} -nek egy sorozata eleget tesz a *Cauchy*-konvergenciakritériumnak, akkor limesze is \mathfrak{M} -nek eleme. Az ilyen sorozatnak van limesze \mathfrak{R} -ben, tehát **D.** csupán annyit jelent, hogy e limesz \mathfrak{M} -hez tartozik, vagyis \mathfrak{M} -nek zártnak kell lennie. Az **E.** feltétel mindig teljesül, amint azt a 9. *Tétel* bizonyításánál láttuk. Mindezt így foglalhatjuk össze: \mathfrak{M} -nek zárt lineáris sokaságnak kell lennie. Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ az \mathfrak{M} -et kifeszítő ortonormált rendszer. Ha ez végtelen, akkor nyilvánvalóan $C^{(\infty)}$. teljesül, ezért \mathfrak{M} izomorf \mathfrak{R}_∞ -nel, tehát magával \mathfrak{R} -rel, ha φ_n -nel vége szakad, akkor $C^{(n)}$. érvényes (például a 3. *Tétel* miatt), vagyis \mathfrak{M} az \mathfrak{R}_n -nel izomorf.

Az \mathfrak{M} -ben azonban **D.** és **E.** mindenesetre teljesül, tehát e két feltétel minden \mathfrak{R}_n -ben érvényes, vagyis **A.—C.** következménye.

Amint látható, nem igazoltuk közvetlen módon **A.—E.** ($C^{(n)}$. vagy $C^{(\infty)}$. feltételezésével) teljesülését \mathfrak{R}_n -ben, illetőleg \mathfrak{R}_∞ -ben; csupán közvetett logikai módszerekkel láttuk be érvényességüket. A közvetlen, analitikai bizonyításnak sincs azonban semmi akadálya; ezt az olvasóra bizzuk.

Hátra van még annak megmutatása, hogy **D.** és **E.** független **A.—C.** ($C^{(\infty)}$)-től. Amint azt az előbb beláttuk \mathfrak{R}_∞ -ben minden lineáris sokaságra teljesül **A.**, **B.**, **E.** és $C^{(n)}$. vagy $C^{(\infty)}$., ha nem zárt, akkor **D.** nem igaz. Ez utóbbi esetben kell, hogy $C^{(\infty)}$. legyen érvényes, hiszen $C^{(n)}$.-ből **D.** következik. Nem nehéz ilyen nem zárt lineáris sokaságot mutatni. Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszer, ekkor a

$$\sum_{v=1}^N x_v \varphi_v$$

elemek lineáris sokaságot alkotnak ($N=1, 2, \dots$; x_1, \dots, x_N tetszőleges), ez azonban nem zárt, hiszen a

$$\sum_{v=1}^{\infty} \frac{1}{v} \varphi_v$$

határpont $\left(\sum_1^{\infty} \left(\frac{1}{v} \right)^2 \text{ véges!} \right)$ nem eleme a sokaságnak

$$\left(\sum_{v=1}^N \frac{1}{v} \varphi_v \rightarrow \sum_{v=1}^{\infty} \frac{1}{v} \varphi_v, \quad \text{ha } N \rightarrow \infty \right).$$

Következésképpen **D.** független az **A.—C.** ($C^{(\infty)}$.) és az **E.** feltevésektől.

Tekintsük most ama $x(\alpha)$ komplex függvények halmazát, amelyeknek α valós paramétere $a (-\infty, +\infty)$ intervallumban folytonosan változik, amelyek azonban csak az α paraméter egy sorozatán különböznek zérustól és erre a sorozatra $\sum |x(\alpha)|^2$ véges.⁵⁵ Eme $x(\alpha)$ függvények egy $\mathfrak{R}_{\text{cont}}$. teret alkotnak. E tér bármely $x(\alpha)$ és $y(\alpha)$ pontjára $x(\alpha)$, illetőleg $y(\alpha)$ csak egy-egy α sorozatra különbözik zérustól, és e két α sorozat egyetlen sorozatba foglalható, így $x(\alpha) = y(\alpha) = 0$, kivéve az α -k

bizonyos $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ sorozatát. Ezért csupán az $x_n = x(\alpha_n)$ és az $y_n = y(\alpha_n)$ számokkal kell törődnünk ($n = 1, 2, \dots$). Ezek ugyanolyan tulajdonságúak, mint az \mathfrak{R}_∞ esetben, mindaddig, amíg két $\mathfrak{R}_{\text{cont}}$ pontról van szó. Így **A.** és **B.** $\mathfrak{R}_{\text{cont}}$ -ban is érvényes csakúgy, mint \mathfrak{R}_∞ -ben.⁵⁶ Mindez következik $k (k = 1, 2, \dots)$ számú $\mathfrak{R}_{\text{cont}}$ pontra is, így **C**^(∞) is érvényes. Mi több, mindez még az $\mathfrak{R}_{\text{cont}}$ pontjainak sorozatára is igaz. Tekintsünk valamely $x_1(\alpha), x_2(\alpha), \dots$ sorozatot; azon α -k, amelyekre $x_n(\alpha) \neq 0$, sorozatot alkotnak minden n -re ($n = 1, 2, \dots$): $\alpha_1^{(n)}, \alpha_2^{(n)}, \dots$. E sorozatok az $\alpha_m^{(n)} (n, m = 1, 2, \dots)$ kettős sorozatot alkotják, amely egybeilleszthető: $\alpha_1^{(1)}, \alpha_2^{(1)}, \alpha_1^{(2)}, \alpha_3^{(1)}, \alpha_2^{(2)}, \alpha_1^{(3)}, \dots$. Következésképpen **D.** is igaz $\mathfrak{R}_{\text{cont}}$ -ra csakúgy, mint \mathfrak{R}_∞ -re. Más a helyzet **E.**-tal. Ebben az esetben \mathfrak{R} minden pontja egy bizonyos sorozatnak határpontja, s itt az \mathfrak{R}_∞ -re vonatkozó megfontolások $\mathfrak{R}_{\text{cont}}$ -ra nem vihetők át. Abból is látható, hogy e feltétel nem érvényes, hogy egy következménye biztosan nem teljesül; található tudniillik olyan ortonormált rendszer, amely nem írható sorozat formájában (a $\mathfrak{J}^{(\infty)}$ Tétellel ellentétben).

Legyen

$$x_\beta(\alpha) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \alpha = \beta, \\ 0, & \text{ha } \alpha \neq \beta, \end{cases}$$

minden β -ra $x_\beta(\alpha)$ $\mathfrak{R}_{\text{cont}}$ eleme és az $x_\beta(\alpha)$ -k alkossanak ortonormált rendszert. Viszont nem írhatók sorozat alakjában, mert $-\infty < \beta < +\infty$ sem írható így, amint az ismeretes.⁵⁷ Így **E.** az **A.**—**C**^(∞), **D.** feltevésektől független.

(Vegyük észre az alapvető különbséget az olyan $f(x)$ -ek függvénytere, amelyekre

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx$$

véges és az olyan $x(\alpha)$ -k tere között, amelyekre $\sum_\alpha |x(\alpha)|^2$ véges. Az előzőre mondhattuk volna azt is, hogy az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(\alpha)|^2 d\alpha$$

véges, tehát a különbség a kettő között csupán annyi, hogy $\int_{-\infty}^{+\infty} \dots d\alpha$ helyett $\sum_\alpha \dots$ -t

használunk. Ám az első az F_Ω , amely az **A.**—**E.** feltevéseket teljesíti és \mathfrak{R}_∞ -nel izomorf, a második $\mathfrak{R}_{\text{cont}}$, amely **E.**-ot megsérti és \mathfrak{R}_∞ -től így lényegesen különbözik. Mégis a két tér azonos, csak a távolság definíciója más a kettőben.)

4. Zárt lineáris sokaságok

A II. 2. fejezet nemcsak azért fontos, mert ott bizonyítottuk be az izomorfizmust, hanem mert ott bizonyítottunk be számos tételt az ortonormált rendszerekre vonatkozóan. Folytatjuk most a Hilbert-tér geometriai elemzését és részletesen megvizsgáljuk a zárt lineáris sokaságokat. Ezek \mathfrak{R}_∞ -ben hasonló szerepet játszanak, mint az egyenes, a sík stb. \mathfrak{R}_n -ben (vagyis az \mathfrak{R}_m -ek, $m < n$).

Először felidézzük a 2. és az 5. *Definíció* jelölését. Ha \mathfrak{A} az \mathfrak{R} valamely részhalma, akkor $\{\mathfrak{A}\}$ és $[\mathfrak{A}]$ az \mathfrak{A} által kifeszített lineáris, illetőleg zárt lineáris sokaság, ezek a legkisebb ilyen sokaságok, amelyek \mathfrak{A} -t tartalmazzzák.

Kiterjesztjük most ezt a jelölést: jelentse $\{\mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \dots, f, g, \dots\}$ és $[\mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \dots, f, g, \dots]$ az olyan halmaz által kifeszített lineáris, illetőleg zárt lineáris sokaságot, amely $\mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \dots$ és f, g, \dots egyesítése ($\mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \dots$, az \mathfrak{R} -nek részhalma, f, g, \dots pedig elemei).

Különösen, ha $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots$ (véges vagy végtelen sok) zárt lineáris sokaság, akkor az $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots]$ számára még az $\mathfrak{M} + \mathfrak{N} + \dots$ jelölést is használjuk. Az $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots\}$ nyilvánvalóan az $f + g + \dots$ alakú összegekből áll, ahol f az \mathfrak{M} -en, g az \mathfrak{N} -en stb. fut végig. Az $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots] = \mathfrak{M} + \mathfrak{N} + \dots$ ebből úgy áll elő, hogy a határpontokat is hozzá vesszük. Ha csak véges számú ilyen $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots$ halmazzal van dolgunk és bármelyiknek minden eleme ortogonális bármelyik másik minden elemére, akkor e két reprezentáció, amint azt nemsokára látni fogjuk, megegyezik egymással. Általában azonban nem ez a helyzet.

Legyen \mathfrak{M} az \mathfrak{R} -nek részhalma, és tekintsük \mathfrak{N} -nek ama elemeit, amelyek \mathfrak{M} minden elemére ortogonálisak. Ezek nyilván zárt lineáris sokaságot alkotnak, melyet $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -mel jelölünk. A 14. *Tétel* alapján világossá válik majd, hogy miért használjuk a kivonás jelét. Az egész \mathfrak{M} -re ortogonális f -ek eme $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ halmaza igen fontos; neve \mathfrak{M} -nek \mathfrak{R} -re nézve komplementer zárt lineáris sokasága.

Három nevezetes zárt lineáris sokaság a következő: először is maga az \mathfrak{R} , másodsor a $\{0\} = [0]$ halmaz, amely csak a zérus elemből áll, harmadszor az $a f$ alakú elemek halmaza (itt f az \mathfrak{R} rögzített eleme és a tetszőleges komplex szám), amely nyilvánvalóan zárt, s így $\{f\} = [f]$.

Bevezetjük most a projekció fogalmát, amely az euklideszi geometria vetítésének pontos mása.

10. *Tétel*: Legyen \mathfrak{M} zárt lineáris sokaság. Bármely f egyértelműen felbontható két komponensre: $f = g + h$, ahol g az \mathfrak{M} -nek, h pedig $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -nek eleme.

Megjegyzés: a g neve: f projekciója \mathfrak{M} -re, a h (amely \mathfrak{M} -re ortogonális) az f -nek \mathfrak{M} -re normális komponense. A g -t így jelöljük $P_{\mathfrak{M}}f$.

Bizonyítás: Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ az \mathfrak{M} zárt lineáris sokaságot kifeszítő ortonormált rendszer. Ennek létezését a 9. *Tétel* mondja ki. Legyen $g = \sum_n (f, \varphi_n) \varphi_n$. A 6. *Tétel* szerint e sor konvergens (ha végtelen) és összege nyilvánvalóan \mathfrak{M} -hez tartozik. Továbbá, ugyancsak a 6. *Tétel* miatt, $h = f - g$ ortogonális a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszerre, azonban a h -ra ortogonális vektorok zárt lineáris sokaságot alkotnak, tehát \mathfrak{M} is ortogonális h -ra, tehát h az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -nek eleme.

Ha lehetséges lenne egy másik $f = g' + h'$ felbontás is (a g' ismét \mathfrak{M} -nek, a h' az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -nek eleme), akkor $g + h = g' + h'$, $g - g' = h' - h = j$, ahol j egyszerre eleme \mathfrak{M} -nek és $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -nek is, tehát önmagára ortogonális, vagyis $(j, j) = 0$, $j = 0$. Következésképpen $g = g'$, $h = h'$.

A $P_{\mathfrak{M}}f$ tehát azt jelenti, hogy \mathfrak{R} -nek bármely f eleméhez, annak \mathfrak{M} -re vett $P_{\mathfrak{M}}f$ projekcióját rendeljük hozzá. Ahogy azt a következő szakaszban majd bővebben is megbeszéljük, az operátor olyan függvény, amely \mathfrak{R} -nek valamilyen részhalma

van értelmezve és értékei ugyancsak \mathfrak{R} -ből kerülnek ki, az R operátor tehát \mathfrak{R} bizonyos f elemeihez \mathfrak{R} -nek bizonyos Rf elemeit rendeli hozzá. (Nem feltétlenül minden f kerül itt szóba. Az \mathfrak{R} egyes elemeire az operáció esetleg nincs meghatározva, vagyis „értelmetlen”.) A $P_{\mathfrak{M}}$ tehát \mathfrak{R} -ben mindenütt értelmezett operátor, amelynek neve: \mathfrak{M} projekciós operátora, vagy egyszerűen \mathfrak{M} projektora.

11. Tétel: A $P_{\mathfrak{M}}$ operátor tulajdonságai a következők:

$$P_{\mathfrak{M}}(a_1 f_1 + \dots + a_n f_n) = a_1 P_{\mathfrak{M}} f_1 + \dots + a_n P_{\mathfrak{M}} f_n,$$

$$(P_{\mathfrak{M}} f, g) = (f, P_{\mathfrak{M}} g),$$

$$P_{\mathfrak{M}}(P_{\mathfrak{M}} f) = P_{\mathfrak{M}} f.$$

Az \mathfrak{M} a $P_{\mathfrak{M}}$ -nek értékkészlete, más szóval a $P_{\mathfrak{M}} f$ alakú elemek halmaza. Az \mathfrak{M} azonban úgy is jellemezhető, mint a $P_{\mathfrak{M}} f = f$ egyenlet összes megoldásainak halmaza, míg $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ a $P_{\mathfrak{M}} f = 0$ egyenlet összes megoldásainak halmaza.

Megjegyzés: A következő szakaszokban majd látni fogjuk, hogy az első tulajdonság az ún. lineáris operátorokra, a második pedig az ún. hermitikus operátorokra jellemző. A harmadik azt jelenti, hogy $P_{\mathfrak{M}}$ -et kétszer alkalmazva ugyanazt kapjuk, mint amikor egyszer alkalmazzuk. Ennek szokásos szimbolikus írásmódja a következő:

$$P_{\mathfrak{M}} P_{\mathfrak{M}} = P_{\mathfrak{M}}, \quad \text{vagy pedig} \quad P_{\mathfrak{M}}^2 = P_{\mathfrak{M}}.$$

Bizonyítás: Ha

$$f_1 = g_1 + h_1, \dots, f_n = g_n + h_n,$$

(g_1, \dots, g_n az \mathfrak{M} -nek, h_1, \dots, h_n az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -nek eleme) akkor

$$a_1 f_1 + \dots + a_n f_n = a_1 g_1 + \dots + a_n g_n + a_1 h_1 + \dots + a_n h_n$$

($a_1 g_1 + \dots + a_n g_n$ az \mathfrak{M} -nek, $a_1 h_1 + \dots + a_n h_n$ az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -nek eleme), tehát

$$P_{\mathfrak{M}}(a_1 f_1 + \dots + a_n f_n) = a_1 g_1 + \dots + a_n g_n = a_1 P_{\mathfrak{M}} f_1 + \dots + a_n P_{\mathfrak{M}} f_n.$$

Ez volt az első bizonyítandó állítás.

Legyen továbbá $f = g' + h'$, $g = g'' + h''$ (g', g'' az \mathfrak{M} -nek, h', h'' az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -nek eleme), ekkor g' és g'' ortogonális h' -re és h'' -re, tehát

$$(g', g) = (g', g'' + h'') = (g', g'') = (g' + h', g'') = (f, g''),$$

vagyis $(P_{\mathfrak{M}} f, g) = (f, P_{\mathfrak{M}} g)$, ami nem egyéb, mint a második bizonyítandó állítás.

A $P_{\mathfrak{M}} f$ az \mathfrak{M} -nek eleme tehát a 10. Tételben kimondottak alapján $P_{\mathfrak{M}} f$ felbontása $P_{\mathfrak{M}} f = P_{\mathfrak{M}} f + 0$. Tehát $P_{\mathfrak{M}}(P_{\mathfrak{M}} f) = P_{\mathfrak{M}} f$, és ez a harmadik bizonyítandó állítás.

A $P_{\mathfrak{M}} f = f$ és a $P_{\mathfrak{M}} f = 0$ összefüggés azt jelenti, hogy az $f = g + h$ (g az \mathfrak{M} -nek, h az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -nek eleme) felbontásban (10. Tétel) $f = g$, $h = 0$, illetőleg $g = 0$, $f = h$; vagyis az f az \mathfrak{M} -hez, illetőleg az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -hez tartozik. Ez volt az ötödik és a hatodik bizonyítandó állítás. Minden $P_{\mathfrak{M}} f$ az \mathfrak{M} -hez tartozik és \mathfrak{M} -nek bármely f' eleme

$P_{\mathfrak{M}}f$ alakú, nevezetesen a fenti állítások szerint $P_{\mathfrak{M}}f'$ -vel egyenlő, ez pedig a negyedik bizonyítandó állítás.

Megjegyezzük, hogy a második és a harmadik állítás szerint:

$$(P_{\mathfrak{M}}f, P_{\mathfrak{M}}g) = (f, P_{\mathfrak{M}}P_{\mathfrak{M}}g) = (f, P_{\mathfrak{M}}g) = (P_{\mathfrak{M}}f, g).$$

Most a projekciós operátorokat \mathfrak{M} -től függetlenül jellemezzük.

12. Tétel: A mindenütt értelmezett E operátor (lásd a 11. Tételt megelőző gondolatmenetet) akkor és csakis akkor projektora valamilyen \mathfrak{M} zárt lineáris sokaságnak (vagyis $E = P_{\mathfrak{M}}$), ha

$$(Ef, g) = (f, Eg) \text{ és } E^2 = E$$

(lásd a 11. Tétel megjegyzését). Ekkor E egyértelműen meghatározza \mathfrak{M} -et (a 11. Tétel szerint).

Bizonyítás: E feltételek szükségessége csakúgy, mint az, hogy E az \mathfrak{M} -et meghatározza, a 11. Tételből nyilvánvaló. Így csak azt kell megmutatnunk, hogy ha E a fenti tulajdonságokkal rendelkezik, akkor létezik olyan \mathfrak{M} zárt lineáris sokaság, amelyre $E = P_{\mathfrak{M}}$.

Legyen \mathfrak{M} az összes Ef elem által kifeszített zárt lineáris sokaság. Ekkor $g - Eg$ minden Ef -re ortogonális:

$$(Ef, g - Eg) = (Ef, g) - (Ef, Eg) = (Ef, g) - (E^2f, g) = 0.$$

A $g - Eg$ -re ortogonális elemek zárt lineáris sokaságot alkotnak, amely tehát \mathfrak{M} -et tartalmazza, így $g - Eg$ az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -hez tartozik. A g -nek az \mathfrak{M} -re vonatkozó felbontása tehát (10. Tétel) $g = Eg + (g - Eg)$, vagyis $P_{\mathfrak{M}}g = Eg$, tetszőleges g -re. Így a tételt bizonyítottuk.

Ha $\mathfrak{M} = \mathfrak{R}$ vagy $\mathfrak{M} = [0]$, akkor $\mathfrak{R} - \mathfrak{M} = [0]$, illetőleg $\mathfrak{R} - \mathfrak{M} = \mathfrak{R}$, így f felbontása a 11. Tétel értelmében $f = f + 0$, illetőleg $f = 0 + f$. Így $P_{\mathfrak{M}}f = f$, illetőleg $P_{\mathfrak{M}}f = 0$. Azt a mindenütt értelmezett R operátort, amelyre $Rf = f$, 1-gyel, amelyre pedig $Rf = 0$, azt 0-sal jelöljük. Így $P_{\mathfrak{R}} = 1$ és $P_{[0]} = 0$. Az is világos, hogy az \mathfrak{M} -re vonatkozó $f = g + h$ felbontás (g az \mathfrak{M} -nek, h pedig az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -nek eleme) $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -re vonatkozó felbontásként is értelmezhető: $f = h + g$ (h az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -nek, g pedig \mathfrak{M} -nek az eleme). (Ha ugyanis g az \mathfrak{M} -hez tartozik, akkor ortogonális lévén $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ minden elemére, egyúttal $\mathfrak{R} - (\mathfrak{R} - \mathfrak{M})$ -hez is hozzá tartozik. Így $P_{\mathfrak{M}}f = g$, $P_{\mathfrak{R} - \mathfrak{M}}f = h = f - g$, vagyis $P_{\mathfrak{R} - \mathfrak{M}}f = f - P_{\mathfrak{M}}f$. Azt, hogy $P_{\mathfrak{R} - \mathfrak{M}}f = 1 \cdot f - P_{\mathfrak{M}}f$, szimbolikusan így fejezhetjük ki: $P_{\mathfrak{R} - \mathfrak{M}} = 1 - P_{\mathfrak{M}}$ (az operátorok összeadására, kivonására és szorzására vonatkozóan lásd a 14. Tétel bizonyítását).

A következőt vegyük észre: az imént rádöbentünk arra, hogy \mathfrak{M} részhalmaza $\mathfrak{R} - (\mathfrak{R} - \mathfrak{M})$ -nek. Közvetlenül elég nehéz bebizonyítani, hogy e két halmaz egyenlő. Ez azonban azonnal következik abból, hogy

$$P_{\mathfrak{R} - (\mathfrak{R} - \mathfrak{M})} = 1 - P_{\mathfrak{R} - \mathfrak{M}} = 1 - (1 - P_{\mathfrak{M}}) = P_{\mathfrak{M}}.$$

Mi több, ebből következik, hogy ha E projektor, akkor $1 - E$ is az és tekintve, hogy $1 - (1 - E) = E$ ez fordítva is igaz.

13. Tétel: Minden f -re igaz, hogy

$$\|Ef\|^2 = (Ef, f), \quad \|Ef\| \leq \|f\|,$$

az $\|Ef\| = 0$, ill. $\|Ef\| = \|f\|$ az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -beli, illetőleg \mathfrak{M} -beli f elemre jellemző.
Megjegyzés: Ekkor:

$$\|Ef - Eg\| = \|E(f - g)\| \leq \|f - g\|,$$

tehát E folytonos (lásd a 2. Tételt követő gondolatmenetet a II. fejezetben).

Bizonyítás: A 11. Tételt követő meggondolás szerint

$$\|Ef\|^2 = (Ef, Ef) = (Ef, f).$$

Viszont $1 - E$ is projektor, tehát

$$\|Ef\|^2 + \|f - Ef\|^2 = \|Ef\|^2 + \|(1 - E)f\|^2 = (Ef, f) + ((1 - E)f, f) = (f, f) = \|f\|^2.$$

Mindkét összeadandó ≥ 0 , így mindkettőjük külön-külön $\leq \|f\|^2$, tehát $\|Ef\|^2 \leq \|f\|^2$, $\|Ef\| \leq \|f\|$. Ha $\|Ef\| = 0$, $Ef = 0$, akkor f , amint az a 11. Tételből ismeretes, $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -nek eleme. A fenti összefüggés miatt $\|Ef\| = \|f\|$ azt jelenti, hogy $\|f - Ef\| = 0$, $Ef = f$, tehát a 11. Tétel szerint f az \mathfrak{M} -nek eleme.

Ha R és az S két operátor, az $R \pm S$, aR (az a komplex szám) és az RS operátoron a következőt értjük:

$$(R \pm S)f = Rf \pm Sf, \quad (aR)f = a(Rf); \quad (RS)f = R(Sf).$$

Használjuk még a természetes

$$R^0 = 1, \quad R^1 = R, \quad R^2 = RR; \quad R^3 = RRR, \dots$$

jelölést is. A számolási szabályokat elég könnyű áttekinteni. Az $R \pm S$ és az aR esetében nem nehéz belátni, hogy a számokra érvényes minden számolási szabály alkalmazható. Az RS -nél azonban más a helyzet. Ahogy az könnyen igazolható, a disztributív szabály érvényes: $(R \pm S)T = RT \pm ST$ és $R(S \pm T) = RS \pm RT$, az utóbbi esetben R természetesen szükségképpen lineáris (lásd a 11. Tétel megjegyzését és a következő paragrafust). Az asszociatív szabály ugyancsak igaz: $(RS)T = R(ST) = RST$, azonban az $RS = SR$ kommutatív szabály általában nem érvényes. (Az $(RS)f = R(Sf)$ és $(SR)f = S(Rf)$ nem szükségképpen egyenlő egymással!) Ha e szabály R -re és S -re teljesül, akkor azt mondjuk, hogy R és S felcserélhető egymással. Így például 0 és 1 bármely mindenütt értelmezett R -rel felcserélhető:

$$R0 = 0R = 0, \quad R1 = 1R = R.$$

Az R^m és R^n is felcserélhető egymással, hiszen $R^m R^n = R^{m+n}$ és ez nem függ m és n sorrendjétől.

14. Tétel: Legyen E és F az \mathfrak{M} , illetőleg az \mathfrak{R} zárt lineáris sokasághoz tartozó projektor. Az EF akkor és csak akkor projektor, ha E és F felcserélhető egymással, vagyis ha $EF = FE$, ekkor EF az \mathfrak{M} és \mathfrak{R} közös elemeiből álló \mathfrak{P} zárt lineáris sokasághoz tartozik. Az $E + F$ operátor akkor és csak akkor projektor, ha $EF = 0$ (vagy, ami ugyanaz, $FE = 0$). Ez azt jelenti, hogy \mathfrak{M} ortogonális \mathfrak{R} -re és $E + F$ ekkor

$\mathfrak{M} + \mathfrak{N} = [\mathfrak{M}, \mathfrak{N}]$ -hez tartozik; ebben az esetben $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}] = \{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$. Az $E - F$ operátor akkor és csak akkor projektor, ha $EF = F$ (vagy, ami ugyanaz, $FE = F$). Ez azt jelenti, hogy \mathfrak{N} részhalmaza \mathfrak{M} -nek és $E - F$ az $\mathfrak{M} - \mathfrak{N}$ -hez tartozik.

Bizonyítás: Használjuk fel a 12. Tétel két feltételét:

$$(EFf, g) = (f, EFg), \quad (EF)^2 = EF.$$

Ám $(EFf, g) = (Ff, Eg) = (f, FEg)$, tehát az elsővel

$$(f, EFg) = (f, FEg), \quad (f, (EF - FE)g) = 0.$$

Ez azonban minden f -re igaz, tehát $(EF - FE)g = 0$, ez viszont minden g -re érvényes, vagyis $EF - FE = 0$, $EF = FE$. A felcserélhetőség tehát szükséges és elégséges az első feltételhez, a második meg következmény:

$$(EF)^2 = EF EF = EE FF = E^2 F^2 = EF.$$

Mint hogy az $E + F$ az $((E + F)f, g) = (f, (E + F)g)$ feltételt mindig kielégíti (ha csak E és F kielégíti), tehát csak azt kell igazolni, hogy $(E + F)^2 = E + F$. Mint hogy

$$(E + F)^2 = E^2 + F^2 + EF + FE = (E + F) + (EF + FE),$$

ebből következik, hogy $EF + FE = 0$. Ha $EF = 0$, akkor EF projektor, tehát az előbbieket értelmében $EF = FE$, ezért $EF + FE = 0$. Fordítva, ha $EF + FE = 0$, akkor

$$E(EF + FE) = E^2 F + EFE = EF + EFE = 0,$$

$$E(EF + FE)E = E^2 FE + EFE^2 = EFE + EFE = 2 \cdot EFE = 0,$$

tehát $EFE = 0$, s így $EF = 0$. Következésképpen $EF = 0$, és tekintve, hogy E és F szerepe egyforma, azért $FE = 0$ is szükséges és elégséges feltétel.

Az $E - F$ akkor és csak akkor projektor, ha $1 - (E - F) = (1 - E) + F$ is az, és mivel $1 - E$ és F projektor, azért az előzők szerint $(1 - E)F = 0$, $F - EF = 0$, $EF = F$, vagy — ami ugyanaz — $F(1 - E) = 0$, $F - FE = 0$, $FE = F$.

Be kell még látni az \mathfrak{M} -re és az \mathfrak{N} -re vonatkozó állításokat ($E - P_{\mathfrak{M}}, F = P_{\mathfrak{N}}$). Először legyen $EF = FE$. Ekkor $EFf = FEf$ mind \mathfrak{M} -nek, mind pedig \mathfrak{N} -nek, következésképpen \mathfrak{P} -nek eleme, bármely f -re. Viszont \mathfrak{P} -nek valamennyi g elemére $Eg = Fg = g$, tehát $EFg = Eg = g$, vagyis g ilyen alakú: EFf . Következésképpen EF értékkészlete \mathfrak{P} , tehát a 11. Tétel szerint $EF = P_{\mathfrak{P}}$. Másodszor legyen $EF = 0$ (tehát FE is zérus). Az $(E + F)f = Ef + Ff$ bármely f -re $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ -hez tartozik és $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ tetszőleges g eleme $h + j$ alakú (ahol h az \mathfrak{M} -nek, j az \mathfrak{N} -nek eleme), tehát $Eh = h$, $Fh = FEh = 0$, $Fj = j$, $Ej = EFj = 0$, ami azt jelenti, hogy

$$(E + F)(h + j) = Eh + Fh + Ej + Fj = h + j, \quad (E + F)g = g,$$

tehát g ilyen alakú: $(E + F)f$. Következésképpen $E + F$ értékkészlete $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$, ám mivel $E + F$ projektor, a hozzá tartozó zárt lineáris sokaság $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ (11. Tétel). Mivel $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ zárt ezért $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}] = \mathfrak{M} + \mathfrak{N}$. Harmadszor legyen $EF = F$ (tehát $FE = F$ is igaz). Ekkor $E = P_{\mathfrak{M}}$, $1 - F = P_{\mathfrak{N} - \mathfrak{M}}$, s így $E - F = E - EF = E(1 - F)$, ami $P_{\mathfrak{M}}$ -vel egyenlő, ahol \mathfrak{P} az \mathfrak{M} -nek és $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$ -nek közös része, vagyis $\mathfrak{M} - \mathfrak{N}$.

Végül $EF=0$ azt jelenti, hogy $(EFf, g)=0$ minden f -re és g -re, továbbá $(Ff, Eg)=0$, más szóval \mathfrak{M} ortogonális \mathfrak{N} -re. Az $EF=F$ azt jelenti, hogy $F(1-E)=0$, tehát \mathfrak{N} ortogonális $\mathfrak{R}-\mathfrak{M}$ -re, vagy más szóval \mathfrak{N} az $\mathfrak{R}-(\mathfrak{R}-\mathfrak{M})=\mathfrak{M}$ részhalmaza.

Ha \mathfrak{N} részhalmaza \mathfrak{M} -nek, akkor az $F=P_{\mathfrak{N}}$ és az $E=P_{\mathfrak{M}}$ operátorokra is mondhatjuk, hogy F része E -nek, szimbolikusan $E \geq F$ vagy $F \leq E$. (Ez annyit jelent, hogy $EF=F$ vagy $FE=F$. A felcserélhetőség tehát következmény. A következők beláthatók vagy \mathfrak{M} és \mathfrak{N} vizsgálatával, vagy közvetlen számolással: Mindig igaz, hogy $0 \leq E \leq 1$; $E \leq F, F \leq E$ következménye $E=F$. $E \leq F, F \leq G$ következménye $E \leq G$. A \leq jelünk rendelkezik egy nagyság szerinti rendezés tulajdonságaival. Figyeljük még meg, hogy $E \leq F, 1-E \geq 1-F$ és E ortogonális $1-F$ -re, mindhárom ekvivalens egymással. Továbbá E' és F' ortogonalitása E és F ortogonalitásából következik, ha $E' \leq E$ és $F' \leq F$.) Ha \mathfrak{M} és \mathfrak{N} ortogonálisak egymásra, akkor E -re és F -re is ezt mondjuk. (Ez azt jelenti, hogy $EF=0$ vagy $FE=0$.) Ha E és F felcserélhető egymással, akkor ugyanezt mondjuk \mathfrak{M} -re és \mathfrak{N} -re.

15. Tétel: $E \leq F$ egyenértékű azzal, hogy $\|Ef\| \leq \|Ff\|$ minden f -re.

Bizonyítás: $E \leq F$ -ből következik, hogy $E=EF$ ezért $\|Ef\| = \|EFf\| \leq \|Ff\|$ (lásd a 13. Tételt). Fordítva, ennek az összefüggésnek a következménye, hogy ha $Ff=0$, akkor $Ef=0$, tudniillik $\|Ef\| \leq \|Ff\| = 0$, az $F(1-F)f = (F-F^2)f=0$ miatt $E(1-F)f=0$ azonosan teljesül, tehát $E(1-F)=E-EF=0$, $E=EF$, ezért $E \leq F$.

16. Tétel: Legyenek E_1, \dots, E_k projektorok. Az $E_1 + \dots + E_k$ akkor és csak akkor projektor, ha E_m és E_l ($m, l=1, \dots, k; m \neq l$) ortogonális egymásra. Egy másik szükséges és elégséges feltétel, hogy

$$\|E_1 f\|^2 + \dots + \|E_k f\|^2 \leq \|f\|^2$$

minden f -re teljesüljön. Ekkor $E_1 + \dots + E_k$ ($E_1 = P_{\mathfrak{M}_1}, \dots, E_k = P_{\mathfrak{M}_k}$) az $\mathfrak{M}_1 + \dots + \mathfrak{M}_k = [\mathfrak{M}_1, \dots, \mathfrak{M}_k]$ projektora, ez pedig ekkor egyenlő $\{\mathfrak{M}_1, \dots, \mathfrak{M}_k\}$ -val.

Bizonyítás: Az utolsó állítás a 14. Tétel ismételt alkalmazásával kapható. Ugyanígy igazolható az első feltétel szükségessége is. Ha a második feltétel teljesül, akkor az első is. Ha ugyanis $m \neq l$ és valamely f -re $E_m f = f$, akkor

$$\|f\|^2 + \|E_l f\|^2 = \|E_m f\|^2 + \|E_l f\|^2 \leq \|E_1 f\|^2 + \dots + \|E_k f\|^2 \leq \|f\|^2, \\ \|E_l f\|^2 = 0, \quad E_l f = 0.$$

Viszont $E_m(E_m f) = E_m f$ azonosan érvényes, ezért $E_l(E_m f) = 0$, vagyis $E_l E_m = 0$. Végül a második feltétel szükséges. Ha ugyanis $E_1 + \dots + E_k$ projektor, akkor (a 13. Tétel szerint)

$$\|E_1 f\|^2 + \dots + \|E_k f\|^2 = (E_1 f, f) + \dots + (E_k f, f) = \\ = ((E_1 + \dots + E_k) f, f) = \|(E_1 + \dots + E_k) f\|^2 \leq \|f\|^2.$$

Bebizonyítottuk tehát a következő logikai sémát:

$$E_1 + \dots + E_k \text{ projektor} \rightarrow \text{második feltétel} \rightarrow \\ \rightarrow \text{első feltétel} \rightarrow E_1 + \dots + E_k \text{ projektor.}$$

Így a három elvivalens egymással. —

Befejezésül bebizonyítunk még egy tételt a projektorok konvergenciájáról:

17. Tétel: Legyen E_1, E_2, \dots a projektorok növekvő vagy csökkenő sorozata: $E_1 \leq E_2 \leq \dots$ vagy pedig $E_1 \geq E_2 \geq \dots$. A sorozat mindkét esetben valamely E projektorhoz tart olyan értelemben, hogy $E_n f \rightarrow E f$ bármely f -re; mégpedig minden $E_n \leq E$, illetőleg minden $E_n \geq E$.

Bizonyítás: Az első eset az $1 - E_1, 1 - E_2, \dots, 1 - E$ helyettesítéssel a másodikba megy át. Ezért elég a másodikkal foglalkozni. Legyen ezért $E_1 \geq E_2 \geq \dots$.

A 15. Tétel szerint $\|E_1 f\|^2 \geq \|E_2 f\|^2 \geq \dots \geq 0$, tehát $\lim_{m \rightarrow \infty} \|E_m f\|^2$ létezik. Így tetszőleges $\varepsilon > 0$ esetén létezik olyan $N = N(\varepsilon)$, hogy $m, l \geq N$ -re

$$\| \|E_m f\|^2 - \|E_l f\|^2 \| < \varepsilon.$$

Ha $m \leq l$ akkor $E_m \geq E_l$ és $E_m - E_l$ projektor, tehát

$$\begin{aligned} \|E_m f\|^2 - \|E_l f\|^2 &= (E_m f, f) - (E_l f, f) = ((E_m - E_l) f, f) = \|(E_m - E_l) f\|^2 = \\ &= \|E_m f - E_l f\|^2, \end{aligned}$$

amiből következik, hogy $\|E_m f - E_l f\| < \sqrt{\varepsilon}$. Az $E_1 f, E_2 f, \dots$ sorozat kielégíti a Cauchy-konvergenciakritériumot s így annak f^* limesze létezik (II. 1. fejezetben a D. feltevés!). Az $E f = f^*$ tehát mindenütt értelmezett operátort definiál.

Az $(E_n f, g) = (f, E_n g)$ egyenletből határátmenettel következik, hogy $(E f, g) = (f, E g)$, ugyanígy $(E_n f, E_n g) = (E_n f, g)$ következménye $(E f, E g) = (E f, g)$ tehát $(E^2 f, g) = (E f, g)$ vagyis $E^2 = E$. Következésképpen E projektor. Az $l \geq m$ esetén $\|E_m f\| \geq \|E_l f\|$, tehát ha $l \rightarrow \infty$, akkor $\|E_m f\| \geq \|E f\|$, vagyis $E_m \geq E$ (15. Tétel).

Ha E_1, E_2, \dots páronként ortogonális projektorok sorozata, akkor

$$E_1, E_1 + E_2, E_1 + E_2 + E_3, \dots$$

növekvő projektorsorozat. A 17. Tétel értelmében ez a sorozat bármely tagjánál nagyobb projektorhoz tart, amelyet így jelölünk: $E_1 + E_2 + \dots$. Legyen $E_1 = P_{\mathfrak{M}_1}$, $E_2 = P_{\mathfrak{M}_2}, \dots$, $E_1 + E_2 + \dots = P_{\mathfrak{M}}$. Mivel $E_m \leq E$ minden m -re, \mathfrak{M}_m részhalmaza \mathfrak{M} -nek, ezért \mathfrak{M} tartalmazza az $[\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \dots] = \mathfrak{M}_1 + \mathfrak{M}_2 + \dots$ halmazt. Fordítva, bármely \mathfrak{M}_m részhalmaza \mathfrak{M}' -nek, tehát $E_m \leq P_{\mathfrak{M}'} = E'$. Következésképpen határátmenettel adódik (lásd a fenti bizonyítást), hogy $E = E'$, tehát \mathfrak{M} részhalmaza \mathfrak{M}' -nek, tehát $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}'$, $E = E'$, vagyis $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}_1 + \mathfrak{M}_2 + \dots$, vagy más szóval

$$P_{\mathfrak{M}_1 + \mathfrak{M}_2 + \dots} = P_{\mathfrak{M}_1} + P_{\mathfrak{M}_2} + \dots$$

Ezzel befejeztük a projekciós operátorok tanulmányozását.

5. Operátorok a Hilbert-térben

Az \mathfrak{R}_x (Hilbert-) tér geometriai viszonyairól már elég sokat megismertünk ahhoz, hogy áttérhessünk az \mathfrak{R}_x -t önmagára lineárisan leképező lineáris operáto-

rok tanulmányozására. E célból számos fogalmat kell először bevezetni. Ezek egy részét az utóbbi néhány szakaszban már felhasználtuk.

Operátorokkal már foglalkoztunk, most megadjuk a meghatározásukat (a 11. Tételt megelőző állításokkal összhangban).

6. *Definíció.* Az R operátor \mathfrak{R} valamely részhalmazán értelmezett függvény, amelynek értékkészlete ismét \mathfrak{R} részhalmaza, vagyis megfeleltetés \mathfrak{R} -nek bizonyos f és bizonyos Rf elemei között.

(Itt az \mathfrak{R}_∞ mellett megengedjük az \mathfrak{R}_n -et is. Felhívjuk a figyelmet arra, hogy ha \mathfrak{R}_∞ éppen az F_Ω , akkor az R operátor F_Ω elemein, tehát a konfigurációs tér függvényein van értelmezve és értéke ismét ilyen függvény. Az ilyen operátorokat szokás „függvények függvényeinek” vagy „funkcionáloknak” is nevezni. Lásd az I. 2. fejezet 4. példáit.) Az R értelmezési tartománya, vagyis azon f függvények osztálya, amelyre Rf értelmezve van, nem feltétlenül fedi le az egész \mathfrak{R} -et, ha azonban igen, akkor azt mondjuk, hogy R mindenütt értelmezve van. Az sem szükségszerű, hogy az Rf -ek halmaza, vagyis R értékkészlete az R értelmezési tartományába essék, tehát Rf ugyan értelmezve van, de az nem következik szükségképpen, hogy $R(Rf) = R^2f$ -nek is van értelme.⁵⁸

Az előző fejezetben már megadtuk $R \pm S$, aR , R^m , RS jelentését (itt R és S operátor, a komplex szám, $m=0, 1, 2, \dots$):

$$(R \pm S)f = Rf \pm Sf, (aR)f = a \cdot Rf, (RS)f = R(Sf),$$

$$R^0 = 1, R^1 = R, R^2 = RR, R^3 = RRR, \dots$$

Eme operátorok értelmezési tartományának meghatározásakor arra kell figyelni, hogy a bal oldalaknak (tehát az $R \pm S$, aR , RS operátoroknak) csak akkor van értelmük, ha a jobb oldalak értelmezve vannak. Így például $R \pm S$ csak R és S értelmezési tartományának közös részén van értelmezve. Ha R bármely értékét csak egyszer veszi fel, akkor létezik inverze: R^{-1} . Az R^{-1} akkor van értelmezve az f elemen, ha az $Rg = f$ egyenletnek létezik egyértelmű g megoldása; R^{-1} értéke f -re éppen g . Az előző szakaszban megbeszéltük az $R \pm S$, aR , RS operátorokra érvényes számolási szabályokat, itt csak az értelmezési tartományokkal kapcsolatban tesszük még hozzá a következőket. Az egymással egyenlő operátorok értelmezési tartományai is azonosak. A $0 \cdot R = 0$ alakú operátoregyenletek az értelmezési tartományokra nem érvényesek. A $0 \cdot f$ -nek mindig van értelme, ám $(0 \cdot R)f$ -nek definíció szerint csak akkor, ha Rf értelmezve van (ha azonban mindkettő értelmes, akkor mindkettő zérus). Másrésztől azonban az $1 \cdot R = R \cdot 1 = R$ és az $R^m \cdot R^l = R^{m+l}$ egyenletek az értelmezési tartományok szerint is igazak.

Ha R -nek és S -nek van inverze, akkor RS -nek is van és, amint az könnyen belátható: $(RS)^{-1} = S^{-1}R^{-1}$. Ha $a \neq 0$, akkor $(aR)^{-1} = \frac{1}{a}R^{-1}$. Ha R^{-1} létezik, akkor R negatív hatványai is képezhetők:

$$R^{-2} = R^{-1} \cdot R^{-1}, R^{-3} = R^{-1} \cdot R^{-1} \cdot R^{-1}, \dots$$

Eme általános megfontolások után a számunkra különösen fontos operátorok osztályait vizsgáljuk meg részletesebben.

7. *Definíció.* Az A operátort akkor mondjuk lineárisnak, ha értelmezési tartománya lineáris sokaság, vagyis az f_1, \dots, f_k elemekkel együtt tartalmazza az $a_1 f_1 + \dots + a_k f_k$ alakú lineáris kombinációkat is, és ha

$$A(a_1 f_1 + \dots + a_k f_k) = a_1 A f_1 + \dots + a_k A f_k.$$

A továbbiakban csak lineáris operátorokkal foglalkozunk, sőt csupán olyanokkal, amelyeknek értelmezési tartománya mindenütt sűrű.

Az utóbbi megjegyzés megkötése igen sok esetben kielégítően helyettesíti azt a követelményt, hogy az operátor legyen mindenütt értelmezve, ezt ugyanis a kvantummechanikában sokszor el kell hagyni. Ez a körülmény elég lényeges, ezért részletesebben is megvizsgáljuk. Tekintsük például a *Schrödinger*-féle hullámmechanika konfigurációs terét, amelyet az egyszerűség kedvéért egydimenziósnek tételezünk fel: $-\infty < q < +\infty$. A $\varphi(q)$ hullámfüggvényekre az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq$$

véges. Ezek *Hilbert*-teret alkotnak (lásd a II. 3. fejezetet). Tekintsük a $q \dots$ és a $\frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dq} \dots$ operátorokat, amelyek nyilvánvalóan lineáris operátorok, de értelmezési tartományuk nem az egész *Hilbert*-tér. A $q \dots$ esetében ugyanis az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |q\varphi(q)|^2 dq = \int_{-\infty}^{+\infty} q^2 |\varphi(q)|^2 dq$$

jócskán végtelen lehet még akkor is, ha az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq$$

véges, tehát $q\varphi(q)$ már nem tartozik a *Hilbert*-térhez. Ugyanez a helyzet a $\frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dq}$ -val is, hiszen egyrészt vannak nemdifferenciálható függvények is, másrészt olyanok is, amelyekre

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dq} \varphi(q) \right|^2 dq = \frac{h^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d}{dq} \varphi(q) \right|^2 dq$$

végtelen, noha az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq$$

véges (ilyen például a $|q|^{-2} e^{-q^2}$, vagy az $e^{-q^2} \sin(e^{q^2})$ függvény). Az értelmezési tartományok azonban mindenütt sűrűek. Mindkét operátor alkalmazható minden olyan mindenütt folytonosan differenciálható $\varphi(q)$ függvényre, amely csak a véges

$-c \leq q \leq c$ intervallumban különbözik zérustól, e függvények halmaza azonban mindenütt sűrű.⁵⁹

8. *Definíció.* Az A és A^* operátorok egymás adjungáltjai, ha értelmezési tartományuk megegyezik és e tartományban

$$(Af, g) = (f, A^*g), \quad (A^*f, g) = (f, Ag)$$

(f és g felcserélésével és mindkét oldal komplex konjugálásával e két összefüggés egymásba megy át. Világos továbbá, hogy az A, A^* reláció szimmetrikus, vagyis, hogy A^* és A is egymás adjungáltja, tehát $A^{**} = A$.)

Megjegyezzük továbbá, hogy A -nak csak egy adjungáltja lehet, hiszen ha A_1^* és A_2^* is A adjungáltja, akkor $A_1^* = A_2^*$. Valóban, minden olyan g -re, amelyre Ag értelmezve van:

$$(A_1^*f, g) = (f, Ag) = (A_2^*f, g),$$

s tekintve, hogy e g -k mindenütt sűrűn helyezkednek el, azért $A_1^*f = A_2^*f$, ez azonban mindig igaz, így $A_1^* = A_2^*$. Így A az A^* -ot és A^* pedig A -t egyértelműen meghatározza.

Azonnal belátható, hogy a $0, 1$ és egyáltalán minden E projektor önadjungált (lásd a 12. Tételt), vagyis $0^*, 1^*, E^*$ létezik és rendre egyenlő a $0, 1, E$ operátorokkal. Az is igaz, hogy $(aA)^* = \bar{a}A^*$, és ha $A \pm B$ képezhető (azaz értelmezési tartományuk mindenütt sűrű), akkor $(A \pm B)^* = A^* \pm B^*$. Végül az értelmezési tartományokra vonatkozó, könnyen kideríthető korlátozásokkal $(AB)^* = B^*A^*$ (ugyanis $(ABf, g) = (Bf, A^*g) = (f, B^*A^*g)$), hasonlóképpen $(A^{-1})^* = A^{*-1}$ (mert $(A^{-1}f, g) = (A^{-1}f, A^*A^{*-1}g) = (AA^{-1}f, A^{*-1}g) = (f, A^{*-1}g)$).

Nevezetesen a *Schrödinger*-féle hullámmechanika esetében (amelyet már az előbb idéztünk, most azonban k -dimenziós konfigurációs teret tétélezzünk fel), amikor is a *Hilbert*-tér olyan $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ függvényekből áll, amelyekre az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

véges, a q_1, \dots és $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots$ operátorokra:

$$(q_i)^* = q_i, \quad \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_i} \right)^* = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_i}.$$

Az elsőt könnyű belátni:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} q_i \cdot \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k = \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot q_i \cdot \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k. \end{aligned}$$

A második azt jelenti, hogy

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l} \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot \overline{\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l} \psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k,$$

más szóval:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\partial}{\partial q_l} \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} + \right.$$

$$\left. + \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot \overline{\frac{\partial}{\partial q_l} \psi(q_1, \dots, q_k)} \right\} dq_1 \dots dq_k = 0,$$

illetőleg

$$\lim_{\substack{A \rightarrow +\infty \\ B \rightarrow +\infty}} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} [\varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)}]_{q_l = -B}^{q_l = +A} \times$$

$$\times dq_1 \dots dq_{l-1} dq_{l+1} \dots dq_k = 0.$$

A határértéknek léteznie kell, mert minden

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \dots dq_1 \dots dq_k$$

integrál biztosan konvergens (hiszen $\varphi, \psi, \frac{\partial}{\partial q_l} \varphi, \frac{\partial}{\partial q_l} \psi$ mind a *Hilbert-tér* elemei).

Csak az a lényeges, hogy e határérték valóban el is tűnik-e? Ha nem tűnnék el, akkor az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_{l-1} dq_{l+1} \dots dq_k$$

határértéke $q_l \rightarrow +\infty$ vagy $q_l \rightarrow -\infty$ esetben nem volna zérus, ami nem egyeztethető össze az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_{l-1} dq_l dq_{l+1} \dots dq_k$$

abszolút konvergenciájával (φ és ψ a *Hilbert-tér* elemei).

Ha A integráloperátor:

$$A\varphi(q_1, \dots, q_k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} K(q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k,$$

akkor közvetlenül adódik, hogy A^* is integráloperátor, amelynek magja azonban nem

$$\text{hanem } \frac{K(q_1, \dots, q_k, q'_1, \dots, q'_k),}{K(q'_1, \dots, q'_k, q_1, \dots, q_k)}.$$

Vizsgáljuk most meg a mátrixelméletet, ahol a *Hilbert-tér* az olyan x_1, x_2, \dots sorozatokból áll, amelyekre

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} |x_{\mu}|^2$$

véges. Az A lineáris operátor alkalmazásakor (x_1, x_2, \dots) transzformáltja (y_1, y_2, \dots) lesz:

$$A(x_1, x_2, \dots) = (y_1, y_2, \dots).$$

Az A lineáris volta miatt (y_1, y_2, \dots) lineárisan függ (x_1, x_2, \dots) -től:

$$y_{\mu} = \sum_{\nu=1}^{\infty} a_{\mu\nu} x_{\nu}.^{60}$$

Az A -t tehát az $a_{\mu\nu}$ mátrix jellemzi. Könnyen látható, hogy $\bar{a}_{\nu\mu}$ ($a_{\mu\nu}$ komplex konjugáltja és transzponáltja) az A^* mátrixa lesz.

A mátrixmechanika e tulajdonsága igen hasonló a véges mátrixok elméletéhez, ezért kézenfekvő a hermitikus operátor fogalmának bevezetése. Ezzel egyidőben két további fogalmat is bevezetünk; ezekre a későbbiekben még szükségünk lesz.

9. *Definíció.* Az A operátort hermitikusnak nevezzük, ha $A^* = A$. Az A definit, ha $(Af, f) \geq 0$ minden f -re.⁶¹ Az U operátor unitér, ha $UU^* = U^*U = 1$.⁶²

Unitér operátorra tehát $U^* = U^{-1}$. A definíció szerint

$$(Uf, Ug) = (U^*Uf, g) = (f, g),$$

ezért, ha $f = g$, akkor $\|Uf\| = \|f\|$. Fordítva, e tulajdonságokból az operátor unitér jellege következik, ha U mindenütt értelmezve van és értékészlete az egész *Hilbert-tér*et befutja (lásd a 62. jegyzet). Ezt a következőképpen bizonyítjuk be. Először is

$$\|Uf\| = \|f\|, \text{ vagyis } (Uf, Uf) = (f, f); (U^*Uf, f) = (f, f).$$

Az f -et először $\frac{f+g}{2}$ -vel, majd pedig $\frac{f-g}{2}$ -vel helyettesítjük, majd a különbséget képezzük, s ekkor, amint azt könnyen kiszámíthatjuk, azt kapjuk, hogy $\text{Re}(Uf, Ug) = \text{Re}(f, g)$. Az f helyére if -et írva, a reális rész helyébe imaginárius rész kerül, következésképpen:

$$(Uf, Ug) = (f, g), \text{ vagyis } (U^*Uf, g) = (f, g).$$

Rögzített f mellett ez minden g -re igaz, tehát $U^*Uf=f$. Ez viszont minden f -re igaz, tehát $U^*U=1$. Még azt kell megmutatnunk, hogy $UU^*=1$. Bármely f -re van olyan g , hogy $Ug=f$, tehát

$$UU^*f=(UU^*)Ug=U(U^*U)g=Ug=f, \text{ vagyis } UU^*=1.$$

Minden unitér operátor folytonos, mert lineáris volta miatt

$$\|Uf-Ug\|=\|U(f-g)\|=\|f-g\|.$$

Ez nem szükségképpen igaz a hermitikus operátorokra. Például a $q \dots$ és a $\frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dq} \dots$ operátor, amely a kvantummechanikában oly fontos szerepet játszik, nem folytonos.⁶³

Az A^* kiszámítására szolgáló szabályokból azonnal következik, hogy ha U és V unitér, akkor U^{-1} és UV is az. Így U minden hatványa is unitér. Ha A és B hermitikus, akkor $A \pm B$ is az. Az aA csak akkor hermitikus, ha a valós (kivéve ha $A=0$). Az AB csak akkor hermitikus, ha A és B felcserélhető egymással, vagyis, ha $AB=BA$. Tudjuk azt is, hogy minden projektor (nevezetesen 0 és 1 is) továbbá, hogy a Schrödinger-elmélet $q_1 \dots$ és $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \dots$ operátora hermitikus. Az A minden hatványa (és A^{-1} is, ha létezik), továbbá A minden valós együtthatós polinómja hermitikus. Megjegyzendő, hogy ha A hermitikus, akkor tetszőleges X -re XAX^* is az:

$$(XAX^*)^*=X^{**}A^*X^*=XAX^*.$$

Így XX^* ($A=1$) és X^*X (X^* -ot írunk X helyébe) hermitikus. Ha U unitér, akkor UAU^{-1} is hermitikus, mert $U^{-1}=U^*$.

Az operátorok folytonossága csakúgy, mint az analízisben a függvényeké, alapvető fontosságú tulajdonság. Ezért lineáris operátorokra kimondjuk a folytonosság néhány jellemző feltételét.

18. Tétel: Az R lineáris operátor mindenütt folytonos, ha folytonos az $f=0$ pontban. Ez utóbbinak szükséges és elégséges feltétele az, hogy létezzék olyan C állandó, hogy minden f -re $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$. Ez a feltétel viszont egyenértékű azzal, hogy minden f -re és g -re

$$|(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|.$$

Hermitikus R esetén ezt csak $f=g$ -re kell megkövetelni: $|(Rf, f)| \leq C \cdot \|f\|^2$, illetőleg mivel (Rf, f) valós (lásd a 61. jegyzetet):

$$-C \cdot \|f\|^2 \leq (Rf, f) \leq C \cdot \|f\|^2.$$

Megjegyzés. Az operátorok folytonosságának fogalma HILBERTTŐL származik.⁶⁴ Ő ezt korlátosságának mondta és az utolsó előtti kritériummal definiálta. Ha az utolsó kritériumnál csak az egyik oldal teljesül, akkor R félig korlátos, mégpedig vagy alulról, vagy felülről. Minden definit R például alulról korlátos ($C=0$).

Bizonyítás: A folytonosság $f=0$ -nál azt jelenti, hogy tetszőleges $\varepsilon > 0$ -hoz tartozik olyan $\delta > 0$, hogy ha $\|f\| < \delta$, akkor $\|Rf\| < \varepsilon$. Ekkor azonban $\|f-f_0\| < \delta$ esetben

$$\|R(f-f_0)\| = \|Rf - Rf_0\| < \varepsilon,$$

vagyis R folytonos a tetszőleges f_0 helyen, vagyis mindenütt.

Ha $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$ (természetesen $C > 0$), akkor a folytonosság következik a $\delta = \frac{\varepsilon}{C}$ választással. Fordítva, ha R folytonos, akkor $\varepsilon = 1$ -hez $C = \frac{2}{\delta}$ választás mellett

$$\|Rf\| \leq C\|f\|$$

teljesül $f \neq 0$ -ra. Ekkor ugyanis $\|f\| > 0$; de legyen

$$g = \frac{\frac{1}{2}\delta}{\|f\|} f.$$

Így $\|g\| = \frac{1}{2}\delta$, tehát

$$\|Rg\| = \frac{\frac{1}{2}\delta}{\|f\|} \cdot \|Rf\| < 1,$$

vagyis

$$\|Rf\| < \frac{\|f\|}{\frac{1}{2}\delta} = C \cdot \|f\|.$$

Ha $\|Rf\| \leq C\|f\|$, akkor

$$|(Rf, g)| \leq \|Rf\| \cdot \|g\| \leq C\|f\| \cdot \|g\|.$$

Fordítva, ha $|(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$, akkor a $g = Rf$ helyettesítéssel $\|Rf\|^2 \leq C \cdot \|f\| \cdot \|Rf\|$, vagyis $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$. Meg kell még mutatni, hogy hermitikus R esetén az $|(Rf, f)| \leq C \cdot \|f\|^2$ következtében $|(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$.

Az f helyébe $\frac{f+g}{2}$ -t, majd $\frac{f-g}{2}$ -t írva kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} |\operatorname{Re}(Rf, g)| &= \left| \left(R \frac{f+g}{2}, \frac{f+g}{2} \right) - \left(R \frac{f-g}{2}, \frac{f-g}{2} \right) \right| \leq \\ &\leq C \cdot \left(\left\| \frac{f+g}{2} \right\|^2 + \left\| \frac{f-g}{2} \right\|^2 \right) = C \cdot \frac{\|f\|^2 + \|g\|^2}{2}. \end{aligned}$$

Most f és g helyébe af -et, illetőleg $\frac{1}{a}g$ -t írunk úgy, ahogy azt az 1. Tétel bizonyításában tettük ($a > 0$). A jobb oldalt minimalizálva kapjuk, hogy $|\operatorname{Re}(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$. Ezután f helyébe $e^{i\alpha}f$ -et írva (α valós) és a bal oldal maximumát véve:

$$|(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|.$$

Ez szigorúan véve csak akkor érvényes, ha Rg értelmezve van, e g -k azonban mindenütt sűrűn helyezkednek el és Rg nem jelenik meg a végeredményben, az állítás tehát a folytonosság miatt általánosan teljesül.

Még egy tételt bizonyítunk be definit operátorokra.

19. Tétel: Ha R hermitikus és definit, akkor

$$|(Rf, g)| \leq \sqrt{(Rf, f) \cdot (Rg, g)}.$$

Így $(Rf, f) = 0$ következtében $Rf = 0$.

Bizonyítás: A fenti egyenlőtlenség ugyanúgy következik abból, hogy $(Rf, f) \geq 0$ mindenütt igaz (R definit), mint ahogyan az

$$|(f, g)| \leq \sqrt{(f, f) \cdot (g, g)} = \|f\| \cdot \|g\|$$

SCHWARZ-egyenlőtlenséget $(f, f) \geq 0$ -ból bebizonyítottuk az 1. Tételben. Ha $(Rf, f) = 0$, akkor eme egyenlőtlenségből következik, hogy $(Rf, g) = 0$, természetesen, ha Rg értelmezve van. Ez azonban nemcsak a g -k mindenütt sűrű halmazán, hanem a folytonosság miatt minden g -re érvényes. Tehát $Rf = 0$.

Végül, az R és S operátor felcserélhetősége, vagyis az $RS = SR$ összefüggés igen fontos. Ebből következik, hogy

$$S \dots SSR = S \dots SRS = S \dots RSS = \dots RS \dots S,$$

tehát R és S^n is fs felcserélhető egymással. Mivel $R1 = 1R = 1$ és $S^0 = 1$, tehát ez $n = 0$ esetén is igaz. Ha S^{-1} létezik, akkor $S^{-1} \cdot SR \cdot S^{-1} = S^{-1} \cdot RS \cdot S^{-1}$ és

$$RS^{-1} = S^{-1} \cdot SR \cdot S^{-1} = S^{-1}R \cdot SS^{-1} = S^{-1}R,$$

R tehát S^{-1} -gyel is felcserélhető. Ezért $n = -1$, következésképpen $n = -2, -3, \dots$ esetben is teljesül a felcserélhetőség. Az R tehát S minden hatványával felcserélhető. Ha R az S -sel is és T -vel is felcserélhető, akkor az aS -sel és $S \pm T$ -vel valamint ST -vel is felcserélhető. Mindebből következik, hogy ha $RS = SR$, akkor R minden polinómja felcserélhető S minden polinómjával. Nevezetesen, ha $R = S$, akkor R tetszőleges polinómjai egymással felcserélhetők.

6. A sajátérték-feladat

Most már eleget tudunk ahhoz, hogy szemügyre vegyük az absztrakt Hilbert-térben a kvantummechanikának az F_Z -vel, illetőleg az F_Ω -val kapcsolatos egyik legfontosabb feladatát, nevezetesen az I. 3. fejezetben felírt E_1 , illetőleg E_3 , egyenlet megoldását. Ezt az ún. sajátérték-feladatot most új, egységes formában fogalmazzuk meg.

Az I. 3.-ban mind E_1 , mind pedig E_3 , esetében fel kell kutatni a

$$E. \quad H\varphi = \lambda\varphi$$

egyenlet valamennyi $\varphi \neq 0$ megoldást. Itt H a *Hamilton-függvénynek* megfelelő hermitikus operátor (lásd az I. 3. fejezet megfontolásait). A φ a *Hilbert-tér* eleme, λ valós szám (H adott, meghatározandó φ és λ). A keresendő megoldások sokaságával kapcsolatban még bizonyos kívánalmaink vannak:

1. A mátrixelméletben a

$$\varphi_1 = \{S_{11}, S_{21}, \dots\}, \quad \varphi_2 = \{S_{12}, S_{22}, \dots\}, \dots$$

megoldásokból (ezek F_Z elemei) egy $S = \{S_{\mu\nu}\}$ mátrix képezhető, amelyeknek létezik az S^{-1} inverze (lásd az I. 3. fejezetet).

2. A hullámelméletben minden hullámfüggvénynek (még annak is, amelyik nem megoldás) a

$$\varphi_1 = \varphi_1(q_1, \dots, q_f), \quad \varphi_2 = \varphi_2(q_1, \dots, q_f), \dots$$

megoldássorozat szerint sorbafejthetőnek kell lennie ($\varphi_1, \varphi_2, \dots$ más-más λ -hoz tartozhat):

$$\varphi(q_1, \dots, q_f) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \varphi_n(q_1, \dots, q_f).$$

(Ez a követelmény, noha az I. 3. fejezetben nem tettünk róla említést, nem hagyható el a hullámelmélet kiépítésében, különösen a *Schrödinger-féle „perturbációelméletben”*).⁶⁶

Az 1. voltaképpen ugyanazt jelenti, mint 2. Az S mátrix ugyanis az $\{1, 0, 0, \dots\}, \{0, 1, 0, \dots\}, \dots$ elemeket rendre az

$$\{S_{11}, S_{21}, S_{31}, \dots\}, \{S_{12}, S_{22}, S_{32}, \dots\}, \dots$$

elemekbe transzformálja át, tehát az \mathfrak{R}_{∞} *Hilbert*-teret átviszi a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ által kifeszített zárt lineáris sokaságba. Ez utóbbi viszont szükségképpen maga \mathfrak{R}_{∞} , különben S^{-1} nem léteznék. A 2. azonban ugyanezt állítja közvetlenül, eszerint bármely φ tetszőleges pontossággal előállítható $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ lineáris kombinációjaként.⁶⁷ Fogalmazzuk meg e feltételt világosan és szögezzük le ismét az **E.** egyenlet tulajdonságait, ezúttal a most már rendelkezésre álló formális eszközök segítségével.

Először, mivel kikötöttük, hogy $\varphi \neq 0$ és mivel $a\varphi$ is megoldás, ha φ az, elégséges csak olyan megoldásokkal foglalkoznunk, amelyekre $||\varphi|| = 1$. Másodszor, nem kell megkövetelnünk, hogy λ valós legyen, hiszen ez a $H\varphi = \lambda\varphi$ egyenletből következik:

$$(H\varphi, \varphi) = (\lambda\varphi, \varphi) = \lambda(\varphi, \varphi) = \lambda$$

(lásd a II. 5. fejezetet és a 61. jegyzetet). Harmadszor, az egymástól különböző λ_1 -hez és λ_2 -höz tartozó φ_1 és φ_2 egymásra ortogonális:

$$(H\varphi_1, \varphi_2) = \lambda_1(\varphi_1, \varphi_2), \quad (H\varphi_1, \varphi_2) = (\varphi_1, H\varphi_2) = \lambda_2(\varphi_1, \varphi_2);$$

s így $\lambda_1(\varphi_1, \varphi_2) = \lambda_2(\varphi_1, \varphi_2)$ és $\lambda_1 \neq \lambda_2$, tehát $(\varphi_1, \varphi_2) = 0$.

Legyen $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ az egymástól különböző olyan λ -k sorozata, amelyekre **E.** megoldható. (Válasszunk ki minden olyan λ -hoz, amelyre $H\varphi = \lambda\varphi$ megoldható, egy

egységnyi normájú φ_λ megoldást, e φ_λ -k az előző megjegyzések alapján ortonormált rendszert fognak alkotni. A II. 2. fejezet $3^{(\infty)}$. *Tétele* szerint e rendszer vagy véges, vagy végtelen sorozatba rendezhető. Ezért a λ -k is véges, vagy végtelen sorozatba rendezhetőek.) Mindegyik $\lambda = \lambda_\rho$ -ra a $H\varphi = \lambda\varphi$ megoldásai lineáris sokaságot alkotnak, amely egyúttal zárt is.⁶⁸ A 9. *Tétel* szerint létezik tehát a megoldásoknak olyan ortonormált $\varphi_{\rho,1}, \dots, \varphi_{\rho,v_\rho}$ rendszere, amely e sokaságot ki is feszíti. Világos, hogy a v_ρ szám a $\lambda = \lambda_\rho$ -hoz tartozó lineárisan független megoldások maximális száma. Ez a λ_ρ sajátérték „multiplicitása”. ($v = 1, 2, \dots, \infty$; $v = \infty$ is előfordulhat; erre példa a $H = 1$, $\lambda = 1$ eset.) Az előzőek szerint a két különböző ρ -hoz tartozó $\varphi_{\rho,1}, \dots, \varphi_{\rho,v_\rho}$ -k egymásra ortogonálisak. Ezért a

$$\varphi_{\rho,v} \quad (\rho = 1, 2, \dots; v = 1, \dots, v_\rho)$$

összessége is ortonormált rendszert alkot. Származtatása miatt felismerjük, hogy ez ugyanazt a zárt lineáris sokaságot feszíti ki, mint **E**. összes megoldásai.

Rendezzük át a $\varphi_{\rho,v}$ -ket tetszőleges módon egy ψ_1, ψ_2, \dots sorozatba és legyen a megfelelő λ_ρ -k sorozata $\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots$. Az előbb megfogalmazott feltétel, mely szerint **E**. összes megoldása kifeszíti \mathfrak{R}_∞ -t, mint zárt lineáris sokaságot, azt jelenti, hogy ezt a ψ_1, ψ_2, \dots rendszer (mely a megoldások részhalmaza) maga is megteszi, ezért a 7. *Tétel* α) pontja szerint ez az ortonormált rendszer teljes.

Így a kvantummechanika sajátérték-feladatának megoldása azt kívánja, hogy az **E**. egyenletnek oly sok

$$\varphi = \psi_1, \psi_2, \dots; \quad \lambda = \lambda_1, \lambda_2, \dots$$

megoldását kutassuk fel, hogy e megoldásokból teljes ortonormált rendszert alkothassunk. Ez azonban általában egyáltalán nem lehetséges. Így például a hullámelméletben is látható, hogy az **E**. (vagyis az I. 3. fejezetben az **E**₂.) megoldásainak egy részénél — bár mindegyik megoldásra szükség van, hogy minden hullámfüggvényt a megoldások szerint ki lehessen fejteni — az abszolút érték négyzetének integrálja nem véges,⁶⁹ vagyis ezek nem tartoznak a *Hilbert*-térhez. Ez utóbbi esetben (s az **E**-nél csak ezt vizsgáljuk) nincsen a megoldásnak teljes normált ortogonális rendszere.

Másrészt viszont a sajátérték-feladat *Hilbert*-féle elmélete azt mutatja, hogy az operátorok tulajdonságai közt ez a jelenség egyáltalán nem kivételes (még a folytonos operátoroknál sem).⁷⁰ Ezért meg kell vizsgálnunk, hogy mi történik, ha ilyesmi előfordul. (A III. 3. fejezetben majd látni fogjuk, hogy a fizika szempontjából mindez mit jelent.) Ha **E**. megoldásai közül nem választható ki teljes ortonormált rendszer, akkor azt mondjuk, hogy **H**-nak van folytonos spektruma. (A $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ alkotja a **H**-nak „diszkrét” vagy „pont”-spektrumát.)

Most, hogy az **E**. egyenlettel ilyen csalódás ért bennünket, az a feladatunk, hogy pontosan fogalmazzuk meg a hermitikus operátorok sajátérték-feladatát, s aztán ezt a kvantummechanikára alkalmazzuk. Először megadjuk és megmagyarázzuk a sajátérték-feladat e megfogalmazását, követvén **HILBERT** módszerét (lásd a 70. fejezetet).

7. Folytatás

Maga a

$$H\varphi = \lambda\varphi$$

egyenlet és az a követelmény, hogy megoldásából teljes ortonormált rendszer alkotható, a véges dimenziós \mathfrak{R}_n térrel fennálló analógiában gyökeredzik.

Az \mathfrak{R}_n -ben ugyanis, ahol a H mátrix:

$$\{h_{\mu\nu}\}, \mu, \nu = 1, 2, \dots, n; h_{\mu\nu} = \overline{h_{\nu\mu}},$$

jól ismert algebrai tény, hogy $H\varphi = \lambda\varphi$ -nek $\varphi = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ megoldásai, tehát amelyekre

$$\sum_{\nu=1}^n h_{\mu\nu}x_\nu = \lambda x_\mu \quad (\mu = 1, 2, \dots, n),$$

valóban teljes ortonormált rendszert alkotnak.⁷¹

Az \mathfrak{R}_n -nek azonban ez a tulajdonsága, amint láttuk, $n \rightarrow \infty$ átmenettel nem vihető át az \mathfrak{R}_∞ -re. Következésképpen a sajátérték-feladatot \mathfrak{R}_∞ -ben másként kell megfogalmazni. Belátjuk most, hogy a sajátérték-feladat \mathfrak{R}_n -ben úgy alakítható át, hogy az új megfogalmazás már átvihető \mathfrak{R}_∞ -be (ez az új alak \mathfrak{R}_n -ben ekvivalens a régivel). Más szóval a két megfogalmazás minden \mathfrak{R}_n -ben ($n = 1, 2, \dots$) ugyanazt jelenti (nevezetesen, hogy a hermitikus mátrixok diagonizálhatók), ám az egyik átvihető \mathfrak{R}_∞ -be, ellenben a másik nem.

Legyen $\{x_{11}, \dots, x_{1n}\}, \dots, \{x_{n1}, \dots, x_{nn}\}$ a sajátérték-egyenlet teljes ortonormált megoldásrendszere és legyen $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ a megfelelő λ . Az $\{x_{11}, \dots, x_{1n}\}, \dots, \{x_{n1}, \dots, x_{nn}\}$ vektorok tehát \mathfrak{R}_n -ben Descartes-féle koordináta-rendszert jelölnek ki. E koordináta-rendszer r_1, \dots, r_n koordinátáiról az eredeti ξ_1, \dots, ξ_n koordinátákra a következő transzformációs képletekkel térhetünk át:

$$\{\xi_1, \dots, \xi_n\} = r_1\{x_{11}, \dots, x_{1n}\} + \dots + r_n\{x_{n1}, \dots, x_{nn}\},$$

vagyis

$$\xi_1 = \sum_{\mu=1}^n x_{\mu 1} r_\mu, \dots, \xi_n = \sum_{\mu=1}^n x_{\mu n} r_\mu;$$

és fordítva:

$$r_1 = \sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{1\mu} \xi_\mu, \dots, r_n = \sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{n\mu} \xi_\mu.$$

A

$$\sum_{\nu=1}^n h_{\mu\nu} x_{\rho\nu} = \lambda_\rho x_{\rho\mu}$$

egyenleteket a fenti, egyébként tetszőleges ξ_1, \dots, ξ_n illetőleg a nekik megfelelő r_1, \dots, r_n változókkal, továbbá egy másik ugyancsak tetszőleges η_1, \dots, η_n vektorral így írhatjuk át (ez utóbbinak $\mathfrak{J}_1, \dots, \mathfrak{J}_n$ feleljen meg a fenti képletekben):

tehát

$$\sum_{\rho, \mu=1}^n \left(\sum_{\nu=1}^n h_{\mu\nu} x_{\rho\nu} \right) r_{\rho} \bar{\eta}_{\mu} = \sum_{\rho, \mu=1}^n \lambda_{\rho} x_{\rho\mu} r_{\rho} \bar{\eta}_{\mu},$$

(D.)

$$\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_{\nu} \bar{\eta}_{\mu} = \sum_{\rho=1}^n \lambda_{\rho} \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \xi_{\mu} \right) \overline{\left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \eta_{\mu} \right)}.$$

A koordináta-rendszerünk *Descartes*-féle, ezt így fejezhetjük ki:

(O.)

$$\sum_{\mu=1}^n \xi_{\mu} \bar{\eta}_{\mu} = \sum_{\rho=1}^n \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \xi_{\mu} \right) \overline{\left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \eta_{\mu} \right)}.$$

A **D.** és **O.** egyenletnek eleget tevő $\{x_{\mu\nu}\}$ mátrix felkutatása így egyenértékű \mathfrak{R}_n -ben a sajátérték-feladat megoldásával, és ebben az alakban nem lehet az \mathfrak{R}_{∞} -re áttérni. Ez azonban nem meglepő a következők miatt. A **D.** és **O.** feltétel az ismeretlen λ_{ρ} -t és $x_{\mu\nu}$ -t nem határozza meg teljesen. Valóban, amint azt a diagonális transzformációk elméletéből tudjuk, a λ_{ρ} -k csak a sorrendtől eltekintve vannak egyértelműen meghatározva. A helyzet az $x_{\mu\nu}$ -kre még rosszabb. Akármelyik $x_{\rho 1}, \dots, x_{\rho n}$ vektor nyilvánvalóan megszorozható tetszőleges egységnyi abszolút értékű Θ_{ρ} tényezővel, ha pedig még néhány λ_{ρ} egybe is esik, akkor a megfelelő $x_{\rho 1}, \dots, x_{\rho n}$ vektorokat még unitér transzformációnak is alávethejtük! Ha ilyen, nem egyértelműen meghatározott mennyiségekkel akarjuk az $n \rightarrow \infty$ határátmenetet elvégezni, reménytelen helyzetbe kerülünk: hogyan is konvergálhatna az eljárás, amikor λ_{ρ} és $x_{\mu\nu}$ tetszőlegesen nagy ingadozásokat és átrendeződéseket szenvedhet el a nem teljes meghatározottság folytán!

Ez azonban utat is mutat arra vonatkozóan, hogy miként kell a problémákat helyesen kezelni. Először is a **D.** és **O.** feltételeket és a λ_{ρ} és $x_{\mu\nu}$ ismeretleneket kell olyanokkal helyettesíteni, amelyek már egyértelműek, s akkor majd meglátjuk, hogy a határátmenet nem lesz már olyan nehéz.

Ha valamely l értéket egy vagy több λ_{ρ} is felvesz, akkor a

$$\sum_{\lambda_{\rho}=l} \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \xi_{\mu} \right) \overline{\left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \eta_{\mu} \right)}$$

összeg invariáns a λ_{ρ} -k és az $x_{\mu\nu}$ -k előbb említett határozatlan (és a **D.** és **O.** feltételekkel összeférő) változtatásaival szemben. (A \sum azt jelenti, hogy az összegezést olyan ρ -kra kell elvégezni, amelyekre $\lambda_{\rho}=l$). Ha l valamennyi λ_{ρ} -tól különbözik, akkor az összeg 0 és így biztosan invariáns. Így az

$$E(l; \xi, \eta) = \sum_{\lambda_{\rho} \leq l} \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \xi_{\mu} \right) \overline{\left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho\mu} \eta_{\mu} \right)}$$

hermitikus forma ugyancsak invariáns (itt ξ és η a ξ_1, \dots, ξ_n és az η_1, \dots, η_n rövid jelölésére szolgál) tetszőleges l -re. Ha ismerjük az $E(l; \xi, \eta)$ -kat (vagyis ezek együtthatóit), akkor ezekből az $x_{\mu\nu}$ és λ_{ρ} kideríthető. Ha tehát a sajátérték-feladatot

(vagyis a **D.** és **O.** egyenleteket) úgy fogalmazzuk meg, hogy abban λ_ρ és $x_{\mu\nu}$ helyett csak $E(l; \xi, \eta)$ szerepeljen, akkor megkaptuk a kívánt egyértelmű alakot.

Legyen $E(l)$ az $E(l; \xi, \eta)$ hermitikus forma mátrixa.⁷² Mit állít **D.** és **O.** eme $E(l)$ mátrixok családjáról?

Az **O.** azt jelenti, hogy ha l elég nagy (nevezetesen bármelyik λ_ρ -nál nagyobb), akkor $E(l) = 1$ (az egységmátrix). Az $E(l)$ meghatározásából következik, hogy ha l elég kicsiny (bármelyik λ_ρ -nál kisebb), akkor $E(l) = 0$ és amint l a $-\infty$ -tól a $+\infty$ -ig nő, $E(l)$ mindenütt állandó, kivéve véges számú pontot (a $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ egymástól különböző értékeit, amelyeket átjelölünk: $l_1 < l_2 < \dots < l_m, m \leq n$), ahol ugrása van, s ez az ugrás a kérdéses ponttól balra van (ez azért van, mert a

$$\sum_{\lambda_\rho \leq l}$$

mint l függvénye jobbról folytonos, míg a

$$\sum_{\lambda_\rho < l}$$

viszont balról). Végül megmutatjuk, hogy ha $l' \leq l''$, akkor

$$E(l') E(l'') = E(l'') E(l') = E(l')$$

(itt mátrixszorzatról van szó).

Ezt jobb az $E(l'; \xi, \eta)$ -ből és $E(l''; \xi, \eta)$ -ből kiindulva az r_1, \dots, r_n és $\mathfrak{Z}_1, \dots, \mathfrak{Z}_n$ koordináta-rendszerében belátni. E változók bevezetése után $E(l', \xi, \eta)$ -ra és $E(l'', \xi, \eta)$ -ra azt kapjuk, hogy

$$\sum_{\lambda_\rho \leq l'} r_\rho \overline{\mathfrak{Z}_\rho}, \quad \text{illetőleg} \quad \sum_{\lambda_\rho \leq l''} r_\rho \overline{\mathfrak{Z}_\rho}.$$

A mátrixok alakja tehát a következő: a főátlótól eltekintve mindenütt zérus, a főátló ρ -adik helyén egyes áll, ha $\lambda_\rho \leq l'$, illetőleg $\lambda_\rho \leq l''$, különben zérus. Az ilyen mátrixokra a fenti állítás már nyilvánvaló.

Fogalmazzuk meg **D.**-t újra. Eszerint

$$\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_\nu \bar{\eta}_\mu = \sum_{\tau=1}^m l_\tau \{ E(l_\tau; \xi, \eta) - E(l_{\tau-1}; \xi, \eta) \}$$

(l_0 bármely l_1 -nél kisebb szám). Ám $E(l; \xi, \eta)$ a

$$-\infty < l < l_1; l_1 \leq l < l_2; \dots; l_{m-1} \leq l < l_m; l_m \leq l < +\infty$$

intervallumok mindegyikében állandó, tehát ha a

$$\Lambda_0 < \Lambda_1 < \Lambda_2 < \dots < \Lambda_k$$

számok között az l_1, \dots, l_m számok mind előfordulnak, akkor

$$\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_\nu \bar{\eta}_\mu = \sum_{\tau=1}^k \Lambda_\tau \{ E(\Lambda_\tau; \xi, \eta) - E(\Lambda_{\tau-1}; \xi, \eta) \}.$$

A Stieltjes-integrál fogalmát felhasználva ez így is írható:⁷³

$$\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_{\zeta} \bar{\eta}_{\mu} = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda; \xi, \eta)$$

(az $\int_{-\infty}^{+\infty}$ nyilvánvalóan helyettesíthető: az \int_a^b , $a < l_1$, $b > l_m$ esetén ugyanazt adja). Ha pedig a mátrixokra írjuk fel az együtthatókra érvényes egyenleteket, akkor

$$H = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda)$$

ahol $H = \{h_{\mu\nu}\}$.

A feladat tehát most a következő: az adott $H = \{h_{\mu\nu}\}$ hermitikus mátrixhoz meg kell keresni a hermitikus $E(\lambda)$ mátrixok ama családját ($-\infty < \lambda < +\infty$), amelyre:

S₁. Elég $\begin{cases} \text{kicsiny} \\ \text{nagy} \end{cases} \lambda$ esetén $E(\lambda) = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$. Az $E(\lambda)$ (mint λ függvénye) mindenütt állandó, kivéve véges számú pontot, ahol ugrása van és az ugrás helyén jobbról folytonos.

S₂. Minden λ -ra igaz, hogy

$$E(\lambda')E(\lambda'') = E(\text{Min}(\lambda', \lambda'')).^{74}$$

S₃. A Stieltjes-integrált használva

$$H = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda).$$

Nem időzünk most azzal, hogy $S_1 - S_3$ alapján visszafelé következtessünk **D**. és **O**. megoldásaira (ezt egyébként könnyű lenne megtenni), mert a sajátérték-feladatnak csupán erre az alakjára van a kvantummechanikában szükség. Ehelyett hozzálátunk ahhoz, hogy $S_1 - S_3$ -at végtelen változóra általánosítsuk, vagyis áttérünk \mathfrak{R}_n -ről \mathfrak{R}_{∞} -re.

Világos, hogy \mathfrak{R}_{∞} -ben H és $E(\lambda)$ hermitikus operátorok lesznek. Meg kell határozni adott H -ra az $E(\lambda)$ -k olyan családját, amely az $S_2 - S_3$ feltételek mintájára felírt kikötéseknek eleget tesz. Elég tehát az $S_1 - S_3$ megfelelőjét az \mathfrak{R}_{∞} esetében megkeresni.

Az S_2 tulajdonság változatlan marad, hiszen \mathfrak{R}_n dimenziószáma nem szerepel benne. A projektorokra vonatkozó eredményeink (II. 4. fejezet) felhasználásával azonban átalakítjuk. Először is $E(\lambda)^2 = E(\lambda)$ adódik a $\lambda' = \lambda' = \lambda$ esetben. Az $E(\lambda)$ tehát projektor. Az S_2 azonban ekkor azt jelenti (a $\lambda' \leq \lambda''$ esetre korlátozódunk, a $\lambda' \geq \lambda''$ eset ebből adódik), hogy ha $\lambda' \leq \lambda''$, akkor $E(\lambda') \leq E(\lambda'')$ (lásd a II. 4. fejezetben a 14. Tételt és az azt követő megfontolásokat). Az S_3 esetében kicsit vigyázni kell: az

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda)$$

kifejezésnek nincs értelme, hiszen a *Stieltjes*-integrál csak számokra van értelmezve, operátorokra nem. Könnyű azonban olyan, számokra felírt relációt megadni, amelyből az operátorokra vonatkozó összefüggés már következik. Megköveteljük, hogy a

$$(Hf, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g)$$

egyenlőség \mathfrak{R}_∞ minden f és g elemére teljesüljön, már amennyiben Hf -nek értelme van, ekkor a

$$H = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda)$$

összefüggés ennek az egyenlőségnek a szimbolikus rövidítése.

Az S_1 tulajdonságot az áttérés a végtelen dimenzióra igen érzékenyen érinti. Azok a pontok, amelyeknél $E(\lambda)$ a kezdeti 0, illetőleg a végső 1 értéket felveszi és amelyekben ugrik (az \mathfrak{R}_n esetén) a H sajátértékei. Az $E(\lambda)$ azokban a tartományokban, ahol nincs sajátérték, ott állandó. Ha $n \rightarrow \infty$, akkor sok minden megtörténhet. A legkisebb és a legnagyobb ugráshely $-\infty$ -hez, illetőleg $+\infty$ -hez tarthat, a többi bizonyos szakaszokon összesűrűsödhet, hiszen számuk minden határon túl nőhet, így azok az intervallumok, amelyekben $E(\lambda)$ állandó, pontokká zsugorodhatnak össze. (Ez az a tünet, amely a *Hilbert*-féle elméletben bizonyos körülmények között az úgynevezett folytonos spektrum megjelenésére utal.⁷⁵ Ezért amikor \mathfrak{R}_n -ről \mathfrak{R}_∞ -re térünk át, S_1 -et alaposan meg kell változtatnunk, hiszen teret kell adnunk olyan eseteknek is, amikor $E(\lambda)$ esetleg már nemcsak diszkrét ugrásokkal változik.

Mindezt figyelembe véve kézenfekvő, hogy $E(\lambda)$ kezdeti (0) és végső (1) értékére vonatkozó feltevésünket azzal a követelménnyel helyettesítsük, hogy $E(\lambda)$ a 0-hoz és +1-hez tartson, ha λ a $-\infty$ -hez, illetőleg a $+\infty$ -hez tart. Így lehetőség nyílik arra, hogy $E(\lambda)$ ne csak ugorjék és az intervallumokon belül állandó maradjon, hanem hogy folytonosan növekedjék. Azt a követelményt azonban megpróbálhatjuk fenntartani, hogy $E(\lambda)$ az ugráspontokban legyen jobbról folytonos. Az S_1 -et tehát így fogalmazzuk meg: $E(\lambda) \rightarrow 0$, ha $\lambda \rightarrow -\infty$; $E(\lambda) \rightarrow +1$, ha $\lambda \rightarrow +\infty$ és $E(\lambda) \rightarrow E(\lambda_0)$, ha $\lambda \rightarrow \lambda_0$, $\lambda \geq \lambda_0$.⁷⁶

Az S_3 -ra vonatkozóan még el kell valamit mondanunk. Végtes dimenziójú térben

$$H = \sum_{\tau=1}^m l_\tau F_\tau,$$

ha az $E(l_\tau) - E(l_{\tau-1})$ mátrixot F_τ -val jelöljük. Az S_1 miatt $\sigma \geq \tau$ esetén

$$F_\tau E(l_\sigma) = E(l_\tau) E(l_\sigma) - E(l_{\tau-1}) E(l_\sigma) = E(l_\tau) - E(l_{\tau-1}) = F_\tau,$$

ha pedig $\sigma \leq \tau - 1$, akkor

$$F_\tau E(l_\sigma) = E(l_\tau) E(l_\sigma) - E(l_{\tau-1}) E(l_\sigma) = E(l_\sigma) - E(l_\sigma) = 0.$$

Így, tekintve, hogy $F_\sigma = E(l_\sigma) - E(l_{\sigma-1})$,

$$F_\tau F_\sigma = \begin{cases} F_\tau, & \text{ha } \tau = \sigma, \\ 0, & \text{ha } \tau \neq \sigma. \end{cases}$$

Ebből következik, hogy

$$H^2 = \left(\sum_{\tau=1}^m l_\tau F_\tau \right)^2 = \sum_{\sigma, \tau=1}^m l_\tau l_\sigma F_\tau F_\sigma = \sum_{\tau=1}^m l_\tau^2 F_\tau.$$

Ugyanígy $H^p = \sum_{\tau=1}^m l_\tau^p F_\tau$. Ennek megfelelően

$$H^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 dE(\lambda),$$

amely hasonlít a H -ra érvényes egyenlethez. Az \mathfrak{R}_∞ -ben a hasonló módon megalkotott szimbolikus egyenlet érvényességét feltesszük. Így

$$(H^2 f, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(E(\lambda)f, g).$$

(Ezt további megfontolásaink során még megerősítjük.) Ha $f = g$,

$$(H^2 f, f) = (Hf, Hf) = \|Hf\|^2, \quad (E(\lambda)f, f) = \|E(\lambda)f\|^2,$$

tehát

$$\|Hf\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda)f\|^2).$$

E képlet arra enged következtetni, hogy $E(\lambda)$ nemcsak Hf -et határozza meg, ha ez értelmezve van, hanem azt is, hogy Hf adott f -re egyáltalán értelmezve van-e. Az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda)f\|^2)$$

integrandusa nemnegatív ($\lambda^2 \geq 0$) és a differenciál jele alatt monoton növekvő kifejezés áll ($\|E(\lambda)f\|^2$, lásd S_2 -t és a 15. Tételt a II. 4. fejezetben). Ez az integrál így vagy konvergens, tehát értéke zérus, vagy véges pozitív szám, vagy pedig egyszerűen divergens, tehát $+\infty$.⁷⁷ Ez a H -t tartalmazó egyenlettől, tehát attól függetlenül igaz, hogy Hf értelmezve van-e, vagy sem. Ezért elvárjuk, hogy Hf akkor és csak akkor van értelmezve (vagyis \mathfrak{R}_∞ eleme), ha $\|Hf\|^2$ véges, tehát az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda)f\|^2)$$

kifejezés minden f -re véges.

Ilyen módon S_1 — S_3 . átfogalmazása így szól: adott H hermitikus operátorhoz keressük a következő tulajdonságú $E(\lambda)$ projektorok családját ($-\infty < \lambda < +\infty$):

S_1 . Ha $\lambda \rightarrow -\infty$ vagy $\lambda \rightarrow +\infty$, akkor $E(\lambda)f \rightarrow 0$, illetőleg $E(\lambda)f \rightarrow 1$; $E(\lambda)f \rightarrow E(\lambda_0)f$, ha $\lambda \rightarrow \lambda_0$, $\lambda \geq \lambda_0$ (minden f -re).

\bar{S}_2 . $\lambda' \leq \lambda''$ következtében $E(\lambda') \leq E(\lambda'')$.

\bar{S}_3 . Az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda)f\|^2),$$

amely definíció szerint vagy konvergens (zérus vagy véges pozitív szám), vagy pedig egyszerűen divergens ($+\infty$), meghatározza H értelmezési tartományát; Hf akkor és csak akkor van értelmezve, ha az első eset áll fenn. Ekkor

$$(Hf, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g).$$

(Ez az integrál abszolút konvergens, ha az előző véges.)⁷⁸

A H operátor az \bar{S}_1 és \bar{S}_2 feltételekben nem szerepel. Az ezzel a két tulajdonsággal rendelkező projektorcsalád neve az egységoperátor felbontása, vagy röviden egységfelbontás. Az \bar{S}_3 összefüggést kielégítő egységfelbontásra azt mondjuk, hogy H -hoz tartozik.

Az \mathfrak{R}_∞ -ben a sajátérték-feladat tehát így szól. Létezik-e az adott H operátorhoz tartozó egységfelbontás és ha igen, akkor mennyi? (Az óhajtott válasz az, hogy mindig csak egy.) Tisztáznunk kell még azt is, hogy a sajátérték-feladat általunk adott meghatározása hogyan kapcsolódik a hermitikus operátorok sajátértékeinek meghatározására a kvantummechanikában (különösen pedig a hullámmechanikában) általánosan alkalmazott módszerekhez.

8. Tájékozódás a sajátérték-feladatról

Az első kérdés, amely a sajátérték-feladat most adott definíciójával kapcsolatban felmerül, a következőképpen fogalmazható meg. Az \bar{S}_1 – \bar{S}_3 úgy tűnik, merőben eltér attól a problémától, amellyel az előző szakaszt elkezdtük, és az összefüggés már felismerhetetlen. Az \mathfrak{R}_n -re valóban levezettük S_1 – S_3 -at, de \mathfrak{R}_∞ -re ezeket alaposan átalakítottuk. A két megfogalmazás most már nem egyenértékű (noha, mint mondtunk, \mathfrak{R}_n -re azok voltak). Ezért felmerül a kérdés, hogy ez az új megfogalmazás mennyire esik egybe a régivel, vagyis mikor, milyen módon határozza $E(\lambda)$ meg a $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ és a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sorozatot.

Ha $E(\lambda)$ az A hermitikus operátorhoz tartozó egységfelbontás, akkor az

$$A\varphi = \lambda_0\varphi$$

egyenlet mikor oldható meg? Az $A\varphi = \lambda_0\varphi$ azt jelenti, hogy $(A\varphi, g) = \lambda_0(\varphi, g)$ minden g -re, tehát,

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) - \lambda_0(\varphi, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) - \lambda_0 \int_{-\infty}^{+\infty} d(E(\lambda)f, g) = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda)f, g). \end{aligned}$$

Legyen először $g = E(\lambda_0)f$, ekkor

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda)f, E(\lambda_0)f) = \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda_0)E(\lambda)f, f) = \\ &= \int_{+\infty}^{+\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\text{Min}(\lambda, \lambda_0)f, f)) = \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\text{Min}(\lambda, \lambda_0)f\|^2)). \end{aligned}$$

Ezt az integrált két tag összegére bontjuk:

$\int_{-\infty}^{+\infty} = \int_{-\infty}^{\lambda_0} + \int_{\lambda_0}^{+\infty}$. Az $\int_{-\infty}^{\lambda_0}$ -ban a $\text{Min}(\lambda, \lambda_0)$ λ -val, az $\int_{\lambda_0}^{+\infty}$ -ban pedig λ_0 -val helyettesíthető. Az utóbbi integrálban tehát a differenciáljel mögött állandó áll, tehát ez az integrál eltűnik. Az első integrálra tehát kapjuk, hogy

$$\int_{-\infty}^{\lambda_0} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2) = 0.$$

Legyen ezután $g = f$, ekkor

$$0 = \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda)f, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2).$$

Az előző egyenletet ebből levonva ha még az integrandus előjelét is megfordítjuk, kapjuk, hogy

$$\int_{\lambda_0}^{+\infty} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2) = 0.$$

Vizsgáljuk most meg az

$$\int_{-\infty}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2), \quad \int_{\lambda_0}^{+\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2)$$

integrálokat közelebbről. Mindkét esetben az integrandus ≥ 0 és a differenciáljel mögött λ monoton nemcsökkenő függvénye áll. Ezért tetszőleges $\varepsilon > 0$ -ra

$$\int_{-\infty}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2) \geq \int_{-\infty}^{\lambda_0 - \varepsilon} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2) \geq$$

$$\geq \int_{-\infty}^{\lambda_0 - \varepsilon} \varepsilon d(\|E(\lambda)f\|^2) = \varepsilon \|E(\lambda_0 - \varepsilon)f\|^2,$$

$$\int_{\lambda_0}^{+\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2) \geq \int_{\lambda_0 + \varepsilon}^{+\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2) \geq$$

$$\geq \int_{\lambda_0 + \varepsilon}^{+\infty} \varepsilon d(\|E(\lambda)f\|^2) = \varepsilon (\|f\|^2 - \|E(\lambda_0 + \varepsilon)f\|^2) = \varepsilon \|f - E(\lambda_0 + \varepsilon)f\|^2.$$

Eszerint a jobb oldalak egyszerre kisebbek is, meg nagyobbak is zérusnál, tehát eltűnnek. Ezért

$$E(\lambda_0 - \varepsilon)f = 0, \quad E(\lambda_0 + \varepsilon)f = f.$$

Az $E(\lambda)$ jobb oldali folytonossága miatt az $\varepsilon \rightarrow 0$ határátmenetet a második egyenletben végrehajthatjuk, s így $E(\lambda_0)f = f$. Ha $\lambda \geq \lambda_0$, akkor a második egyenlet miatt ($\varepsilon = \lambda - \lambda_0 \geq 0$) $E(\lambda)f = f$, míg $\lambda < \lambda_0$ esetén az első egyenletből ($\varepsilon = \lambda_0 - \lambda > 0$): $E(\lambda)f = 0$. Így

$$E(\lambda)f = \begin{cases} f, & \text{ha } \lambda \geq \lambda_0, \\ 0, & \text{ha } \lambda < \lambda_0. \end{cases}$$

E feltétel elégséges is, mert belőle következik, hogy

$$(Af, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) = \lambda_0(f, g)$$

(emlékezzünk a *Stieltjes*-integrálnak a 73. jegyzetben megadott definíciójára), tehát $(Af - \lambda_0 f, g) = 0$ tetszőleges g -re, így $Af = \lambda_0 f$.

Mit jelent ez a feltétel? Először is azt, hogy $E(\lambda)$ a $\lambda = \lambda_0$ pontban nem folytonos. A II. 4. fejezet 17. Tétéle szerint $E(\lambda)$ az $E^{(1)}(\lambda_0)$, illetve az $E^{(2)}(\lambda_0)$ projektorhoz konvergál, ha $\lambda \rightarrow \lambda_0$ és $\lambda < \lambda_0$, illetve $\lambda > \lambda_0$.⁷⁹ Az S_1 értelmében $E^{(2)}(\lambda_0) = E(\lambda_0)$, az ugrás miatt azonban $E^{(1)}(\lambda_0) \neq E(\lambda_0)$. Továbbá amiatt, hogy $E(\lambda) \leq E(\lambda_0)$, ha $\lambda < \lambda_0$ (S_2), mindig $E^{(1)}(\lambda_0) \leq E(\lambda_0)$. Az $E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0)$ tehát projektor és ha ugrás van, akkor nem zérus.

Az $E(\lambda)f = 0$, minden $\lambda < \lambda_0$ -ra, következésképpen $E^{(1)}(\lambda_0)f = 0$, de az utóbbi egyenlőségből az előbbi is következik (hiszen $E(\lambda) \leq E^{(1)}(\lambda)$). Az $E(\lambda)f = f$, minden $\lambda > \lambda_0$ -ra, következik az $E(\lambda_0)f = f$ egyenletből, mert $E(\lambda_0) \leq E(\lambda)$, $E(\lambda)E(\lambda_0) = E(\lambda_0)$, tehát $E(\lambda)f = E(\lambda)E(\lambda_0)f = E(\lambda_0)f = f$. Ebből $Af = \lambda_0 f$ esetére $E^{(1)}(\lambda_0)f = 0$ és $E(\lambda_0)f = f$ jellemző, más szóval (II. 4. fejezet 14. Tétéle) $[E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0)]f = f$. Ha tehát $E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0) = P_{\mathfrak{R}_{\lambda_0}}$, akkor a fentiek szerint f az \mathfrak{R}_{λ_0} -nak eleme.

Megmutattuk tehát, hogy az $Af = \lambda f$ egyenletnek $f \neq 0$ megoldása csak $E(\lambda)$ ugrásainál létezik és az f megoldások a fent megadott zárt lineáris \mathfrak{R}_{λ_0} sokaságot alkotják.

A II. 6. fejezetben keresett teljes ortonormált rendszer, amelyet e megoldásokból (kombinálva különböző λ -kkal) kell kiválogatnunk, ily módon akkor és csak akkor létezik, ha az \mathfrak{R}_{λ_0} -k egyesítése ($-\infty < \lambda_0 < +\infty$) az \mathfrak{R}_{∞} zárt lineáris sokaságot feszíti ki. [A II. 6. fejezetben megtárgyaltuk már, hogy miként kell e rendszert megalkotni. Az \mathfrak{R}_{λ_0} -k ortogonalitása így látható be: $\lambda_0 < \mu_0$ -ból következik, hogy

$$P_{\mathfrak{R}_{\lambda_0}} P_{\mathfrak{R}_{\mu_0}} = [E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0)][E(\mu_0) - E^{(1)}(\mu_0)] = 0,$$

tekintve, hogy

$$E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0) \leq E(\lambda_0) \leq E^{(1)}(\mu_0),$$

$$E(\mu_0) - E^{(1)}(\mu_0) \leq 1 - E^{(1)}(\mu_0).]$$

Anélkül, hogy megadnánk annak szabatos feltételét, hogy e rendszer mikor létezik, megjegyezzük a következőt: ha létezik olyan $\{\mu_1, \mu_2\}$ intervallum, amelyben $E(\lambda)$ folytonosan nő [vagyis $\mu_1 < \mu_2$, $E(\lambda)$ folytonos a $\mu_1 \leq \lambda \leq \mu_2$ intervallumban, $E(\mu_1) \neq E(\mu_2)$], akkor biztosan nem ez a helyzet. Ha ugyanis $\lambda \leq \mu_1$, akkor $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda) \leq E(\lambda) \leq E(\mu_1)$, míg ha $\mu_1 < \lambda \leq \mu_2$, akkor a folytonosság miatt $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda) = 0$, és ha $\mu_2 < \lambda$, akkor $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda) \leq 1 - E^{(1)}(\lambda) \leq 1 - E(\mu_2)$; ezért $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda)$ mindig ortogonális $E(\mu_2) - E(\mu_1)$ -re. Legyen $E(\mu_2) - E(\mu_1) = P_{\mathfrak{R}}$. Ekkor valamennyi \mathfrak{R}_λ ortogonális \mathfrak{R} -re. Ha ezekből teljes ortonormált rendszer lenne kiválasztható, akkor \mathfrak{R} csupán a zérus tartalmazná, tehát feltételünkkel ellentétben $E(\mu_2) - E(\mu_1)$ eltűnnék.

Az $E(\lambda)$ ugráshelyeit A diszkrét spektrumának, vagy pontspektrumának nevezzük. Ezek azok a λ -k, amelyekre $Af = \lambda f$, $f \neq 0$ -val megoldható. Ha minden \mathfrak{R}_λ -ból egy olyan f -et választunk, amelyre $\|f\| = 1$, akkor az \mathfrak{R}_λ -k ortogonalitása miatt ortonormált rendszert kapunk. A II. 2. fejezetben kimondott 3. Tétel miatt e rendszer vagy véges, vagy sorozatot alkot. Így a diszkrét spektrum λ -i legfeljebb sorozatot alkotnak.

Ama pontok, amelyeknek környezetében $E(\lambda)$ nem állandó, alkotják A spektrumát. Láttuk, hogy ha létezik olyan intervallum, amelybe a pontspektrum nem, de a spektrum behatol, vagyis amelyben $E(\lambda)$ folytonos és nem állandó, akkor a sajátérték-feladat biztosan nem oldható meg abban az értelemben, ahogyan azt II. 6. fejezet elején megfogalmaztuk. E megoldhatatlanság szabatos felteteleit nem vizsgáljuk tovább, mert ilyesmi bizonyos körülmények közt akkor is előfordulhat, ha a diszkrét spektrum minden olyan intervallumba betör, amely a spektrumból tartalmaz pontokat. Ilyenkor a diszkrét spektrum leválasztása a spektrumról sokkal fáradságosabb feladat, s ez a könyv szorosabb keretein kívül esik. (Az idevágó kutatásokat az olvasó HILBERTnek már korábban idézett cikkeiben találhatja meg.)

Meg kívánjuk azonban mutatni, hogy abban az esetben, ha az $A\varphi = \lambda\varphi$ egyenlet megoldásainak létezik teljes ortonormált $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszere ($\varphi = \varphi_1, \varphi_2, \dots$ -nek feleljen meg $\lambda = \lambda_1, \lambda_2, \dots$) — vagyis, ahogy mondani szokás a tiszta diszkrét spektrum esetében — hogyan kell az $E(\lambda)$ -kat megalkotni. Ekkor

$$E(\lambda) = \sum_{\lambda_p \leq \lambda} P_{[\varphi_p]}. \quad 80$$

(Eme összeg tagjai lehetnek 0-ok, ekkor $E(\lambda) = 0$; állhat véges számú pozitív tagból, ekkor jelentése világos; ha pedig végtelen sok tagból áll, akkor a II. 4. fejezet végén található megfontolás miatt konvergens.)

Valóban: az S_2 magától értődik, hiszen ha $\lambda' \leq \lambda''$, akkor

$$E(\lambda'') - E(\lambda') = \sum_{\lambda' < \lambda_p \leq \lambda''} P_{[\varphi_p]},$$

s ez projektor, tehát $E(\lambda') \leq E(\lambda'')$ (14. Tétel). Az \bar{S}_1 -t így bizonyítjuk be: bármely f -re

$$\sum_p \|P_{[\varphi_p]} f\|^2 = \sum_p |(f, \varphi_p)|^2 = \|f\|^2, \quad \text{Lábj.} = \|f\|^2,$$

(7. Tétel), vagyis $\sum_{\rho} \|P_{[\varphi_{\rho}]}f\|^2$ konvergens. Így bármely $\varepsilon > 0$ -hoz megadható véges számú ρ oly módon, hogy az ε -ra vett összeg nagyobb, mint $\|f\|^2 - \varepsilon$, s így a hiányzó ρ -kra vett \sum' összeg kisebb, mint ε . De ekkor

$$\|\sum'_{\rho} P_{[\varphi_{\rho}]}f\|^2 = \sum'_{\rho} \|P_{[\varphi_{\rho}]}f\|^2 < \varepsilon.$$

Ebből azonban következik, hogy

$$\|\sum_{\lambda_{\rho} \leq \lambda} P_{[\varphi_{\rho}]}f\|^2 < \varepsilon, \quad \|\sum_{\lambda_{\rho} > \lambda} P_{[\varphi_{\rho}]}f\|^2 < \varepsilon, \quad \|\sum_{\lambda_0 < \lambda_{\rho} \leq \lambda} P_{[\varphi_{\rho}]}f\|^2 < \varepsilon,$$

ha λ -t elég kicsinynek, elég nagyra, illetőleg λ_0 -nál nagyobbra, de hozzá elég közelinek választjuk. Így

$$E(\lambda)f = \sum_{\lambda_{\rho} \leq \lambda} P_{[\varphi_{\rho}]}f \rightarrow 0, \quad \text{ha } \lambda \rightarrow -\infty,$$

$$f - E(\lambda)f = \sum_{\lambda_{\rho} > \lambda} P_{[\varphi_{\rho}]}f \rightarrow 0, \quad \text{ha } \lambda \rightarrow +\infty,$$

$$E(\lambda)f - E(\lambda_0)f = \sum_{\lambda_0 < \lambda_{\rho} \leq \lambda} P_{[\varphi_{\rho}]}f \rightarrow 0, \quad \text{ha } \lambda \rightarrow \lambda_0, \lambda \geq \lambda_0,$$

tehát \mathfrak{S}_1 . teljesül.

Most meggyőződünk arról, hogy \mathfrak{S}_3 . is érvényes. Legyen $f = x_1\varphi_1 + x_2\varphi_2 + \dots$. Ekkor $Af = \lambda_1x_1\varphi_1 + \lambda_2x_2\varphi_2 + \dots$. Az Af -nek csak akkor van értelme, ha

$$\sum_{\rho=1}^{\infty} \lambda_{\rho}^2 |x_{\rho}|^2$$

véges. Azonban

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\left(\sum_{\lambda_{\rho} \leq \lambda} |x_{\rho}|^2\right) = \sum_{\rho=1}^{\infty} \lambda_{\rho}^2 |x_{\rho}|^2,$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d\left(\sum_{\lambda_{\rho} \leq \lambda} x_{\rho} \bar{y}_{\rho}\right) = \sum_{\rho=1}^{\infty} \lambda_{\rho} x_{\rho} \bar{y}_{\rho} = (Af, g),$$

következésképpen \mathfrak{S}_3 . is teljesül.

Lássunk most két olyan esetet, amikor a spektrum tisztán folytonos, tehát amikor diszkrét spektrum nem létezik. Legyen \mathfrak{R}_{∞} ama $f(q_1, \dots, q_l)$ függvények tere, amelyekre

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} |f(q_1, \dots, q_l)|^2 dq_1 \dots dq_l$$

véges és legyen A a $q_j \dots$ nyilvánvalóan hermitikus operátor.

Látható: $Af = \lambda f$ ekkor azt jelenti, hogy

$$(q_j - \lambda)f(q_1, \dots, q_l) = 0,$$

vagyis $f(q_1, \dots, q_l) = 0$ mindenütt, kivéve a $q_j = \lambda(l-1)$ -dimenziós síkot. E sík *Lebesgue*-mértéke (vagyis a térfogata) azonban (a II. 3. fejezetnek a **B.** feltételre vonatkozó megmondolása alapján) zérus. Ily módon $f \equiv 0$ ⁸⁴. Tehát az $Af = \lambda f$ -nek nincs $f \neq 0$ megoldása.

Viszont azt látjuk (nem egzaktul!), hogy hol sejtjük a megoldást. A $(q_j - \lambda)f(q_1, \dots, q_l) = 0$ azt jelenti, hogy $f \neq 0$ csak $q_j = \lambda$ esetén lehet. Több λ -hoz, mondjuk a $\lambda = \lambda', \lambda'', \dots, \lambda^{(s)}$ értékekhez tartozó megoldások lineáris kombinációja olyan f volna, amely csak akkor $\neq 0$, ha

$$q_j = \lambda', \lambda'', \dots, \lambda^{(s)}.$$

Az olyan f tehát, amely csak akkor $\neq 0$, ha $\lambda \leq \lambda_0$, a $\lambda \leq \lambda_0$ esetekhez tartozó megoldások lineáris kombinációjaként fogható fel. Tisztán diszkrét spektrum esetén azonban

$$E(\lambda_0) = \sum_{\lambda_\rho \leq \lambda_0} P_{[\varphi_\rho]} = P_{\mathfrak{R}_{\lambda_0}}, \quad \mathfrak{R}_{\lambda_0} = [\varphi_{\rho(\lambda_\rho \leq \lambda_0)}],$$

tehát \mathfrak{R}_{λ_0} az olyan φ_ρ -k lineáris kombinációjából állna, amelyekre $\lambda_\rho \leq \lambda_0$, vagyis ezek a φ_ρ -k az $Af = \lambda f$ megoldásai lennének a $\lambda \leq \lambda_0$ esetre. Következésképpen — heurisztikusan és nem egzakt módon — mondhatjuk, hogy esetünkben is

$$E(\lambda_0) = P_{\mathfrak{R}_{\lambda_0}},$$

ahol \mathfrak{R}_{λ_0} olyan f -ekből áll, amelyek csak $q_j \leq \lambda_0$ esetén nem tűnnek el. Az $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{R}_{\lambda_0}$ viszont eszerint az olyan f -eket tartalmazza, amelyek eltűnnek, ha $q_j > \lambda_0$, tehát

$$E(\lambda_0)f(q_1, \dots, q_l) = \begin{cases} f(q_1, \dots, q_l), & \text{ha } q_j \leq \lambda_0, \\ 0, & \text{ha } q_j > \lambda_0. \end{cases}$$

Így tehát pontatlan módon ugyan, de felkutattuk az $E(\lambda)$ projektorokat, s várható, hogy ezekre az $\mathfrak{S}_1, \mathfrak{S}_2, \mathfrak{S}_3$ feltétel teljesül. Valóban, $\mathfrak{S}_1, \mathfrak{S}_2$ triviálisan kielégül, s mi több, \mathfrak{S}_2 -ben a $\lambda \rightarrow \lambda_0$ eset valósul meg a $\lambda \geq \lambda_0$ feltétel nélkül, tehát $E(\lambda)$ a λ -ban mindenütt folytonos. Az \mathfrak{S}_3 érvényességéhez elég belátni a következő egyenlőséget:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 = \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{\lambda} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |f(q_1, \dots, q_j, \dots, q_l)|^2 \times dq_1 \dots dq_j \dots dq_l \right) = \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} |f(q_1, \dots, q_{j-1}, \lambda, q_{j+1}, \dots, q_l)|^2 \times \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times dq_1 \dots dq_{j-1} dq_{j+1} \dots dq_l \Big) d\lambda = \\
& = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} q_j^2 |f(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j, q_{j+1}, \dots, q_l)|^2 \times \\
& \times dq_1 \dots dq_{j-1} dq_j dq_{j+1} \dots dq_l = \|Af\|^2, \\
\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{\lambda} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} f(q_1, \dots, q_j, \dots, q_l) \times \right. \\
& \times \overline{g(q_1, \dots, q_j, \dots, q_l)} dq_1 \dots dq_j \dots dq_l = \\
& = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} f(q_1, \dots, q_{j-1}, \lambda, q_{j+1}, \dots, q_l) \times \right. \\
& \times \overline{g(q_1, \dots, q_{j-1}, \lambda, q_{j+1}, \dots, q_l)} dq_1 \dots dq_{j-1} dq_{j+1} \dots dq_l \Big) d\lambda = \\
& = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} q_j f(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j, q_{j+1}, \dots, q_l) \times \\
& \times \overline{g(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j, q_{j+1}, \dots, q_l)} \times \\
& \times dq_1 \dots dq_{j-1} dq_j dq_{j+1} \dots dq_l = (Af, g).
\end{aligned}$$

Íme rádöbbenünk, hogy a sajátérték-feladat régebbi megfogalmazásának diszkrét spektruma nem található itt meg, hiszen $E(\lambda)$ mindenütt folytonosan növekszik.

E példa rávilágít arra, hogy általában miként lehet a folytonos spektrumban $E(\lambda)$ -t megtalálni: meghatározzuk (bár szabálytalanul) $Af = \lambda f$ megoldásait (mivel λ a folytonos spektrumban helyezkedik el, ezek az f -ek nem tartoznak \mathfrak{R}_∞ -hez!) és képezzük ezek lineáris kombinációit valamennyi $\lambda < \lambda_0$ esetre. Ezek részben ismét \mathfrak{R}_∞ -hez tartoznak és esetleg zárt lineáris sokaságot alkotnak. Legyen e sokaság \mathfrak{R}_{λ_0} , ekkor $E(\lambda_0) = P_{\mathfrak{R}_{\lambda_0}}$, s ha helyesen jártunk el, akkor \mathfrak{S}_1 — \mathfrak{S}_3 igazolható és heurisztikus eljárásunk így utólag szigorúnak tekinthető.⁸⁵

A második példa, amelyet megvizsgálunk, a hullámmechanika másik fontos operátora: $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_j}$. A felesleges bonyodalmak elkerülése végett legyen $l=j=1$ (az eljárás ugyanaz több dimenzió esetében is). Tekintsük tehát az

$$A'f(g) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} f(q)$$

operátort. Ha a q tartománya $-\infty < q < +\infty$, akkor ez hermitikus operátor, amint azt a II. 5. fejezetben beláttuk. Véges $a \leq q \leq b$ tartomány esetén nem ez a helyzet:

$$\begin{aligned} (A'f, g) - (f, A'g) &= \int_a^b \frac{h}{2\pi i} f'(q) \overline{g(q)} dq - \int_a^b \overline{f(q)} \frac{h}{2\pi i} g'(q) dq = \\ &= \frac{h}{2\pi i} \int_a^b \{f'(q) \overline{g(q)} + f(q) \overline{g'(q)}\} dq = \\ &= \frac{h}{2\pi i} [f(q) \overline{g(q)}]_a^b = \frac{h}{2\pi i} [f(b) \overline{g(b)} - f(a) \overline{g(a)}]. \end{aligned}$$

Ahhoz, hogy ez eltűnjék, a $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ értelmezési tartományát úgy kell megszorítani, hogy abból tetszőlegesen kiválasztva f -et és g -t, az $f(a) \overline{g(a)} = f(b) \overline{g(b)}$ teljesüljön. Tehát

$$f(a) : f(b) = \overline{g(b)} : \overline{g(a)}.$$

Az f -et változtatva rögzített g mellett látható, hogy ebben az értelmezési tartományban minden f -re az $f(a) : f(b)$ aránynak rögzített Θ számmal kell egyenlőnek lennie (Θ éppenséggel lehetne 0 vagy ∞); f és g felcserélésével azt kapjuk, hogy $\Theta = \frac{1}{\Theta}$ tehát $|\Theta| = 1$. Más szóval ahhoz, hogy ebben az esetben $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ hermitikus legyen, meg kell követelni az

$$f(a) : f(b) = \Theta, \quad |\Theta| = 1$$

határfeltételt is (Θ tetszőleges, rögzített, egységnyi abszolút értékű szám).

Tekintsük először a $-\infty < q < +\infty$ intervallum esetét. Az $A\varphi = \lambda\varphi$, vagyis a $\frac{h}{2\pi i} \varphi'(q) = \lambda\varphi(q)$ egyenlet megoldásai a

$$\varphi(q) = ce^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q}$$

függvények. Ezek azonban nem felelnek meg a céljainknak, mert

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq = \int_{-\infty}^{+\infty} |c|^2 |dq| = +\infty$$

(hacsak nem a $c=0$, $\varphi \equiv 0$ áll fent). Figyeljük meg: az előző példában a megoldás $\delta(q-\lambda)$ volt, amely fikatív, valójában nem létező függvény (lásd a 84. jegyzetet). Most a megoldás

$$e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q},$$

amely teljesen jól viselkedő függvény, azonban nem tartozik \mathfrak{R}_∞ -hez, mert abszolút értéke négyzetének integrálja nem korlátos. A mi szempontunkból azonban e két eset ugyanazt jelenti, mivel ami nem tartozik \mathfrak{R}_∞ -hez, az számunkra nem létezik.⁸⁶

Az első eset mintájára képezzük a $\lambda \leq \lambda_0$ -hoz tartozó megoldások lineáris kombinációit:

$$f(q) = \int_{-\infty}^{\lambda_0} c(\lambda) e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q} d\lambda.$$

Azt reméljük, hogy lesznek ezek között \mathfrak{R}_∞ -hez tartozó függvények is, sőt amelyek egy $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$ zárt lineáris sokaságot alkotnak és végül, hogy az

$$E(\lambda_0) = P_{\mathfrak{R}'_{\lambda_0}}$$

projektorok alkotják majd az A' -höz tartozó egységfelbontást. Első sejtésünkre mindjárt példát is szolgáltatunk: ha az

$$f(q) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_0} e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q} d\lambda = \frac{e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda_0 q} - e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda_1 q}}{\frac{2\pi i}{h} q}$$

kifejezésbe behelyettesítünk a

$$c(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \lambda \geq \lambda_1 \\ 0, & \text{ha } \lambda < \lambda_1 \end{cases} \quad \lambda_1 < \lambda_0$$

szerint, akkor ez az $f(q)$ véges q -kra mindenütt reguláris és ha $q \rightarrow \pm \infty$, akkor $\frac{1}{q}$ módjára tart zérushoz, tehát

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(q)|^2 dq$$

véges. További sejtéseink is igaznak bizonyulnak. A *Fourier*-integrálok elméletéből ismeretes ugyanis,⁸⁷ hogy ha az $f(x)$ függvényre

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx$$

véges, akkor az

$$Lf(x) = F(y) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixy} f(x) dx$$

függvényre az $\int_{-\infty}^{+\infty} |F(y)|^2 dy$ is véges és egyenlő $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx$ -szel. Az is igaz, hogy $LLf(x) = f(-x)$. (Ez az úgynevezett *Laplace*-transzformáció, amely a differenciálegyenletek elméletében lényeges szerepet játszik.)

Helyettesítsük x -et és y -t $\sqrt{\frac{2\pi}{h}} q$ -val, illetőleg $\sqrt{\frac{2\pi}{h}} p$ -vel, azt kapjuk, hogy az

$$M f(q) = F(p) \equiv \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{2\pi i}{h} p q} f(q) dq$$

transzformáció hasonló tulajdonságú, mint az előző L . Következésképpen az M transzformáció \mathfrak{R}_∞ -t önmagára képezi le [$M f(q) = g(p)$ az \mathfrak{R}_∞ -nek minden $g(p)$ elemére megoldható: $f(q) = M g(-p)$], az $\|f\|$ változatlan marad és M lineáris. A II. 5. fejezet miatt M unitér. Így $M^2 f(q) = f(-q)$, tehát $M^{-1} f(q) = M^* f(q) = M f(-q)$, az M felcserélhető M^2 -tel, tehát az $f(q) \rightarrow f(-q)$ művelettel.

Amit $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$ -ra megállapítottunk, most így mondható el: $f(q)$ az $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$ -hoz tartozik, ha $F(p) = M^{-1} f(q)$ zérussal egyenlő minden $p > \lambda_0$ esetén. [Ekkor

$$F(p) = \sqrt{h} c(p),$$

itt az előbbi $c(\lambda)$ szerepel.] Eme $F(p)$ -k azonban, amint azt már megtanultuk, zárt $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$ sokaságot alkotnak. Ám ekkor az $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$ -ból az M transzformációval kapott $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$ is zárt lineáris sokaság. Az \mathfrak{R}_∞ -t M -mel transzformálva $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$ az $\mathfrak{R}'_{\lambda_0}$ -ba megy át és $E(\lambda_0)$ -ból $E'(\lambda_0)$ lesz:

$$E'(\lambda_0) = M E(\lambda_0) M^{-1}.$$

Így $E(\lambda_0)$ -val együtt $E'(\lambda_0)$ is teljesíti az \mathfrak{S}_1 , \mathfrak{S}_2 . feltételeket. Hátra van még \mathfrak{S}_3 . bizonyítása, vagyis az, hogy az $E'(\lambda)$ egységfelbontás az A' -höz tartozik.

Ezzel kapcsolatban csak a következőket bizonyítjuk be: ha $f(q)$ a konvergenciával kapcsolatos minden különösebb nehézség nélkül differenciálható és az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{h}{2\pi i} f'(q) \right|^2 dq$$

véges, akkor az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\|E'(\lambda)f\|^2$$

is véges és

$$(A'f, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E'(\lambda)f, g).^{88}$$

Valóban (ha $M^{-1} f(q) = F(p)$):

$$\begin{aligned} A'f(q) &= \frac{h}{2\pi i} f'(q) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} (M F(p)) = \\ &= \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{\sqrt{h}} \int F(p) e^{\frac{2\pi i}{h} p q} dp \right) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\sqrt{h}}{2\pi i} \int F(p) \frac{\partial}{\partial q} \left(e^{\frac{2\pi i}{h} p q} \right) dp = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{h}} \int F(p) p e^{\frac{2\pi i}{h} p q} dp = M(pF(p)).
 \end{aligned}$$

Így a fenti f -ekre $A' = MAM^{-1}$ (A a q operátor, illetőleg, mivel itt a p változót használjuk, a p operátor). Állításaink azonban A -ra és $E(\lambda)$ -ra érvényesek, s így akkor is igazak maradnak, ha \mathfrak{R}_∞ -t M -mel transzformáljuk, tehát $A' = MAM^{-1}$ -re és $E'(\lambda) = ME(\lambda)M^{-1}$ -re is érvényben maradnak.

A véges $a \leq q \leq b$ intervallum esetében a $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ operátorral egészen más a helyzet. Ekkor — mint tudjuk — az

$$f(a) : f(b) = \Theta, \quad (|\Theta| = 1)$$

határfeltételre is szükség van ahhoz, hogy a $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ operátor hermitikus legyen. A

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} f(q) = \lambda f(q) \text{ megoldása ismét}$$

$$f(q) = ce^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q},$$

most azonban

$$\int_a^b |f(q)|^2 dq = \int_a^b |c|^2 dq = (b-a)|c|^2$$

véges, tehát $f(q)$ mindig az \mathfrak{R}_∞ -hez tartozik. Másrészt ki kell elégülnie a határfeltételnek is:

$$f(a) : f(b) = e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda(a-b)} = \Theta,$$

illetőleg, ha Θ -t így vesszük fel: $\Theta = e^{-i\alpha}$ ($0 \leq \alpha < 2\pi$), akkor

$$\frac{2\pi i}{h} \lambda(a-b) = -i\alpha - 2k\pi i, \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots),$$

$$\lambda = \frac{h}{b-a} \left(\frac{\alpha}{2\pi} + k \right).$$

Így a spektrum most diszkrét és a normált megoldások a $(b-a)|c|^2 = 1$, vagyis

$$c = \frac{1}{\sqrt{b-a}} \text{ miatt, a következők:}$$

$$\varphi_k(q) = \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q} = \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{\frac{2\pi i}{h} \left(\frac{\alpha}{2\pi} + k \right) q},$$

$$(k=0, \pm 1, \pm 2, \dots).$$

Ez tehát ortonormált rendszer, amely egyúttal teljes is. Ugyanis, ha $f(q)$ valamennyi $\varphi_k(q)$ -ra ortogonális, akkor

$$e^{\frac{\alpha i}{b-a} q} f(q)$$

ortogonális valamennyi

$$e^{\frac{2\pi i}{b-a} kq}$$

függvényre. Tehát

$$e^{\frac{i\alpha}{2\pi} x} f\left(\frac{b-a}{2\pi} x\right)$$

ortogonális valamennyi e^{ikx} -re, más szóval az $1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \dots$ függvényekre. E függvény a 2π hosszúságú

$$a \leq \frac{b-a}{2\pi} x \leq b$$

intervallumban van értelmezve, s így jól ismert tételek folytán el kell tűnnie,⁸⁹ tehát $f(q) \equiv 0$.

Következésképpen most tisztán diszkrét spektrumunk van, ezzel az esettel e szakasz kezdetén általánosan már foglalkoztunk. Figyeljük meg, hogy a határfeltétel — más szóval Θ , illetőleg α — miként szabja meg a sajátértékeket és a sajátfüggvényeket.

Végül megvizsgálhatjuk még az egyik oldalról végtelen intervallum esetét is. Legyen például $0 \leq q < +\infty$. Először ismét az operátor hermitikus voltát kell mérlegelnünk:

$$(A'f, g) - (f, A'g) = \frac{h}{2\pi i} \int_0^{+\infty} (f'(q) \overline{g(q)} + f(q) \overline{g'(q)}) dq = \frac{h}{2\pi i} [f(q) \overline{g(q)}]_0^{\infty}.$$

Most is bebizonyítható, hogy $f(q) \overline{g(q)}$ zérushoz tart, ha $q \rightarrow \infty$ csakúgy, mint a II. 5. fejezetben, a mindkét irányban végtelen intervallum esetében. Ezért meg kell követelnünk, hogy $f(0) \overline{g(0)} = 0$ teljesüljön. Az $f=g$ esetében látszik, hogy a határfeltétel nem egyéb, mint $f(0) = 0$.

Most azonban komoly nehézségek bukkannak fel. Az $A'\varphi = \lambda\varphi$ megoldásai most is ugyanazok, mint a $-\infty < q < +\infty$ esetében, nevezetesen a

$$ce^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q}$$

függvények, ezek azonban nem tartoznak \mathfrak{R}_{∞} -hez és még a határfeltételt sem elégítik ki. Ez utóbbi gyanús. Mindamellet meglepő, hogy a már korábban vázolt eljárással szükségképpen ugyanazokat az $E(\lambda)$ -kat kell kapnunk, mint a $-\infty < q < +\infty$ intervallum esetében, hiszen ugyanazok a megoldások (noha ezek „szabálytalanok”, hiszen nem tartoznak \mathfrak{R}_{∞} -hez). Hogyan lehet ezt azzal összeegyeztetni, hogy most más operátorról van szó? Nem is ezekre az $E(\lambda)$ -kra van

szükségünk. Ugyanis az $f(q)$ -k ($0 \leq q < +\infty$, $\int_0^{\infty} |f(q)|^2 dq$ véges) F_{Ω} Hilbert-terében ismét definiálva M -et és M^{-1} -et, kapjuk, hogy

$$Mf(q) = F(p) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_0^{+\infty} e^{\frac{2\pi i}{h} pq} f(q) dq,$$

$$M^{-1}F(p) = f(q) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\pi i}{h} pq} F(p) dp \quad (= MF(-p)),$$

és látható, hogy M az $f(q)$ -k

$$0 \leq q < +\infty, \int_0^{\infty} |f(q)|^2 dq$$

véges F_{Ω} Hilbert-terét más Hilbert-térre képezi le, nevezetesen az $F(p)$ -k

$$-\infty < p < +\infty, \int_{-\infty}^{+\infty} |F(p)|^2 dp$$

véges F_{Ω} Hilbert-terébe. Az $\|Mf(q)\| = \|f(q)\|$ mindig igaz (ez a korábban említett tételekből következik, ha olyan $f(q)$ -kat tekintünk, amelyekre $f(q) = 0$, ha $-\infty < q < 0$), az $\|M^{-1}F(p)\| = \|F(p)\|$ azonban általában nem teljesül. Ha ugyanis $f(q)$ -t a $q < 0$ esetre az

$$f(q) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\pi i}{h} pq} F(p) dp$$

képlettel definiáljuk, akkor ismét a korábban említett tételek folytán

$$\|F\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |F(p)|^2 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} |f(q)|^2 dq,$$

míg

$$\|M^{-1}F\|^2 = \|f\|^2 = \int_0^{\infty} |f(q)|^2 dq,$$

s így $\|M^{-1}F\| < \|F\|$, hacsak a most definiált $f(q)$ nem tűnik el véletlenül minden $q < 0$ esetén. Így $E'(\lambda) = ME(\lambda)M^{-1}$ nem egységfelbontás, módszerünk csődöt mondott.⁹⁰

Nemsokára majd meglátjuk (a 105. jegyzetben), hogy mindez e különleges eset természetében gyökeredzik, ehhez az operátorhoz ugyanis nem tartozik egységfelbontás.

Mielőtt lezárnánk e bevezető megfontolásainkat, megadunk néhány formális szabályt az

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda)$$

szimbolikus alakban felírt operátorokkal végrehajtott számolásokra.

Legyen F minden $E(\lambda)$ -val felcserélhető projektor. Ekkor $\lambda' < \lambda''$ esetén

$$\begin{aligned} \|E(\lambda'') F f - E(\lambda') F f\|^2 &= \|(E(\lambda'') - E(\lambda')) F f\|^2 = \\ &= \|F(E(\lambda'') - E(\lambda')) f\|^2 \leq \|(E(\lambda'') - E(\lambda')) f\|^2, \end{aligned}$$

ily módon, mivel $E(\lambda'')$, $E(\lambda')$, $E(\lambda'') - E(\lambda')$ és $E(\lambda'') F$, $E(\lambda') F$, $E(\lambda'') F - E(\lambda') F = (E(\lambda'') - E(\lambda')) F$ valamennyien projektorok, azért

$$\|E(\lambda'') F f\| - \|E(\lambda') F f\| \leq \|E(\lambda'') f\| - \|E(\lambda') f\|.$$

Tehát

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda) f\|^2 \geq \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda) F f\|^2.$$

Így \bar{S}_3 folytán, ha $A f$ létezik, akkor létezik $A F f$ is. Továbbá:

$$A F = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda) F) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(F E(\lambda)) = F A,^{91}$$

vagyis A és F felcserélhetőek egymással. Nevezetesen, ha (\bar{S}_2 . miatt) $E(\lambda)$ -t képzeljük F helyébe, akkor

$$\begin{aligned} A E(\lambda) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda' d(E(\lambda') E(\lambda)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda' d(E(\text{Min}(\lambda, \lambda'))) = \\ &= \int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda') + \int_{\lambda}^{+\infty} \lambda' dE(\lambda), \end{aligned}$$

ám az $\int_{\lambda}^{\infty} \lambda' dE(\lambda') = 0$, hiszen a differenciált követő függvény állandó, így

$$A E(\lambda) = E(\lambda) A = \int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda').$$

Ebből továbbá következik az is, hogy

$$A^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda) A) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d\left(\int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda')\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 dE(\lambda).$$

Általában

$$A^n = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^n dE(\lambda),$$

mert $(n-1)$ -ről n -re induktív módon okoskodva kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
 A^n &= A^{n-1}A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^{n-1} d(E(\lambda)A) = \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^{n-1} d\left(\int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda')\right) = 92. \text{ jegyzet} = \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^{n-1} \cdot \lambda dE(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^n dE(\lambda).
 \end{aligned}$$

Így, ha $p(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$ tetszőleges polinóm, akkor

$$p(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(\lambda) dE(\lambda),$$

($p(A)$ természetesen azt jelenti, hogy

$$p(A) = a_01 + a_1A + \dots + a_nA^n$$

és az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE(\lambda) = 1$$

az \mathfrak{S}_1 -nek a következménye.)

Igaz továbbá a következő is: ha $r(\lambda)$ és $s(\lambda)$ tetszőleges függvény és ha a B és C operátort szimbolikusan így definiáljuk:

$$B = \int_{-\infty}^{+\infty} r(\lambda) dE(\lambda), \quad C = \int_{-\infty}^{+\infty} s(\lambda) dE(\lambda),^{93}$$

akkor

$$BC = \int_{-\infty}^{+\infty} r(\lambda) s(\lambda) dE(\lambda).$$

A bizonyítás során ugyanúgy járunk el, mint a $B=C=A$ speciális esetben:

$$\begin{aligned}
 BE(\lambda) &= \int_{-\infty}^{+\infty} r(\lambda') d(E(\lambda')E(\lambda)) = \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} r(\lambda') d(E(\text{Min}(\lambda, \lambda'))) = \int_{-\infty}^{\lambda} + \int_{\lambda}^{+\infty} = \\
 &= \int_{-\infty}^{\lambda} r(\lambda') dE(\lambda') + \int_{\lambda}^{+\infty} r(\lambda') dE(\lambda) = \int_{-\infty}^{\lambda} r(\lambda') dE(\lambda'), \\
 CB &= \int_{-\infty}^{+\infty} s(\lambda) d(BE(\lambda)) = \int_{-\infty}^{+\infty} s(\lambda) d\left(\int_{-\infty}^{\lambda} r(\lambda') dE(\lambda')\right) =
 \end{aligned}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} s(\lambda) \cdot r(\lambda) dE(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} s(\lambda) r(\lambda) dE(\lambda).$$

Az alábbi összefüggések könnyen igazolhatók:

$$B^* = \int_{-\infty}^{+\infty} r(\lambda) dE(\lambda), \quad aB = \int_{-\infty}^{+\infty} ar(\lambda) dE(\lambda),$$

$$B \pm C = \int_{-\infty}^{+\infty} (r(\lambda) \pm s(\lambda)) dE(\lambda).$$

Így annak sincs formális akadályja, hogy az $r(\lambda)$ függvénnyel a B operátort így írjuk fel: $B = r(A)$.⁹⁴ Külön meg kell itt említenünk a nemfolytonos

$$e_\lambda(\lambda') = \begin{cases} 1, & \text{ha } \lambda' \leq \lambda, \\ 0, & \text{ha } \lambda' > \lambda \end{cases}$$

függvényeket. Ezekre \bar{S}_1 folytán

$$e_\lambda(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} e_\lambda(\lambda') dE(\lambda') = \int_{-\infty}^{\lambda} dE(\lambda') = E(\lambda).$$

(E szakasz elején megvizsgáltuk az $A = q_j \dots$ operátort. Ennek $E(\lambda)$ -ja nem egyéb, mint az 1-gyel vagy a 0-val való szorzás aszerint, hogy $q \leq \lambda$, vagy pedig $q > \lambda$; ez tehát az $e_\lambda(q)$ -val való szorzás. Következésképpen $e_\lambda(q_j \dots) = e_\lambda(q_j) \dots$. E példa segítségével a fenti fogalmakhoz intuitív képet alkothatunk.)

9. A sajátérték-feladat megoldásai létezésének és egyértelműségének diszkussziója

Az előző szakaszban speciális esetek kapcsán csupán nagyjából tekintettük át azt a kérdést, hogy létezik-e az adott A hermitikus operátorhoz $E(\lambda)$ egységfelbontás. E kérdés rendszeres taglalása még hátra van. A feladat matematikai szempontból kimerítő tárgyalása e könyv keretein kívül esik. Állításainknak egy részét bizonyítjuk majd be, a többit csupán idézni fogjuk. Azért korlátozódunk erre, mert minden matematikai részlet ismerete nem feltétlenül szükséges a kvantummechanika megértéséhez.⁹⁵

A 18. Tételben megmutattuk, hogy a lineáris operátorok folytonosságát a következőképpen fejezhetjük ki:

$$(C_0) \quad \|Af\| \leq C \cdot \|f\|$$

(itt C tetszőleges, de rögzített szám).

Ugyancsak a 18. Tétel folytán ezzel egyenértékű feltételek a következők:

$$(C_{01}) \quad |(Af, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|,$$

$$(C_{02}) \quad |(Af, f)| \leq C \cdot \|f\|^2.$$

(az utóbbi csupán hermitikus A -ra érvényes).

A folytonossággal egyenértékű C_{01} feltétel éppen a korlátosság Hilbert-féle fogalma. HILBERT megfogalmazta és megoldotta a sajátérték-feladatot korlátos (vagyis folytonos) hermitikus operátorokra (lásd a 70. jegyzetet). Mielőtt azonban ezt az esetet megvizsgálánk, egy további fogalmat kell bevezetnünk.

Az A hermitikus operátorról akkor mondjuk, hogy zárt, ha a következő tulajdonságú: ha f_1, f_2, \dots konvergens pontsorozat, amelynek határpontja f és Af_1, Af_2, \dots létezik és ugyancsak konvergens pontsorozatot alkot az $f_n \rightarrow f$ esetén, $Af_n \rightarrow f^*$, akkor Af is létezik és $Af = f^*$. Vegyük észre, hogy a folytonosságot olyan módon is definiálhatnánk, hogy az e meghatározással szoros kapcsolatban legyen, nevezetesen: ha Af_n, Af létezik és $f_n \rightarrow f$, akkor $Af_n \rightarrow Af$ is fennáll. A két definíció között az a különbség, hogy a zárttság esetében csak az Af_n f^* határpontjának létezése esetén jelentjük ki azt, hogy ez Af -fel egyenlő. A folytonosságnál f^* létezését is kijelentjük.

Néhány példa. Legyen \mathfrak{R}_∞ ismét az olyan $f(q)$ -k tere, amelyekre

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(q)|^2 dq$$

véges ($-\infty < q < +\infty$). Legyen A a $q \dots$ operátor, amelyet azon $f(q)$ -kra definiálunk, amelyekre

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(q)|^2 dq \quad \text{és} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} q^2 |f(q)|^2 dq$$

véges, A' pedig a $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ operátor, amelyet olyan, mindenütt differenciálható $f(q)$ -kra értelmezünk, amelyekre

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(q)|^2 dq \quad \text{és} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{h}{2\pi i} f'(q) \right|^2 dq$$

véges. Mint tudjuk, mindkét operátor hermitikus. Az A zárt. Legyen ugyanis f_n és Af_n konvergens: $f_n \rightarrow f$, $Af_n \rightarrow f^*$, vagyis

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f_n(q) - f(q)|^2 dq \rightarrow 0,$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |q f_n(q) - f^*(q)|^2 dq \rightarrow 0.$$

Ekkor a II. 3. szakaszban a **D.** bizonyítás során alkalmazott gondolatmenet szerint létezik f_1, f_2, \dots olyan f_{n_1}, f_{n_2}, \dots részsorozata, amely a q -k egy zérus mértékű halmazán kívül mindenütt egy $g(q)$ határfüggvényhez konvergál: $f_{n_i}(q) \rightarrow g(q)$. Ezért

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |g(q) - f(q)|^2 dq = 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |qg(q) - f^*(q)|^2 dq = 0,$$

más szóval: egy zérus mértékű halmaztól eltekintve $g(q) = f(q)$ és $qg(q) = f^*(q)$, tehát $f^*(q) = qf(q)$, vagyis $f^*(q)$ és $qf(q)$ lényegében egyenlő egymással. Mivel azonban a feltétel szerint f^* az \mathfrak{R}_∞ -hez tartozik, így $qf(q)$ is \mathfrak{R}_∞ eleme. Következésképpen $Af(q)$ létezik és $qf(q) = f^*(q)$ -val egyenlő.

A' viszont nem zárt. Legyen

$$f_n(q) = e^{-\sqrt{q^2 + \frac{1}{n}}}, \quad f(q) = e^{-|q|}.$$

Világos, hogy $A'f_n$ -nek van értelme, $A'f$ -nek azonban nincs: f -nek a $q=0$ -ban nincs deriváltja. Mindazonáltal $f_n \rightarrow f$ és $Af_n \rightarrow f^*$, és egyszerű számolás mutatja, hogy $f^*(q) = -\operatorname{sgn}(q)e^{-|q|}$ ($\operatorname{sgn}(q) = -1, 0, +1$, ha $q <, =, > 0$).

Megmutatjuk most, hogy a folytonossággal szemben a zártság olyan tulajdonság, amelyet némi nehézség árán hermitikus operátorok esetén mindig kimondhatunk. Ezt a kiterjesztés nevű eljárással érhetjük el; ennek során az operátort \mathfrak{R}_∞ minden olyan pontjában, amelyben már értelmezve van, változatlanul hagyjuk, és értelmezzük bizonyos olyan további pontokban is, amelyekben eddig nem volt értelmezve.

Legyen tehát A tetszőleges hermitikus operátor. Az \tilde{A} operátort a következőképpen értelmezzük: Ha az f ponthoz konvergáló f_1, f_2, \dots sorozatra az Af_n sorozat létezik és f^* -hoz tart, akkor $\tilde{A}f$ legyen egyenlő f^* -gal. E definíció csak akkor engedhető meg, ha egyértelmű, vagyis ha $f_n \rightarrow f$, $g_n \rightarrow f$, $Af_n \rightarrow f^*$ és $Ag_n \rightarrow g^*$, akkor $f^* = g^*$. Valóban, ha Ag értelmezve van, akkor

$$(f^*, g) = \lim(Af_n, g) = \lim(f_n, Ag) = (f, Ag),$$

$$(g^*, g) = \lim(Ag_n, g) = \lim(g_n, Ag) = (f, Ag),$$

tehát $(f^*, g) = (g^*, g)$ s mivel a g -k mindenütt sűrűn helyezkednek el, azért $f^* = g^*$. Az \tilde{A} értelmezése tehát korrekt. Az \tilde{A} valóban A kiterjesztése, mert valahányszor Af értelmezve van, $\tilde{A}f$ is értelmezve van és $\tilde{A}f = Af$. Legyen ugyanis ekkor $f_n = f$ és $f^* = Af$. Abból, hogy A lineáris és hermitikus (folytonosság alapján) következik, hogy \tilde{A} is az. Végül \tilde{A} zárt, hiszen ha valamennyi $\tilde{A}f_n$ értelmezve van és $f_n \rightarrow f$, $\tilde{A}f_n \rightarrow f^*$, akkor léteznek olyan $f_{n,1}, f_{n,2}, \dots$ sorozatok, amelyekre $Af_{n,m}$ értelmezve van és $f_{n,m} \rightarrow f_n$, $Af_{n,m} \rightarrow f_n^*$, $\tilde{A}f_n = f_n^*$. Bármely n -re létezik olyan N_n , hogy ha $m \geq N_n$, akkor

$$\|f_{n,m} - f_n\| \leq \frac{1}{n}, \quad \|Af_{n,m} - f_n^*\| \leq \frac{1}{n}.$$

Ily módon

$$f_{n,N_n} - f_n \rightarrow 0, \quad Af_{n,N_n} - \tilde{A}f_n \rightarrow 0$$

és ekkor

$$f_{n, N_n} - f \rightarrow 0, \quad Af_{n, N_n} - f^* \rightarrow 0,$$

ebből definíció szerint következik, hogy $\tilde{A}f = f^*$.

(Megjegyezzük, hogy nem folytonos operátor a kiterjesztés segítségével sohasem tehető folytonossá.)

Ha a B operátor A kiterjesztése, vagyis valahányszor Af értelmezve van, Bf is értelmezve van és egyenlő Af -fel, akkor a következő jelölést használjuk: $B \succ A$, vagy pedig $A \prec B$. Így tehát azt bizonyítottuk be, hogy $A \prec \tilde{A}$ és \tilde{A} hermitikus és zárt. Minden további nélkül világos, hogy ha B zárt és $A \prec B$ akkor $\tilde{A} \prec B$ is igaz. Következésképpen \tilde{A} az A -nak legkisebb zárt kiterjesztése. (Ily módon $\tilde{\tilde{A}} = \tilde{A}$.)

A zártág relációja A és \tilde{A} között magától értetődővé teszi azt, hogy minden gondolatmenetben \tilde{A} használható A helyett, hiszen A értelmezési tartományát \tilde{A} bevezetésével logikus módon terjesztettük ki, vagy fordítva gondolkozva, az A értelmezési tartománya az \tilde{A} -énak felesleges leszűkítése. E helyettesítés alapján feltehetjük, hogy az általunk tekintett hermitikus operátorok egyben zártak is.

Tekintsük az A folytonos hermitikus operátort. Ebben az esetben a lezárás egyenértékű az értelmezési tartomány lezárásával. A folytonosságra jellemző $\|Af\| \leq C\|f\|$ tulajdonság érvényes \tilde{A} -ra is. Így \tilde{A} is folytonos, mivel egyrészt értelmezési tartománya zárt, másrészt mindenütt sűrű, azért egyenlő \mathfrak{R}_∞ -nel. Ennek fordítottja is igaz: ha a zárt operátor mindenütt értelmezve van, akkor folytonos (ez TOEPLITZ⁹⁶ tétele, melynek bizonyítását mellőzzük).

HILBERT eredménye a következőképpen szól: minden folytonos operátorhoz egy és csakis egy egységfelbontás tartozik (lásd a 70. jegyzet hivatkozását). Mivel a folytonos operátor mindenütt értelmezve van, ezért az

$$\int \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2$$

mindig véges; mivel ez még egyenlő $\|Af\|^2$ -tel is és ez utóbbi pedig C_0 szerint $\leq C^2\|f\|^2$, azért

$$\begin{aligned} 0 &\geq \|Af\|^2 - C^2\|f\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 - \\ &\quad - C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\|E(\lambda)f\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda^2 - C^2) d\|E(\lambda)f\|^2. \end{aligned}$$

Legyen itt $f = E(-C - \varepsilon)g$, ekkor $E(\lambda)f = E(\text{Min}(\lambda, -C - \varepsilon))g$, s ez pedig állandó, ha $\lambda \geq -C - \varepsilon$, így csak az $\int_{-\infty}^{-C - \varepsilon}$ nem zérus. Ebben viszont $E(\lambda)f = E(\lambda)g$ és

$$\lambda^2 - C^2 \geq (C + \varepsilon)^2 - C^2 > 2C\varepsilon,$$

tehát

$$\begin{aligned} 0 &\geq 2C\varepsilon \int_{-\infty}^{-C - \varepsilon} d\|E(\lambda)g\|^2 = 2C\varepsilon\|E(-C - \varepsilon)g\|^2, \\ \|E(-C - \varepsilon)g\|^2 &\leq 0, \quad E(-C - \varepsilon)g = 0. \end{aligned}$$

Hasonlóképpen, ha $f = g - E(C + \varepsilon)g$, akkor megmutatható, hogy

$$g - E(C + \varepsilon)g = 0.$$

Eszerint tehát tetszőleges $\varepsilon > 0$ -ra $E(-C - \varepsilon) = 0$, $E(C + \varepsilon) = 1$, vagyis $E(\lambda) = 0$, ha $\lambda < -C$, és $E(\lambda) = 1$, ha $\lambda > C$. (Az \mathfrak{S}_2 . folytán az utóbbi akkor is igaz, ha $\lambda = C$.) Következésképpen $E(\lambda)$ csak a $-C \leq \lambda \leq C$ tartományban változik.

Fordítva, ebből A folytonos volta következik:

$$\begin{aligned} \|Af\|^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 = \int_{-C}^C \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 \leq \\ &\leq C^2 \int_{-C}^C d\|E(\lambda)f\|^2 = C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\|E(\lambda)f\|^2 = C^2 \cdot \|f\|^2, \\ \|Af\| &\leq C \cdot \|f\|. \end{aligned}$$

Látható tehát, hogy az olyan egységfelbontásokkal, amelyek λ -nak csak véges intervallumában változnak, a folytonos A -kat kimerítettük. Mi a helyzet a nem folytonos operátorokkal? Még rendelkezésre állnak azok az egységfelbontások, amelyek tetszőlegesen nagy λ -kra is változnak. Kimerítik-e ezek vajon az említett hermitikus operátorokat?

Először azokat a körülményeket kell helyesen mérlegelni, amelyek miatt ezek az operátorok nem értelmezhetők mindenütt.

Előfordulhat, hogy valamely hermitikus operátor a *Hilbert*-tér oly pontjaiban nincs értelmezve, ahol pedig tulajdonképpen értelmezhető lenne. Az $A' = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$

operátor nincs értelmezve az $f(q) = e^{-|q|}$ esetében, viszont a $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ -t korlátozhattuk volna analitikus függvényekre (a $-\infty < q < +\infty$ intervallumban q valós).⁹⁷ Az értelmezési tartomány megszorításának az szab határt, hogy annak mindenütt sűrűnek kell lennie. Még ha zárt operátorokra korlátozódunk, akkor is lehetséges esetenként a kiterjesztés.

Valóban, tekintsük példaképpen az $A' = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ operátort a $0 \leq q \leq 1$ intervallumban. Tegyük fel, hogy itt $f(q)$ mindenütt differenciálható és $\int_0^1 |f(q)|^2 dq$, $\int_0^1 |f'(q)| dq$ véges. Ahhoz, hogy A' hermitikus legyen, még az $f(0) : f(1) = e^{-i\alpha}$ ($0 \leq \alpha \leq 2\pi$) határfeltételt is ki kell róni. Legyen eme $f(q)$ -k halmaza \mathfrak{A}'_α , és az így korlátozott A' -t pedig jelölje A'_α . Tekintsük most az $f(1) = f(0) = 0$ határfeltételt, és legyen az ennek megfelelő $f(q)$ -k halmaza \mathfrak{A}'^0 , és az így korlátozott A' pedig A'^0 . Minden \tilde{A}'_α kiterjesztése \tilde{A}'^0 -nek (amely hermitikus és értelmezési tartománya mindenütt sűrű),⁹⁸ és ezért a zárt \tilde{A}'_α -k is kiterjesztései \tilde{A}'^0 -nak. Ezek egymástól és \tilde{A}'^0 -tól mind különböznek. Valóban, a nyilvánvalóan unitér $f(q) \rightarrow e^{i\theta q} f(q)$ operáció az A' -t

$A' + \frac{h\beta}{2\pi} \cdot 1$ -be, az \mathfrak{A}_α -t $\mathfrak{A}_{\alpha+\beta}$ -ba, és \mathfrak{A}^0 -t \mathfrak{A}^0 -ba viszi át; tehát A'_α az $A'_{\alpha-\beta} + \frac{h\beta}{2\pi} \cdot 1$ -be, A'^0 az $A'^0 + \frac{h\beta}{2\pi} \cdot 1$ -be, ily módon \tilde{A}'_α az $\tilde{A}'_{\alpha-\beta} + \frac{h\beta}{2\pi} \cdot 1$ -be, \tilde{A}'^0 az $\tilde{A}'^0 + \frac{h\beta}{2\pi} \cdot 1$ -be megy át. Így az $\tilde{A}'_\alpha = \tilde{A}'^0$ egyenlőségből következnek, hogy $\tilde{A}'_{\alpha-\beta} = \tilde{A}'^0$, más szóval minden \tilde{A}'_α egymással egyenlő volna. Elegendő tehát megmutatni, hogy $\tilde{A}'_\alpha \neq \tilde{A}'_\gamma$, ha $\alpha \neq \gamma$, és biztosan ez a helyzet, ha A'_α, A'_γ nem rendelkezik közös hermitikus kiterjesztéssel, vagyis ha A' nemhermitikus \mathfrak{A}_α és \mathfrak{A}_γ egyesítésében. Tekintve, hogy $e^{i\alpha q}$ az \mathfrak{A}_α -hoz, $e^{i\gamma q}$ pedig \mathfrak{A}_γ -hoz tartozik és

$$\begin{aligned} (A' e^{i\alpha q}, e^{i\gamma q}) - (e^{i\alpha q}, A' e^{i\gamma q}) &= i\alpha \int_0^1 e^{i(\alpha-\gamma)q} dq - i\gamma \int_0^1 e^{i(\alpha-\gamma)q} dq = \\ &= \int_0^1 e^{i(\alpha-\gamma)q} i(\alpha-\gamma) dq = e^{i(\alpha-\gamma)} - 1 \neq 0, \end{aligned}$$

valóban $\tilde{A}'_\alpha \neq \tilde{A}'_\gamma$. Következésképpen a zárt és hermitikus \tilde{A}'^0 operátor túl erősen korlátozott tartományban van értelmezve, mert valódi (vagyis \tilde{A}'^0 -tól különböző) kiterjesztései léteznek; az \tilde{A}'_α -k és ezért a kiterjesztési eljárás is végtelenül sok értékű, mivel más és más \tilde{A}'_α -t használva a sajátérték-feladatnak más és más megoldásait

kapjuk. [Ez mindig tisztán diszkrét spektrum, amely azonban függ α -tól: $h\left(\frac{\alpha}{2\pi} + k\right)$,

$k=0, \pm 1, \pm 2, \dots$] Másrészt az \tilde{A}'^0 operátorra a sajátérték-feladatnak ésszerű megoldásai nincsenek. Ténylegesen megmutatjuk e szakasz folyamán, hogy olyan hermitikus operátor, amely egységfelbontással előállítható, nem rendelkezik valódi kiterjesztéssel. Azt az operátort, amelynek nincs valódi kiterjesztése — tehát, amely minden olyan pontban értelmezve van, ahol egyáltalán ésszerűen értelmezni lehet, vagyis hermitikus volta minden kiterjesztésnél megsérül —, maximális operátornak nevezzük. A fentiek szerint egységfelbontása csak maximális operátornak lehet.

Igaz azonban a következő tétel: minden hermitikus operátor maximális hermitikus operátorra terjeszthető ki. (A nem maximális, de zárt operátorok mindig végtelen sok egymástól különböző módon terjeszthetők ki. Ez azt jelenti, hogy a kiterjesztési eljárás során az $A \rightarrow \tilde{A}$ lezárás az egyetlen egyértelmű lépés. Lásd a 95. jegyzetet). Problémánkra tehát a legáltalánosabb válasz, amelyre szerencsés esetben számíthatunk, a következő: maximális hermitikus operátorokhoz egy és csak egy egységfelbontás tartozik (minden zárt és folytonos operátor az \mathfrak{R}_∞ -ben mindenütt értelmezve van, s így maximális).

Így tehát a következő kérdésekre kell válaszolnunk: tartozik-e valamely maximális hermitikus operátorhoz egységfelbontás? Előfordulhat-e, hogy ugyanahhoz az operátorhoz több ilyen tartozik?

Először is megadjuk a választ: adott maximális hermitikus operátorhoz vagy nem tartozik egyáltalán egységfelbontás, vagy csak egyetlen tartozik hozzá, és általában a második eset fordul elő. Ily módon a sajátérték-feladat egyértelmű, de bizonyos körülmények között megoldhatatlan. Az első eset bizonyos értelemben

kivételesnek tekinthető. Azt a gondolatmenetet, amely ehhez az eredményhez vezet, most nagy vonalakban vázoljuk.

Az A (végtelen dimenziós és unitér transzformációval diagonális alakra hozható) mátrix racionális $f(A)$ függvényének ugyanazok a sajátvektorai, mint A -nak, sajátértékei pedig $f(\lambda_1), f(\lambda_2), \dots, f(\lambda_n)$, ahol $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ az A sajátértékei.⁹⁹ Ha $f(\lambda)$ a komplex sík valós tengelyét az egységkörre képezi le, akkor a tisztán valós sajátértékű mátrixok egységnyi abszolút értékű mátrixokba mennek át, vagyis az A hermitikus mátrix $f(A)$ képe unitér lesz.¹⁰⁰ Ilyen tulajdonsággal rendelkezik például

$$f(\lambda) = \frac{\lambda - i}{\lambda + i}$$

és a megfelelő

$$U = \frac{A - i \cdot 1}{A + i \cdot 1}, \quad A = -i \frac{U + 1}{U - 1}$$

transzformáció, neve *Cayley-transzformáció*. Megpróbáljuk most ezt a transzformációt alkalmazni az \mathfrak{R}_∞ hermitikus operátoraira. A következőképpen definiáljuk U -t: U olyan és csak olyan f -ekre legyen értelmezve, amelyekre $f = (A + i \cdot 1)\varphi = A\varphi + i\varphi$, s ekkor legyen $Uf = (A - i \cdot 1)\varphi = A\varphi - i\varphi$. Azt reméljük, hogy e meghatározás minden f -re egyértékű U -et szolgáltat, és hogy U unitér. Az \mathfrak{R}_n -re a bizonyítás érdektelen, hiszen a diagonalizálhatóság itt mindig fennáll, s így a sajátérték-feladat tisztán diszkrét spektrummal megoldható. Ha az U -ra vonatkozó állítások igazak, akkor A sajátérték-feladatát a következőképpen oldhatjuk meg:

Az U -ra a sajátérték-feladat a következő alakban oldható meg: létezik — mégpedig egyetlen — olyan $E(\sigma)$ ($0 \leq \sigma \leq 1$) projektorcsalád, amelynek tagjai kielégítik az alábbi feltételeket:

\bar{S}_1 . $E(0) = 0$, $E(1) = 1$ és ha $\sigma \rightarrow \sigma_0$, $\sigma \geq \sigma_0$, akkor $E(\sigma)f \rightarrow E(\sigma_0)f$.

\bar{S}_2 . Ha $\sigma' \leq \sigma''$, akkor $E(\sigma') \leq E(\sigma'')$.

\bar{S}_3 . Mindig igaz, hogy

$$(Uf, g) = \int_0^1 e^{2\pi i \sigma} d(E(\sigma)f, g).$$

(Az Uf mindenütt értelmezve van és a jobb oldali integrál mindig abszolút konvergens.)¹⁰¹

Mindezt a *Hilbert*-elmélet keretei között és módszereivel lehet bebizonyítani, annak alapján, hogy az U unitér operátor mindig folytonos (lásd a 70. és a 101. jegyzetben a hivatkozásokat). Szembetűnik a hasonlatosság \bar{S}_1 – \bar{S}_3 -mal. A különbség a következő: az integrandus ott valós: $-\infty < \lambda < +\infty$, itt pedig komplex: $e^{2\pi i \sigma}$ és az egységkör mentén kell integrálni (már \mathfrak{R}_n -ben is messzevezetű analógia van a hermitikuság és az unitaritás, illetőleg a valós tengely és az egységkör között, lásd a 100. jegyzetet), továbbá az értelmezési tartomány \bar{S}_3 jellemzése itt felesleges, mert az unitér operátor mindenütt értelmezve van.

Az \bar{S}_1 folytán ha $\sigma \rightarrow 0$ ($\sigma \geq 0$ egyébként definíció szerint), $E(\sigma)f \rightarrow E(0)f = 0$, míg ha $\sigma \rightarrow 1$ ($\sigma \leq 1$ ugyancsak definíció szerint), $E(\sigma)f \rightarrow E(1)f = f$ nem feltétlenül igaz. Ha valóban nem ez a helyzet, akkor $E(\sigma)$ a $\sigma = 1$ -nél nem folytonos. Létezik azonban olyan E' projektor (lásd a 17. Tételt a II. 4. fejezetben, illetőleg a 79. jegyzetet), hogy $\sigma \rightarrow 1$, $\sigma < 1$ esetén $E(\sigma)f \rightarrow E'f$, így ilyenkor $E' \neq E(1) = 1$, vagyis $E'f = 0$ rendelkezik $f \neq 0$ megoldással. Tekintve, hogy $E(\sigma) \leq E'$, az $E'f = 0$ -ból következik, hogy $E(\sigma)f = 0$, minden $\sigma < 1$ esetén. Fordítva, E' definíciójából következik, hogy ha $E(\sigma)f = 0$, $\sigma < 1$ esetén, akkor $E'f = 0$. Ha $\sigma < 1$ esetén minden $E(\sigma)f = 0$, akkor a II. 8. fejezet elején mondottak mintájára látható, hogy $(Uf, g) = (f, g)$ minden g -re, tehát $Uf = f$. Fordítva, ha $Uf = f$, akkor

$$\int_0^1 e^{2\pi i \sigma} d(E(\sigma)f, f) = (Uf, f) = (f, f),$$

$$\operatorname{Re} \int_0^1 e^{2\pi i \sigma} d(E(\sigma)f, f) = (f, f),$$

$$\int_0^1 (1 - \cos(2\pi\sigma)) d(E(\sigma)f, f) = \int_0^1 (1 - \cos(2\pi\sigma)) d(\|E(\sigma)f\|^2) = 0.$$

Ebből, ismét a II. 8. fejezet elején mondottak mintájára, azt kapjuk, hogy $E(\sigma)f = 0$, valahányszor $\sigma < 1$ (persze akkor is, ha $\sigma \leq 0$). Ily módon az, hogy $E(\sigma)$ a $\sigma = 1$ -nél nem folytonos, annyit jelent, hogy $Uf = f$ -nek létezik $f \neq 0$ megoldása.

Az U Cayley-transzformáltra $\varphi = Af + if$, $U\varphi = Af - if$, és az $U\varphi = \varphi$ -ből következik az $f = 0$, $\varphi = 0$. Most az $E(\sigma)f \rightarrow f$ szükségképpen érvényes lesz $\sigma \rightarrow 1$ esetén is. Ilyen módon a

$$\lambda = -i \frac{e^{2\pi i \sigma} + 1}{e^{2\pi i \sigma} - 1} = -\operatorname{ctg} \pi \sigma, \quad \sigma = -\frac{1}{\pi} \operatorname{arc} \operatorname{ctg} \lambda$$

leképezéssel, amely a $0 < \sigma < 1$ intervallumot a $-\infty < \lambda < +\infty$ intervallumra egyértelműen és monoton módon képezi le, az $E(\sigma)$ -ból előállíthatunk az \bar{S}_1 , \bar{S}_2 -nak eleget tevő $F(\lambda)$ egységfelbontást:

$$(C.) \quad F(\lambda) = E\left(-\frac{1}{\pi} \operatorname{arc} \operatorname{ctg} \lambda\right), \quad E(\sigma) = F(\operatorname{ctg} \pi \sigma).$$

Bebizonyítjuk, hogy $F(\lambda)$ az \bar{S}_3 -t is kielégíti A -ra nézve, ha $E(\sigma) \bar{S}_n$ -nak tesz eleget U -ra nézve. Ily módon az (esetleg nem folytonos) A operátor sajátérték-feladatának megoldását illető létezési és egyértelműségi kérdések az U operátorral kapcsolatos megfelelő kérdésekre vihetők át. Ezekre azonban a fentiek értelmében egyszerű válasz adható.

Legyen tehát U az A hermitikus operátor Cayley-transzformáltja. Először azt az esetet vizsgáljuk meg, amikor U unitér. Ekkor létezik oly $E(\sigma)$, amely \bar{S}_1 , \bar{S}_3 -nak eleget tesz. Képezzük C . alapján $F(\lambda)$ -t. Ez teljesíti \bar{S}_1 , és \bar{S}_2 -t. Ha Af értelmezve van, akkor

tehát

$$Af + if = \varphi, \quad Af - if = U\varphi,$$

$$f = \frac{\varphi - U\varphi}{2i}, \quad Af = \frac{\varphi + U\varphi}{2}.$$

Ekkor, részben szimbolikusan, így járunk el:¹⁰²

$$f = \frac{1}{2i} (\varphi - U\varphi) = \frac{1}{2i} \left(\varphi - \int_0^1 e^{2\pi i \sigma} dE(\sigma)\varphi \right) = \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma}}{2i} dE(\sigma)\varphi,$$

$$E(\sigma)f = \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(E(\sigma)E(\sigma')\varphi) =$$

$$= \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma}}{2i} d(E(\text{Min}(\sigma, \sigma'))\varphi) = \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} dE(\sigma')\varphi,$$

$$\|E(\sigma)f\|^2 = (E(\sigma)f, f) = \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(E(\sigma')\varphi, f) =$$

$$= \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(E(\sigma')f, \varphi) =$$

$$= \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d\left(\int_0^{\sigma'} \frac{1 - e^{-2\pi i \sigma''}}{-2i} d(E(\sigma'')\varphi, \varphi) \right) =$$

$$= \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} \cdot \frac{1 - e^{-2\pi i \sigma'}}{-2i} d(E(\sigma')\varphi, \varphi) =$$

$$= \int_0^\sigma \frac{(1 - e^{2\pi i \sigma'})(1 - e^{-2\pi i \sigma'})}{4} d(\|E(\sigma')\varphi\|^2) =$$

$$= \int_0^\sigma \sin^2(\pi\sigma') d(\|E(\sigma')\varphi\|^2),$$

így az \bar{S}_3 -ban szereplő integrál:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\|F(\lambda)f\|^2 &= \int_0^1 \operatorname{ctg}^2(\pi\sigma) d\|E(\sigma)f\|^2 = \\ &= \int_0^1 \operatorname{ctg}^2(\pi\sigma) d\left(\int_0^\sigma \sin^2(\pi\sigma') d\|E(\sigma')\varphi\|^2\right) = \\ &= \int_0^1 \operatorname{ctg}^2(\pi\sigma) \cdot \sin^2(\pi\sigma) d\|E(\sigma)\varphi\|^2 = \\ &= \int_0^1 \cos^2(\pi\sigma) d\|E(\sigma)\varphi\|^2. \end{aligned}$$

Ennek értéke azonban véges, hiszen a kifejezésnek az

$$\int_0^1 d\|E(\sigma)\varphi\|^2 = \|\varphi\|^2$$

abszolút majoránsa. Továbbá:

$$\begin{aligned} Af &= \frac{1}{2}(\varphi + U\varphi) = \frac{1}{2}\left(\varphi + \int_0^1 e^{2\pi i\sigma} dE(\sigma)\varphi\right) = \\ &= \int_0^1 \frac{1 + e^{2\pi i\sigma}}{2} dE(\sigma)\varphi = \int_0^1 -i \frac{e^{2\pi i\sigma} + 1}{e^{2\pi i\sigma} - 1} \frac{1 - e^{2\pi i\sigma}}{2i} dE(\sigma)\varphi = \\ &= \int_0^1 -\operatorname{ctg}(\pi\sigma) d\left(\int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i\sigma'}}{2i} dE(\sigma')\varphi\right) = \\ &= \int_0^1 -\operatorname{ctg}(\pi\sigma) dE(\sigma)f = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dF(\lambda)f, \end{aligned}$$

vagyis \bar{S}_3 . második összefüggése is teljesül. Ily módon A mindenesetre azon operátor kiterjesztése, amely \bar{S}_3 . alapján $F(\lambda)$ -hoz tartozik. Ez az operátor azonban (amint azt megmutatjuk majd) maximális, tehát A -nak meg kell egyeznie vele.¹⁰³

Fordítva: kérdés, hogy ha $F(\lambda)$ az $\bar{S}_1 - \bar{S}_3$. szerint A -hoz tartozik, akkor mit mondhatunk U -ról. Határozzuk meg először $E(\sigma)$ -t C . alapján. Így \bar{S}_1 , \bar{S}_2 . teljesülni fog. Legyen φ tetszőleges; ekkor ismét szimbolikusan írható, hogy

$$f = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\lambda + i} dF(\lambda)\varphi = \int_0^1 \frac{1}{-\operatorname{ctg}(\pi\sigma) + i} dE(\sigma)\varphi = \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i\sigma}}{2i} dE(\sigma)\varphi,$$

tekintve, hogy mind $\frac{1}{\lambda+i}$, mind pedig $\frac{1-e^{2\pi i\sigma}}{2i}$ korlátos, minden konvergál. Így

$$\begin{aligned}
 F(\lambda)f = E(\sigma)f &= \int_0^1 \frac{1-e^{2\pi i\sigma}}{2i} d(E(\sigma)E(\sigma')\varphi) = \\
 &= \int_0^1 \frac{1-e^{2\pi i\sigma'}}{2i} d(E(\text{Min}(\sigma, \sigma')\varphi)) = \int_0^\sigma \frac{1-e^{2\pi i\sigma'}}{2i} dE(\sigma')\varphi, \\
 Af &= \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dF(\lambda)f = \int_0^1 -\text{ctg}(\pi\sigma) dE(\sigma)f = \\
 &= \int_0^1 -i \frac{e^{2\pi i\sigma} + 1}{e^{2\pi i\sigma} - 1} d\left(\int_0^\sigma \frac{1-e^{2\pi i\sigma'}}{2i} dE(\sigma')\varphi\right) = \\
 &= \int_0^1 -i \frac{e^{2\pi i\sigma} + 1}{e^{2\pi i\sigma} - 1} \cdot \frac{1-e^{2\pi i\sigma}}{2i} dE(\sigma)\varphi = \\
 &= \int_0^1 \frac{1+e^{2\pi i\sigma}}{2} dE(\sigma)\varphi,
 \end{aligned}$$

tehát

$$Af + if = \int_0^1 dE(\sigma)\varphi = \varphi, \quad Af - if = \int_0^1 e^{2\pi i\sigma} dE(\sigma)\varphi.$$

Következésképpen tetszőleges φ -re $U\varphi$ értelmezve van és $\int_0^1 e^{2\pi i\sigma} dE(\sigma)\varphi$ -vel egyenlő.

Tetszőleges ψ -vel skalár szorzatot képezve és a komplex konjugáltat véve kapjuk, hogy

$$U^*\psi = \int_0^1 e^{-2\pi i\sigma} dE(\sigma)\psi.$$

A II. 8. fejezetben az utolsó levezetés alapján $U^*U = UU^* = 1$ vagyis U unitér és a hozzá tartozó egységfelbontás $E(\sigma)$.

Az tehát, hogy A sajátérték-feladata megoldható, egyenértékű azzal, hogy A -nak U Cayley-transzformáltja unitér, és az egyértelműséget is megállapítottuk. A kérdés tehát az, hogy képezhető-e mindig U , és hogy ez unitér lesz-e? Ezt eldöntendő, induljunk ki ismét zárt, hermitikus A operátorból.

Az U -t a következőképpen értelmeztük: amennyiben $\varphi = Af + if$ — és csak ekkor — $U\varphi$ meg van határozva és $(Af - if)$ -fel egyenlő. Meg kell azonban mutatni, hogy e meghatározás megengedett-e, vagyis, hogy egy φ -hez nem tartozhat-e több f . Más szóval be kell látni, hogy ha $Af + if = Ag + ig$, akkor $f = g$, illetőleg A lineáris volta miatt, hogy ha $Af + if = 0$, akkor $f = 0$. Ám

$$\begin{aligned} \|Af \pm if\|^2 &= (Af + if, Af \pm if) = \\ &= (Af, Af) \pm (if, Af) \pm (Af, if) + (if, if) = \\ &= \|Af\|^2 \pm i(Af, f) \mp i(Af, f) + \|f\|^2 = \|Af\|^2 + \|f\|^2. \end{aligned}$$

Így ha $Af + if = 0$, akkor $\|f\|^2 \leq \|Af + if\|^2 = 0$, $f = 0$ következik, s így meghatározásunk megengedett. Továbbá: $\|Af - if\| = \|Af + if\|$, vagyis $\|U\varphi\| = \|\varphi\|$, továbbá U folytonos, amennyiben értelmezve van. Legyen \mathfrak{E} az U értelmezési tartománya (tehát az $Af + if$ alakú elemek halmaza), \mathfrak{F} pedig U értékkészlete (ez az $U\varphi$ -k, tehát az $Af - if$ alakú elemek halmaza). Mivel mind A , mind pedig U lineáris, \mathfrak{E} és \mathfrak{F} lineáris sokaság. Az \mathfrak{E} és \mathfrak{F} még zárt is. Legyen ugyanis φ az \mathfrak{E} -nek, illetőleg \mathfrak{F} -nek határpontja. Ekkor létezik olyan $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sorozat \mathfrak{E} -ben, illetőleg \mathfrak{F} -ben, hogy $\varphi_n \rightarrow \varphi$, tehát létezik oly f_n , hogy $\varphi_n = Af_n \pm if_n$. Minthogy $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ konvergens, tehát teljesíti a *Cauchy*-konvergencia kritériumot. És mivel

$$\|f_m - f_n\|^2 \leq \|A(f_m - f_n) \pm i(f_m - f_n)\|^2 = \|\varphi_m - \varphi_n\|^2,$$

valamint

$$\begin{aligned} \|Af_m - Af_n\|^2 &= \|A(f_m - f_n)\|^2 \leq \\ &\leq \|A(f_m - f_n) \pm i(f_m - f_n)\|^2 = \|\varphi_m - \varphi_n\|^2, \end{aligned}$$

azért mind f_n , mind pedig Af_n is teljesíti ezt a kritériumot. Így (lásd D.-t a II. 1. fejezetben) mind f_1, f_2, \dots , mind pedig Af_1, Af_2, \dots konvergens: $f_m \rightarrow f$, $Af_m \rightarrow f^*$. Tekintve, hogy A zárt, Af értelmezve van és f^* -gal egyenlő. Következésképpen:

$$\varphi_n = Af_n \pm if_n \rightarrow f^* \pm if = Af \pm if, \quad \varphi_n \rightarrow \varphi,$$

így $\varphi = Af \pm if$, vagyis φ is \mathfrak{E} -hez, illetőleg \mathfrak{F} -hez tartozik.

Az U tehát az \mathfrak{E} zárt, lineáris sokaságon van értelmezve, és ezt az \mathfrak{F} zárt, lineáris sokaságra képezi le. Az U lineáris, és mivel

$$\|Uf - Ug\| = \|U(f - g)\| = \|f - g\|,$$

azért a távolságot változatlanul hagyja. Ekkor azt mondjuk, hogy U izometrikus. Ily módon, ha $f \neq g$, akkor $Uf \neq Ug$, tehát a leképezés kölcsönösen egyértelmű. Az is igaz, hogy $(f, g) = (Uf, Ug)$; ez ugyanúgy bizonyítható be, mint ahogyan az unitér operátorokra vonatkozó hasonló összefüggést a II. 5. fejezetben beláttuk. Az U tehát a skalárszorzatokat is változatlanul hagyja. Az U tehát akkor és csak akkor unitér, ha $\mathfrak{E} = \mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$.

Legyen A, B zárt, hermitikus operátor, U, V a megfelelő *Cayley*-transzformált, és a fenti halmazok legyenek $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}$, illetőleg $\mathfrak{G}, \mathfrak{H}$, ekkor rögvest látszik, hogy ha B az

A -nak valódi kiterjesztése, akkor V is valódi kiterjesztése U -nak. Ekkor \mathfrak{E} a \mathfrak{G} -nek és \mathfrak{F} a \mathfrak{H} -nak valódi részhalmaza, tehát $\mathfrak{E} \neq \mathfrak{R}_\infty$, $\mathfrak{F} \neq \mathfrak{R}_\infty$, vagyis U nem unitér, tehát A sajátérték-feladata megoldhatatlan. Így bebizonyítottuk a már többször idézett tételt: ha A sajátérték-feladata megoldható, akkor nem létezik A -nak valódi kiterjesztése, vagyis A maximális.

Tekintsük ismét az A zárt, hermitikus operátort, a hozzá tartozó U -t és az \mathfrak{E} , \mathfrak{F} halmazt. Ha Af értelmezve van, akkor $\varphi = Af + if$ esetén $U\varphi$ is értelmezve van és $U\varphi = Af - if$, ily módon $f = \frac{1}{2i}(\varphi - U\varphi)$, $Af = \frac{1}{2}(\varphi + U\varphi)$, vagyis ha $\psi = \frac{1}{2i}\varphi$, akkor $f = \psi - U\psi$, $Af = i(\psi + U\psi)$. Fordítva, ha $f = \psi - U\psi$, akkor Af biztosan értelmezve van: mivel $U\psi$ -nek van értelme, azért $\psi = Af' + if'$ (Af' -nek van értelme!) és $U\psi = Af' - if'$, tehát $f = \psi - U\psi = 2if'$. Így A értelmezési tartománya a $\psi - U\psi$ -k halmaza és ha $f = \psi - U\psi$, akkor $Af = i(\psi + U\psi)$. Következésképpen U az A -t is egyértelműen meghatározza (\mathfrak{E} -vel és \mathfrak{F} -fel együtt). Így az is világos, hogy a $\psi - U\psi$ -knek mindenütt sűrűn kell elhelyezkedniük (ezek alkotják ugyanis A értelmezési tartományát).

Induljunk most ki két zárt, lineáris sokaságból, \mathfrak{E} -ből és \mathfrak{F} -ből, és az \mathfrak{E} -t \mathfrak{F} -re leképező lineáris izometrikus U operátorból. Kérdés, létezik-e olyan A hermitikus operátor, amelynek U a Cayley-transzformáltja? Ehhez még azt is fel kell tételeznünk, hogy a $\psi - U\psi$ -k halmaza mindenütt sűrű. Kérdés, hogy az előzőek alapján megalkotható A meghatározása megengedett-e, hogy ez az A valóban hermitikus-e, és hogy U az A -nak Cayley-transzformáltja-e? Az első kérdésre a válasz igenlő, ha az $f = \varphi - U\varphi$ egyenletben f a φ -t egyértelműen meghatározza, tehát ha $\varphi = \psi$ a következménye a $\varphi - U\varphi = \psi - U\psi$ egyenletnek, vagy más szóval $\varphi - U\varphi = 0$ következtében $\varphi = 0$. Legyen tehát $\varphi - U\varphi = 0$, ekkor tetszőleges $g = \psi - U\psi$ esetében:

$$\begin{aligned}(\varphi, g) &= (\varphi, \psi) - (\varphi, U\psi) = (U\varphi, U\psi) - \\ &- (\varphi, U\psi) = (U\varphi - \varphi, U\psi) = 0,\end{aligned}$$

vagyis $\varphi = 0$, hiszen a g -k halmaza mindenütt sűrű.

Másodszor be kell bizonyítani, hogy $(Af, g) = (f, Ag)$, vagyis, hogy (Af, g) az f és g felcserélésekor a komplex konjugáltjába megy át. Legyen $f = \varphi - U\varphi$, $g = \psi - U\psi$, ekkor $Af = i(\varphi + U\varphi)$ és

$$\begin{aligned}(Af, g) &= (i(\varphi + U\varphi), \psi - U\psi) = \\ &= i(\varphi, \psi) + i(U\varphi, \psi) - i(\varphi, U\psi) - i(U\varphi, U\psi) = \\ &= i[(U\varphi, \psi) - \overline{(U\psi, \varphi)}] = i(U\varphi, \psi) + \overline{i(U\psi, \varphi)},\end{aligned}$$

így teljesül, amit f és g , tehát φ és ψ felcserélésekor megköveteltünk.

A harmadik kérdésre a választ a következőképpen adjuk meg. Legyen V az A -nak Cayley-transzformáltja; ennek értelmezési tartománya az

$$Af + if = i(\varphi + U\varphi) + i(\varphi - U\varphi) = 2i\varphi$$

alakú elemek halmaza, vagyis U értelmezési tartománya. E tartományban

$$V(2i\varphi) = V(Af + if) = Af - if =$$

$$= i(\varphi + U\varphi) - i(\varphi - U\varphi) = 2iU\varphi,$$

más szóval $V\varphi = U\varphi$, tehát $V = U$.

Ily módon a zárt hermitikus A operátorok egy-egyértelmű módon felelnek meg a lineáris izometrikus U -knak, eme utóbbiakra a $\varphi - U\varphi$ -k halmaza mindenütt sűrű; és az U -k az A -k Cayley-transzformáltjai.¹⁰⁴ Most már az A minden hermitikus B kiterjesztése jellemezhető; U -nak minden V izometrikus kiterjesztése nehézség nélkül felkutatható (a $\varphi - V\varphi$ -k halmaza magától értődően mindenütt sűrű, hiszen ennek részalmazát alkotja a $\varphi - U\varphi$ -k mindenütt sűrű halmaza). Ha A maximális, akkor U -nak is annak kell lennie, és fordítva. Ha U nem maximális, akkor $\mathfrak{E} \neq \mathfrak{R}_\infty$ és $\mathfrak{F} \neq \mathfrak{R}_\infty$, és fordítva, ez utóbbi összefüggésekből következik, hogy U nem maximális. Valóban, ekkor $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E} \neq 0$, $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F} \neq 0$, ezért van $\mathfrak{R} - \mathfrak{E}$ -nek és $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F}$ -nek $\varphi_0 \neq 0$, illetőleg $\psi_0 \neq 0$ eleme és a

$$\frac{\varphi_0}{\|\varphi_0\|}, \quad \frac{\psi_0}{\|\psi_0\|}$$

normálással elérhető, hogy $\|\psi_0\| = \|\varphi_0\| = 1$ legyen. Az $[\mathfrak{E}, \varphi_0]$ -ban most következőképpen definiáljuk a V operátort, ha $f = \varphi + a\varphi_0$, akkor $Vf = U\varphi + a\psi_0$. Világos, hogy V lineáris, és tekintve, hogy φ ortogonális φ_0 -ra és $U\varphi$ pedig ψ_0 -ra, azért $\|f\|^2 = \|\varphi\|^2 + |a|^2$ és $\|Vf\|^2 = \|U\varphi\|^2 + |\psi_0|^2 = \|\varphi\|^2 + |a|^2$, tehát $\|Vf\| = \|f\|$, vagyis V izometrikus. Végül pedig V az U -nak valódi kiterjesztése. Következésképpen maximális A -ra jellemző, hogy $\mathfrak{E} = \mathfrak{R}_\infty$, vagy $\mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$.

Másrészt, ha A nem maximális, akkor az $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E}$, $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F}$ zárt lineáris sokaságok nemcsak az \mathfrak{R}_∞ 0 elemét tartalmazzák. Legyen az ezeket kifeszítő ortonormált rendszer $\varphi_1, \dots, \varphi_p$, illetőleg ψ_1, \dots, ψ_q (ha p vagy q végtelen, akkor a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, illetőleg a ψ_1, ψ_2, \dots sorozatnak nem szakad vége; lásd a 9. Tételt a II. 2. fejezetben). Legyen $r = \text{Min}(p, q)$, ekkor V -t az $[\mathfrak{E}, \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_r]$ -ben a következőképpen határozzuk meg: ha

$$f = \varphi + \sum_{v=1}^r a_v \varphi_v$$

(ahol φ az \mathfrak{E} eleme, a_1, \dots, a_r pedig számok), akkor legyen

$$Vf = V\varphi + \sum_{v=1}^r a_v \psi_v.$$

Könnyen belátható, hogy V lineáris, izometrikus és hogy U -nak valódi kiterjesztése. A V értelmezési tartománya $[\mathfrak{E}, \varphi_1, \dots, \varphi_r]$, és ha $r = p$, akkor $[\mathfrak{E}, \varphi_1, \dots, \varphi_r] = [\mathfrak{E}, \mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E}] = \mathfrak{R}_\infty$; értékészlete $[\mathfrak{E}, \psi_1, \dots, \psi_r]$, és ha $r = q$, akkor

$[\mathfrak{E}, \psi_1, \dots, \psi_r] = [\mathfrak{F}, \mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F}] = \mathfrak{R}_\infty$. Ezek közül az egyik tehát biztosan \mathfrak{R}_∞ -nel egyenlő. Legyen V a B hermitikus operátor Cayley-transzformáltja. Meggondolásaink értelmében B az A -nak kiterjesztése és maximális. Megfigyelhető, hogy a φ -k és ψ -k végtelen sokféleképpen választhatók meg (például ψ_1 helyett $\mathfrak{D}\psi_1$ is választható, ha $|\vartheta| = 1$). Ily módon V , tehát B is végtelen sokféleképpen választható meg.

A sajátérték-feladat vizsgálatában tehát a következő eredményre jutottunk: ha a feladat megoldható, akkor csak egyetlen megoldás van, azonban a nem maximális operátorok esetében biztosan nem oldható meg. Nem maximális operátor mindig végtelen sokféleképpen terjeszthető ki maximális operátorra (kizárólag hermitikus operátorokról van szó). A maximalitás feltétele azonban nem pontosan azonos a sajátérték-feladat megoldhatóságának feltételével. Az előző azzal egyenértékű, hogy vagy $\mathfrak{E} = \mathfrak{R}_\infty$, vagy pedig $\mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$, az utóbbi pedig azzal, hogy $\mathfrak{E} = \mathfrak{R}_\infty$ és $\mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$.

Nem vizsgáljuk meg részletesen azokat az operátorokat, amelyekre az első eset teljesül, a második pedig nem. Ezekre az operátorokra a sajátérték-feladat nem oldható meg, és mivel nem létezik valódi kiterjesztésük (maximális voltuk miatt), nincs további tennivalónk velük; ezekre vagy $\mathfrak{E} = \mathfrak{R}_\infty$ és $\mathfrak{F} \neq \mathfrak{R}_\infty$, vagy pedig $\mathfrak{E} \neq \mathfrak{R}_\infty$ és $\mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$. Ilyen operátorok valóban léteznek és az összes két egyszerű normál alakból kiindulva képezhető, így kivételes eseteknek tekinthetők az olyan maximális operátorokkal összevetve, amelyekre a sajátérték-feladat megoldható. E tárgyról az olvasó további részleteket találhat a szerzőnek a 95. jegyzetben megemlített művében. Mindenesetre az ilyen operátorokat a kvantummechanika jelenlegi keretei közül ki kell zárni. Ennek az az oka, hogy a hermitikus operátorokhoz tartozó egységfelbontás (amint azt a továbbiakban látjuk majd) olyan alapvető szerepet játszik minden kvantummechanikai fogalomalkotásban, hogy létezésétől, vagyis a sajátérték-feladat megoldhatóságától nem tekinthetünk el.¹⁰⁵ Ennek alapján tehát csak olyan hermitikus operátorokat engedünk meg, amelyekre a sajátérték-feladat megoldható. Tekintve, hogy ez a tulajdonság a maximalitás élesítése, azért az ilyen operátorokat hipermaximális operátoroknak fogjuk nevezni.¹⁰⁶

Befejezőként a (zárt) hermitikus operátorok két olyan családjáról kell említést tennünk, amelyek biztosan hipermaximálisak. Először is ilyenek a folytonos operátorok, ezek mindenütt értelmezve vannak, tehát maximálisak és tekintve, hogy HILBERT szerint sajátérték-feladatuk megoldható (lásd a 70. jegyzet hivatkozását), egyúttal hipermaximálisak. Másodszor ilyenek a valós operátorok \mathfrak{R}_∞ valamely megvalósításában, ha ezek maximálisak. Az \mathfrak{E} és \mathfrak{F} meghatározásában az egyetlen különbség i előjelében van, amelynek — ha minden más valós — nincs jelentősége. Így $\mathfrak{E} = \mathfrak{R}_\infty$ következtében $\mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$ és fordítva, tehát a hipermaximalitás a maximalitás következménye. Ha a maximalitást nem kötjük ki, akkor is állíthatjuk, hogy $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E}$ és $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F}$ egyenlő dimenziójúak. Így (a kiterjesztési összefüggések vizsgálatakor alkalmazott jelölésekkel) $p = q$, tehát $p = q = r$, és

$$[\mathfrak{E}, \varphi_1, \dots, \varphi_r] = [\mathfrak{E}, \mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E}] = \mathfrak{R}_\infty,$$

$$[\mathfrak{F}, \psi_1, \dots, \psi_r] = [\mathfrak{F}, \mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F}] = \mathfrak{R}_\infty,$$

vagyis ilyenkor a korábban kapott kiterjesztések hipermaximálisak. Így a valós operátoroknak létezik hipermaximális kiterjesztése. A 95. jegyzetben szereplő hivatkozásban az is be van bizonyítva, hogy ugyanez érvényes a definit operátorokra is.

10. Felcserélhető operátorok

Az R és S operátor akkor cserélhető fel egymással, ha $RS = SR$ (lásd a meghatározást a II. 4. fejezetben) és — amennyiben R és S nincs mindenütt értelmezve — ha a két oldal értelmezési tartománya megegyezik. Korlátozzuk figyelmünket hermitikus operátorokra és, hogy az értelmezési tartományokkal kapcsolatos nehézségeket elkerüljük, tekintsünk mindenütt értelmezett, tehát folytonos operátorokat. Legyen $E(\lambda)$ és $F(\lambda)$ az R -hez, illetőleg az S -hez tartozó egységfelbontás.

Az R és S felcserélhetősége azt jelenti, hogy $(RSf, g) = (SRf, g)$ minden f -re és g -re, vagyis $(Sf, Rg) = (Rf, Sg)$. Ha R és S felcserélhetőek, akkor R^n és S ($n = 1, 2, \dots$) továbbá $p(R)$ és S is felcserélhető egymással ($p(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$).

Szimbolikusan:

$$R = \int_{-C}^C \lambda dE(\lambda), \quad s(R) = \int_{-C}^C s(\lambda) dE(\lambda)$$

[itt C az R folytonos operátorra a II. 9. fejezetben bevezetett és ott A -nak nevezett állandó; $s(x)$ pedig tetszőleges függvény, lásd a II. 8. fejezetet és a 94. jegyzetet]. Ha $s(x)$ polinóm, akkor

$$(s(R)f, Sg) = (Sf, s(R)g),$$

tehát

$$* \quad \int_{-C}^C s(\lambda) d(E(\lambda)f, Sg) = \int_{-C}^C s(\lambda) d(Sf, E(\lambda)g).$$

Tekintve, hogy minden folytonos függvény tetszőleges pontossággal ($-C \leq x \leq C$ -ben egyenletesen) közelíthető polinómokkal, a * folytonos függvényekre is érvényes. Legyen

$$s(x) = \begin{cases} \lambda_0 - x, & \text{ha } x \leq \lambda_0, \\ 0, & \text{ha } x \geq \lambda_0, \end{cases}$$

akkor * szerint

$$\int_{-C}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(E(\lambda)f, Sg) = \int_{-C}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(Sf, E(\lambda)g).$$

Ha λ_0 helyébe $\lambda_0 + \varepsilon$ -t írunk, akkor kivonás és az ε -nal történő osztás után azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & \int_{-C}^{\lambda_0} d(E(\lambda)f, Sg) + \int_{\lambda_0}^{\lambda_0 + \varepsilon} \frac{\lambda - \lambda_0}{\varepsilon} d(E(\lambda)f, Sg) = \\ & = \int_{-C}^{\lambda_0} d(Sf, E(\lambda)g) + \int_{\lambda_0}^{\lambda_0 + \varepsilon} \frac{\lambda - \lambda_0}{\varepsilon} d(Sf, E(\lambda)g), \end{aligned}$$

és, ha $\varepsilon \rightarrow 0$ (emlékezzünk \bar{S}_1 -ra!):

$$\int_{-C}^{\lambda_0} d(E(\lambda)f, Sg) = \int_{-C}^{\lambda_0} d(Sf, E(\lambda)g),$$

$$(E(\lambda_0)f, Sg) = (Sf, E(\lambda_0)g).$$

Következésképpen $-C \leq \lambda_0 \leq C$ esetén minden $E(\lambda_0)$ felcserélhető S -sel, ez azonban a többi $E(\lambda_0)$ -ra még inkább igaz, hiszen ha $\lambda_0 < -C$, akkor $E(\lambda_0) = 0$, ha pedig $\lambda_0 > C$, akkor $E(\lambda_0) = 1$.

Így, ha R felcserélhető S -sel, akkor valamennyi $E(\lambda_0)$ is felcserélhető vele. Fordítva, ha minden $E(\lambda_0)$ felcserélhető S -sel, akkor * minden $s(x)$ függvényre érvényes, következésképpen minden $s(R)$ felcserélhető S -sel. Végeredményben tehát R akkor és csakis akkor cserélhető fel S -sel, ha valamennyi $E(\lambda)$ felcserélhető vele, s ekkor R valamennyi $s(R)$ függvénye is felcserélhető S -sel.

Az $E(\lambda)$ viszont akkor és csak akkor cserélhető fel S -sel, ha felcserélhető valamennyi $F(\mu)$ -vel [tételünket R és S helyett S -re és $E(\lambda)$ -ra alkalmaztuk]. Ily módon kapjuk, hogy R és S akkor cserélhető fel egymással, ha valamennyi $E(\lambda)$ valamennyi $F(\mu)$ -vel felcserélhető. Továbbá, mivel $r(R)$ és S felcserélhetősége R és S felcserélhetőségének következménye, R -et és S -et $s(S)$ -sel és $r(R)$ -rel helyettesítve azt kapjuk, hogy $r(R)$ és $s(S)$ is felcserélhetőek egymással.

Ha az R és S operátor folytonosságát nem kötjük ki, akkor az RS és SR értelmezési tartománya lényeges bonyodalmat okozhat. Az $R \cdot 0$ például mindig értelmezve van [$0f = 0$, $R \cdot 0f = R(0f) = R \cdot 0 = 0$], míg $0 \cdot R$ csak R értelmezési tartományában van meghatározva. Így ha R -nek nincs mindenütt értelme, $R \cdot 0 \neq 0 \cdot R$ az értelmezési tartományok különböző volta miatt, más szóval szigorúan véve R és 0 nem cserélhetőek fel egymással. Ez a továbbiak szempontjából nem kielégítő: a 0 -nak nemcsak minden folytonos hermitikus operátorral, hanem valamennyi hermitikus operátorral felcserélhetőnek kellene lennie.¹⁰⁷ Ezért a nemfolytonos R, S operátorok felcserélhetőségét másként szándékozunk definiálni. Figyelmünket hipermaximális operátorokra korlátozzuk, mivel a II. 9. fejezet alapján csupán ezek érdekelnek bennünket. Az R -et és S -et akkor tekintjük felcserélhetőnek, ha valamennyi $E(\lambda)$ valamennyi $F(\mu)$ -vel (vagyis a megfelelő egységfelbontások) felcserélhető a régi értelemben. Folytonos R és S esetében az új

meghatározás, amint láttuk, megegyezik a régivel, míg ha R vagy S (vagy mindkettő) nemfolytonos, akkor a két definíció különbözhet. Az R és 0 az utóbbi esetre példa; a régi értelemben ezek nem felcserélhetők, míg az újban igen, mert a 0 -ra minden $F(\mu)$ vagy 0 vagy 1 ,¹⁰⁸ s így valamennyi $F(\mu)$ felcserélhető valamennyi $E(\lambda)$ -val.

Korábban bebizonyítottuk, hogy ha R, S felcserélhető (folytonos) hermitikus operátorok, akkor R -nek minden $r(R)$ függvénye felcserélhető S -nek minden $s(S)$ függvényével. Az $R=S$ esetében azt kapjuk tehát, hogy $r(R)$ és $s(R)$ mindig felcserélhető egymással [ez a II. 8. fejezet végén található szorzási képletből is következik: $r(R) \cdot s(R) = t(R)$, ha $r(x) \cdot s(x) = t(x)$]. Ha $r(x)$ és $s(x)$ valós függvény, akkor $r(R)$ és $s(R)$ hermitikus [a II. 8. fejezet szerint, ha $r(x)$ valós, akkor $(r(R))^* = \bar{r}(R) = r(R)$].

Az előzőek fordítottja is igaz. Ha A, B felcserélhető hermitikus operátor, akkor létezik olyan R hermitikus operátor, amelynek A és B függvénye: $A = r(R)$, $B = s(R)$. Sőt még több is igaz: ha A, B, C, \dots hermitikus operátorok véges vagy végtelen felcserélhető rendszere, akkor létezik olyan R hermitikus operátor, amelynek A, B, C, \dots valamennyien a függvényei. E tételnek nem adjuk meg a bizonyítását, csupán a tárggyal kapcsolatos irodalomra hivatkozunk.¹⁰⁹ Nekünk e tételre csak véges számú, tisztán diszkrét spektrumú A, B, C, \dots operátor esetén lesz szükségünk. Erre az esetre az alábbiakban megadjuk a bizonyítást, az általános esetre nézve csak néhány megjegyzést teszünk.

Legyen tehát A, B, C, \dots véges számú, tisztán diszkrét spektrumú hermitikus operátor. Legyen λ tetszőleges szám és jelölje \mathcal{Q}_λ az $Af = \lambda f$ egyenlet megoldásai által kifeszített zárt lineáris sokaságot és legyen ennek projektora E_λ . A λ tehát akkor és csak akkor diszkrét sajátértéke A -nak, ha létezik $f \neq 0$ megoldás, vagyis ha $\mathcal{Q}_\lambda \neq 0$, illetőleg ha $E_\lambda \neq 0$. Ugyanígy képezzük a B -hez tartozó \mathfrak{M}_λ -t és F_λ -t, a C -hez tartozó \mathfrak{N}_λ -t és G_λ -t, stb. Az $Af = \lambda f$ folytán $ABf = BAf = B(\lambda f) = \lambda(Bf)$, tehát f -fel együtt Bf is \mathcal{Q}_λ eleme. Tekintve, hogy $E_\lambda f \in \mathcal{Q}_\lambda$ -hoz tartozik, $BE_\lambda f$ is \mathcal{Q}_λ eleme, tehát $E_\lambda BE_\lambda f = BE_\lambda f$. Ez azonosan igaz, tehát $E_\lambda BE_\lambda = BE_\lambda$. A $*$ alkalmazásával viszont $E_\lambda BE_\lambda = E_\lambda B$, tehát $E_\lambda B = BE_\lambda$. Ahogy A és B felcserélhetőségéből levezettük B és E_λ felcserélhetőségét, ugyanúgy ez utóbbiból következik E_λ és F_μ felcserélhetősége. Az A és B semmiképpen nem különböztethető meg a többi hermitikus operátortól, így állíthatjuk, hogy az összes $E_\lambda, F_\mu, G_\nu, \dots$ mind felcserélhető egymással. Következésképpen a $K(\lambda\mu\nu \dots) = E_\lambda F_\mu G_\nu \dots$ operátor is projektor. Legyen az ehhez tartozó zárt, lineáris sokaság $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots)$. A II. 4. fejezet 14. Tétele értelmében $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots)$ az $\mathcal{Q}_\lambda, \mathfrak{M}_\mu, \mathfrak{N}_\nu, \dots$ közös része, tehát az

$$Af = \lambda f, \quad Bf = \mu f, \quad Cf = \nu f, \dots$$

egyenletek közös megoldásainak zárt lineáris sokasága.

Legyen λ, μ, ν, \dots és $\lambda', \mu', \nu', \dots$ két különböző számkészlet, tehát vagy $\lambda \neq \lambda'$, vagy $\mu \neq \mu'$, vagy $\nu \neq \nu'$ és így tovább. Ha f a $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots)$ -nek, f' pedig a $\mathfrak{R}(\lambda'\mu'\nu' \dots)$ -nek eleme, akkor f ortogonális f' -re; ugyanis, ha $\lambda \neq \lambda'$, akkor $Af = \lambda f$ az $Af' = \lambda' f'$ miatt, ha $\mu \neq \mu'$, akkor $Bf = \mu f$ a $Bf' = \mu' f'$ miatt, és így tovább. Így $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots)$ ortogonális $\mathfrak{R}(\lambda'\mu'\nu' \dots)$ -re.

Tekintve, hogy A spektruma tisztán diszkrét, az \mathfrak{Q}_λ -k kifeszítik \mathfrak{R}_∞ -t (mint zárt, lineáris sokaságot). Így valamely $f \neq 0$ nem lehet az összes \mathfrak{Q}_λ -ra ortogonális, vagyis legalább az egyik \mathfrak{Q}_λ -ba eső vetülete nem zérus, tehát $E_\lambda f \neq 0$. Ugyanígy léteznie kell olyan μ -nek, hogy $F_\mu f \neq 0$, olyan ν -nek, hogy $G_\nu f \neq 0$, és így tovább. Következésképpen bármely $f \neq 0$ -hoz található először is olyan λ , hogy $E_\lambda f \neq 0$, azután olyan μ , hogy $F_\mu(E_\lambda f) \neq 0$, azután olyan ν , hogy $G_\nu(F_\mu(E_\lambda f)) \neq 0$ és így tovább. Végül tehát $\dots G_\nu F_\mu E_\lambda f \neq 0$, $E_\lambda F_\mu G_\nu \dots f \neq 0$ tehát $K(\lambda\mu\nu \dots) f \neq 0$, így f nem ortogonális $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots)$ -re. Következésképpen a $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots)$ -k kifeszítik \mathfrak{R}_∞ -t mint zárt lineáris sokaságot.

Legyen $\varphi_{(\lambda\mu\nu \dots)}^{(1)}, \varphi_{(\lambda\mu\nu \dots)}^{(2)}, \dots$ a $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots)$ zárt, lineáris sokaságot kifeszítő ortonormált rendszer. (E sorozatnak vagy vége szakad, vagy nem, attól függően, hogy $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots)$ véges vagy végtelen dimenziós, ha pedig $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots) = 0$, akkor csak 0 tagokból áll.) Bármely $\varphi_{(\lambda\mu\nu \dots)}^{(n)}$, valamelyik $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots)$ eleme, így egyszerre sajátfüggvénye az A, B, C, \dots operátoroknak. Két különböző $\varphi_{(\lambda\mu\nu \dots)}^{(n)}$ ortogonális egymásra; ha ugyanis λ, μ, ν, \dots készletük megegyezik, akkor ez a definíciójukból következik, ha pedig különbözik, akkor azért, mert különböző $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots)$ -höz tartoznak. Az összes $\varphi_{(\lambda\mu\nu \dots)}^{(n)}$ ugyanazt a zárt lineáris sokaságot feszíti ki, mint az összes $\mathfrak{R}(\lambda\mu\nu \dots)$, vagyis \mathfrak{R}_∞ -t.

Teljes ortonormált rendszert alkottunk tehát A, B, C, \dots közös sajátfüggvényeiből. Legyen ez a rendszer átjelölve ψ_1, ψ_2, \dots és írjuk fel a megfelelő sajátérték egyenleteket:

$$A\psi_m = \lambda_m \psi_m, \quad B\psi_m = \mu_m \psi_m, \quad C\psi_m = \nu_m \psi_m \dots$$

Készítsünk el egy páronként különböző számokból álló, tetszőleges $\kappa_1, \kappa_2, \dots$ sorozatot és alkossunk olyan $\kappa_1, \kappa_2, \dots$ tiszta diszkrét spektrumú hermitikus R operátort, amelynek a megfelelő sajátfüggvényei ψ_1, ψ_2, \dots :

$$R\left(\sum_{m=1}^{\infty} x_m \psi_m\right) = \sum_{m=1}^{\infty} x_m \kappa_m \psi_m. \quad (110)$$

Legyen $F(\kappa)$ a $-\infty < \kappa < +\infty$ intervallumban definiált olyan függvény, amelyre $F(\kappa_m) = \lambda_m$ [más κ pontokban $F(\kappa)$ tetszőleges]. Ehhez hasonlóan $G(\kappa)$ legyen olyan függvény, amelyre $G(\kappa_m) = \mu_m$, $H(\kappa)$ olyan, amelyre $H(\kappa_m) = \nu_m$, és így tovább. Megmutatjuk, hogy

$$A = F(R), \quad B = G(R), \quad C = H(R), \dots$$

Meg kell tehát mutatnunk, hogy ha $\kappa_1, \kappa_2, \dots$ az R -nek tisztán diszkrét spektruma és a megfelelő sajátfüggvények ψ_1, ψ_2, \dots , akkor $F(R)$ az $F(\kappa_1), F(\kappa_2), \dots$ tisztán diszkrét spektrummal rendelkezik, és a megfelelő sajátfüggvényei ugyanazok, nevezetesen ψ_1, ψ_2, \dots . Mivel e függvények teljes ortonormált rendszert alkotnak, azért elegendő megmutatni, hogy $F(R)\psi_m = F(\kappa_m) \cdot \psi_m$.

Legyen $E(\lambda) = \sum_{\kappa_m \leq \lambda} P_{[\psi_m]}$ az R -hez tartozó egységfelbontás (lásd a II. 8. fejezetet). Ekkor szimbolikusan

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

és definíció szerint

$$F(R) = \int F(\lambda) dE(\lambda).$$

Továbbá:

$$E(\lambda)\psi_m = \begin{cases} \psi_m & \text{ha, } \kappa_m \leq \lambda, \\ 0 & \text{ha, } \kappa_m > \lambda. \end{cases}$$

Ebből következik, hogy

$$(F(R)\psi_m, g) = \int F(\lambda) d(E(\lambda)\psi_m, g) = F(\kappa_m) \cdot (\psi_m, g),$$

minden g -re, tehát valóban $F(R)\psi_m = F(\kappa_m) \cdot \psi_m$.

Ezzel állításunkat a tisztán diszkrét spektrumok esetére beláttuk. A folytonos spektrumok esetében meg kell elégednünk a 109. jegyzet hivatkozásával. Megemlítünk azonban itt egy különösen jellegzetes esetet.

Legyen \mathfrak{R}_∞ a $0 \leq q_1, q_2 \leq 1$ négyzetben definiált ama $f(q_1, q_2)$ függvények tere, amelyekre az $\iint |f(q_1, q_2)|^2 dq_1 dq_2$ véges. Képezzük az $A = q_1, \dots, B = q_2, \dots$ operátorokat. Ezek a fenti q_1, q_2 tartományban hermitikusak, folytonosak (a $-\infty < q_1, q_2 < +\infty$ -ben nem!) és felcserélhetők egymással. Mindkettő tehát valamely R függvénye. Következésképpen R felcserélhető A -val és B -vel, amiből következik (bár ezt itt nem bizonyítjuk be), hogy $R s(q_1, q_2)$ alakú $[s(q_1, q_2)$ korlátos függvény]. Következésképpen R^n ($n=0, 1, 2, \dots$) $(s(q_1, q_2))^n$ -nel egyenlő és $F(R)$ pedig $F(s(q_1, q_2))$ -vel egyenlő, ha $F(\kappa)$ polinóm. Ez a képlet azonban minden $F(\kappa)$ -ra kiterjeszthető, amit itt nem taglalunk részletesen. Minthogy, $F(R) = A$ és $G(R) = B$,

$$F(s(q_1, q_2)) = q_1, \quad G(s(q_1, q_2)) = q_2. \quad .^{111}$$

Más szóval az $s(q_1, q_2) = \kappa$ és $F(\kappa) = q_1, G(\kappa) = q_2$ leképezések (ezek egymásnak inverzei) a $0 \leq q_1, q_2 \leq 1$ négyzetet egy-egyértelműen képezik le a κ számokra; az ilyesmi a közönséges geometriai szemlélettel ellenkezik.

Az előbb említett bizonyítás alapján azonban tudjuk, hogy ez lehetséges, és valóban ilyen leképezés megvalósítható az úgynevezett *Peano-görbével*.¹¹² A 109. jegyzetben megemlített bizonyításban alkalmazott szigorú meg gondolás valóban azt mutatja, hogy esetünkben is a *Peano-görbéhez*, vagy közeli rokonságban levő konstrukcióhoz jutunk el.

11. A spur

Az operátorok néhány fontos invariánsát definiáljuk most.

Az $\mathfrak{R}_n \{a_{\mu\nu}\}$ mátrixának $\sum_{\mu=1}^n a_{\mu\mu}$ spurja ilyen invariáns. Ez unitér invariáns, vagyis nem változik meg, ha $\{a_{\mu\nu}\}$ -t másik (ugyancsak *Descartes-féle*) koordináta-rendszerbe transzformáljuk át.¹¹³ Az $\{a_{\mu\nu}\}$ mátrixot a megfelelő

$$A\{x_1, \dots, x_n\} = \{y_1, \dots, y_n\}, \quad y_\mu = \sum_{\nu=1}^n a_{\mu\nu} x_\nu$$

operátorral felírva az $a_{\mu\nu}$ -k az A segítségével a következőképpen fejezhetők ki:

$$a_{\mu\nu} = (A\varphi_\nu, \varphi_\mu)$$

és a

$$\varphi_1 = \{1, 0, \dots, 0\}, \quad \varphi_2 = \{0, 1, \dots, 0\}, \dots, \quad \varphi_n = \{0, 0, \dots, 1\}$$

ortonormált rendszert alkot (lásd a II. 5. fejezetet és a 60. jegyzetet). Így a spur $\sum_{\mu=1}^n (A\varphi_\mu, \varphi_\mu)$, amelynek unitér invarianciája annyit jelent, hogy értéke akármilyen ortonormált rendszerben ugyanaz.

E fogalom analógiája \mathfrak{R}_∞ -ben kézenfekvő. Legyen A lineáris operátor, és tekintsünk olyan $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszert, amelyre valamennyi $A\varphi_\mu$ -nek van értelme (ilyen biztosan van, ha A értelmezési tartománya mindenütt sűrű, hiszen elegendő a mindenütt sűrű f_1, f_2, \dots sorozatot ortogonalizálni a II. 2. fejezet 8. Tétéle alapján), A spurja ekkor

$$\text{Sp } A = \sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \varphi_\mu).$$

Meg kell mutatni, hogy ez valóban csak A -tól függ (és φ_μ -től független!).

Tekintsünk tehát két teljes ortonormált rendszert: $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ és legyen

$$\text{Sp}(A; \varphi, \psi) = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \psi_\nu) (\psi_\nu, \varphi_\mu).$$

A 7. Tétel γ) pontja (II. 2. fejezet) alapján ez $\sum_{\mu=1}^8 (A\varphi_\mu, \varphi_\mu)$ -vel egyenlő, tehát csupán látszólag függ a ψ_μ -ktől. Továbbá:

$$\begin{aligned} \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \psi_\nu) (\psi_\nu, \varphi_\mu) &= \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (\varphi_\mu, A^*\psi_\nu) (\psi_\nu, \varphi_\mu) = \\ &= \overline{\sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (A^*\psi_\nu, \varphi_\mu) (\varphi_\mu, \psi_\nu)}, \end{aligned}$$

vagyis $\text{Sp}(A; \varphi, \psi) = \overline{\text{Sp}(A^*; \psi, \varphi)}$. A jobb oldal azonban az előzőek szerint csupán látszólag függ a φ -ktől, s így ez a bal oldalra is igaz. Tehát a $\text{Sp}(A; \varphi, \psi)$ kifejezés valójában csak A -tól függ, a φ -ktől és a ψ -ktől a függés csupán látszólagos, így röviden így is jelölhetjük: $\text{Sp } A$. A $\text{Sp } A$ egyenlő $\sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \varphi_\mu)$ -vel, így a kívánt invarianciatulajdonságot bebizonyítottuk. Az utóbbi egyenlőségből az is következik, hogy $\text{Sp } A = \text{Sp } A^*$.

Nyilvánvalóan érvényesek a

$$\text{Sp}(aA) = a\text{Sp } A, \quad \text{Sp}(A \pm B) = \text{Sp } A \pm \text{Sp } B$$

összefüggések. Az is igaz, hogy

$$\text{Sp}(AB) = \text{Sp}(BA),$$

még akkor is, ha A és B egymással nem cserélhető fel. Ez a következőképpen látható be:

$$\begin{aligned} \text{Sp}(AB) &= \sum_{\mu=1}^{\infty} (AB\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu}) = \sum_{\mu=1}^{\infty} (B\varphi_{\mu}, A^*\varphi_{\mu}) = \\ &= \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (B\varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) (\psi_{\nu}, A^*\varphi_{\mu}) = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (B\varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) (A\psi_{\nu}, \varphi_{\mu}), \end{aligned}$$

amelyben $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ és ψ_1, ψ_2, \dots két tetszőleges teljes ortonormált rendszer, így a kifejezés szimmetriája A -ban és B -ben (a φ -k és a ψ -k egyidejű felcserélésével) nyilvánvaló. Hermitikus A és B operátorokra tehát

$$\text{Sp}(AB) = \overline{\text{Sp}[(AB)^*]} = \overline{\text{Sp}(B^*A^*)} = \overline{\text{Sp}(BA)} = \overline{\text{Sp}(AB)}.$$

Így $\text{Sp}(AB)$ valós. ($\text{Sp } A$ természetesen ugyancsak valós.)

Legyen \mathfrak{M} zárt lineáris sokaság és E ennek projektora. A $\text{Sp } E$ -vel kapcsolatban ezt mondhatjuk: legyen ψ_1, \dots, ψ_k a zárt lineáris \mathfrak{M} sokaságot kifeszítő ortonormált rendszer, χ_1, \dots, χ_l pedig feszítse ki az $\mathfrak{R}_{\infty} - \mathfrak{M}$ sokaságot (természetesen k és l közül legalább az egyik szükségképpen végtelen). Ekkor $\psi_1, \dots, \psi_k, \chi_1, \dots, \chi_l$ együtt \mathfrak{R}_{∞} -t feszíti ki, vagyis teljes ortonormált rendszert alkot (7. Tétel α), II. 2. fejezet). Így

$$\begin{aligned} \text{Sp } E &= \sum_{\mu=1}^k (E\psi_{\mu}, \psi_{\mu}) + \sum_{\mu=1}^l (E\chi_{\mu}, \chi_{\mu}) = \\ &= \sum_{\mu=1}^k (\psi_{\mu}, \psi_{\mu}) + \sum_{\mu=1}^l (0, \chi_{\mu}) = \sum_{\mu=1}^k 1 = k, \end{aligned}$$

tehát $\text{Sp } E$ az \mathfrak{M} sokaság dimenziójával egyenlő.

Ha A definit, akkor valamennyi $(A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu}) \geq 0$, tehát $\text{Sp } A \geq 0$. Ha ebben az esetben még $\text{Sp } A = 0$, akkor az összes $(A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu})$ eltűnik, tehát $A\varphi_{\mu} = 0$ (19. Tétel, II. 5. fejezet). Ha $\|\varphi\| = 1$, akkor található olyan ortonormált $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszer, amelyben $\varphi_1 = \varphi$. (Valóban, legyen f_1, f_2, \dots mindenütt sűrű. Ortogonalizáljuk a φ, f_1, f_2, \dots rendszert, így a II. 2. pont 7. Tételének bizonyítása alapján φ -vel kezdődő teljes ortonormált rendszert kapunk.) Így $A\varphi = 0$. Ha f tetszőleges, akkor $f=0$ esetén $Af = 0$, ha $f \neq 0$, akkor legyen

$$\varphi = \frac{1}{\|f\|} f,$$

s így $Af = 0$ ismét következik a fentiek alapján. Ily módon $A = 0$. Más szóval, ha A definit, akkor $\text{Sp } A > 0$.

A spurra vonatkozó megállapításaink egyszerű és tömör volta azonban matematikai pongyolaságot takar. Amikor például felírtuk a

$$\sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})(\psi_{\nu}, \varphi_{\mu})$$

és a

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu})$$

sorokat és ezeket egymásba átalakítottuk, akkor nem vizsgáltuk meg a konvergenciájukat. Röviden: elkövettük mindazt, amit szabályos matematikai eljárás során nem szabad elkövetni. Tény azonban, hogy ilyen jellegű pongyolaság az elméleti fizikában másutt is előfordul és jelen megfontolásaink nem vezetnek a kvantummechanikai alkalmazások során megrázó következményekhez. Mindazonáltal ne tévesszük szem elől, hogy most kissé gondatlanok voltunk.

Igen fontos tehát rámutatnunk arra, hogy a kvantummechanika alapvető statisztikai megállapításaiban csak AB alakú operátorok spurját kell venni; ezekben mind A -ról, mind pedig B -ről szigorúan bebizonyítható, hogy definit. E szakasz hátralévő részében a spurra vonatkozó ama tényeket gyűjtjük össze, amelyek kifogástalan matematikai szigorúságú bizonyításokban felhasználhatók.

Tekintsük először A^*A spurját [A tetszőleges, A^*A a II. 4. fejezet alapján hermitikus és mivel $(A^*Af, f) = (Af, Af) \geq 0$, azért definit]. Ekkor

$$\text{Sp}(A^*A) = \sum_{\mu=1}^{\infty} (A^*A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu}) = \sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}, A\varphi_{\mu}) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\varphi_{\mu}\|^2.$$

E sor vagy konvergens, vagy $+\infty$ -hez tart, tehát értelmezve van, hiszen valamennyi tagja nemnegatív. Az előző megfontolásoktól függetlenül belátjuk, hogy összege $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ megválasztásától független. Esetünkben csak nemnegatív tagokból álló sorokkal van dolgunk, ezek tehát mindig értelmezve vannak és minden átrendezés megengedett rájuk.

Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ és ψ_1, ψ_2, \dots két teljes ortonormált rendszer. Legyen

$$\sum(A; \varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(A\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2.$$

A 7. Tétel γ) pontja szerint (II. 2. fejezet) ez nem más, mint

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\varphi_{\mu}\|^2,$$

vagyis $\sum(A; \varphi_{\mu}, \psi_{\nu})$ csupán látszólag függ ψ_{ν} -től. Továbbá (mind $A\varphi_{\mu}$ -nek, mind pedig $A^*\psi_{\nu}$ -nek értelmezve kell lennie):

$$\begin{aligned} \sum(A; \varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) &= \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(A\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2 = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(\varphi_{\mu}, A^*\psi_{\nu})|^2 = \\ &= \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(A^*\psi_{\nu}, \varphi_{\mu})|^2 = \sum(A^*; \psi_{\nu}, \varphi_{\mu}). \end{aligned}$$

Ily módon a függés φ_μ -től szintén látszólagos, hiszen ez igaz a jobb oldalra. Következésképpen $\sum(A; \varphi_\mu, \psi_\nu)$ csak A -tól függ. A továbbiakban ezt $\sum(A)$ -val jelöljük. A fenti levezetések miatt

$$\sum(A) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\varphi_\mu\|^2 = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(A\varphi_\mu, \psi_\nu)|^2,$$

és $\sum(A) = \sum(A^*)$. Így $\text{Sp}(A^*A)$ helyesen definiálható, mint $\sum(A)$.

Most $\sum(A)$ néhány tulajdonságát ismét levezetjük, noha azok a $\text{Sp}A$ korábban igazolt tulajdonságaiból is következnek.

A meghatározásból következik, hogy $\sum(A) \geq 0$ és ha $\sum(A) = 0$, akkor $A\varphi_\mu$ szükségképpen zérus, amelyből az előzőek mintájára következik, hogy $A = 0$. Más szóval, ha $A \neq 0$, akkor $\sum(A) > 0$.

Világos, hogy $\sum(aA) = |a|^2 \sum(A)$. Ha $A^*B = 0$, akkor

$$\begin{aligned} \|(A+B)\varphi_\mu\|^2 - \|A\varphi_\mu\|^2 &= \|B\varphi_\mu\|^2 = (A\varphi_\mu, B\varphi_\mu) + (B\varphi_\mu, A\varphi_\mu) = \\ &= 2\text{Re}(A\varphi_\mu, B\varphi_\mu) = 2\text{Re}(\varphi_\mu, A^*B\varphi_\mu) = 0, \end{aligned}$$

így a $\sum_{\mu=1}^{\infty}$ összegezés után

$$\sum(A+B) = \sum(A) + \sum(B).$$

Ez az összefüggés nem változik meg, ha A helyébe B -t írunk. Ily módon akkor is igaz, ha $B^*A = 0$. Az A -t és B -t még A^* -gal, illetve B^* -gal is helyettesíthetjük, tehát $AB^* = 0$, illetve $BA^* = 0$ is elégséges feltétel. Ha A (vagy B) hermitikus, akkor $AB = 0$, illetőleg $BA = 0$ írható.

Ha a zárt lineáris \mathfrak{M} sokaságnak E a projektora, akkor a $\text{Sp } E$ meghatározásakor tekintett $\psi_1, \dots, \psi_k, \chi_1, \dots, \chi_l$ rendszerre

$$\sum(E) = \sum_{\mu=1}^k \|E\psi_\mu\|^2 + \sum_{\mu=1}^l \|E\chi_\mu\|^2 = \sum_{\mu=1}^k \|\psi_\mu\|^2 + \sum_{\mu=1}^l \|0\|^2 = \sum_{\mu=1}^k 1 = k.$$

Más szóval $\sum(E)$ is \mathfrak{M} dimenziójával egyenlő (erre számíthattunk, hiszen $E^*E = EE = E$).

Ha A és B definit (hermitikus) operátor, akkor $\text{Sp}(AB)$ visszavezethető a \sum -ra. Ez azt jelenti, hogy létezik olyan A' és B' operátor, hogy $A'^2 = A$, $B'^2 = B$ és A' , B' is definit (hermitikus).¹¹⁴ Nevezzük A' -t és B' -t \sqrt{A} -nak, illetőleg \sqrt{B} -nek, ekkor formálisan

$$\begin{aligned} \text{Sp}(AB) &= \text{Sp}(\sqrt{A} \cdot \sqrt{A} \sqrt{B} \cdot \sqrt{B}) = \text{Sp}(\sqrt{B} \sqrt{A} \cdot \sqrt{A} \sqrt{B}) = \\ &= \text{Sp}(\sqrt{A} \sqrt{B})^*(\sqrt{A} \sqrt{B}) = \sum(\sqrt{A} \sqrt{B}). \end{aligned}$$

Ez a $\sum(\sqrt{A} \sqrt{B})$ a meghatározása folytán — figyelmen kívül hagyva a kapcsolatát a spurral — a $\text{Sp}(AB)$ -től elvárható valamennyi tulajdonsággal rendelkezik.

Nevezetesen

$$\sum(\sqrt{A} \sqrt{B}) = \sum(\sqrt{B} \sqrt{A}),$$

$$\sum(\sqrt{A} \sqrt{B+C}) = \sum(\sqrt{A} \sqrt{B}) + \sum(\sqrt{A} \sqrt{C}),$$

$$\sum(\sqrt{A+B} \sqrt{C}) = \sum(\sqrt{A} \sqrt{C}) + \sum(\sqrt{B} \sqrt{C}).$$

Az első annak következménye, hogy $\sum(XY)$ az X -ben és Y -ban szimmetrikus:

$$\sum(XY) = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(XY \varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2 = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(Y \varphi_{\mu}, X \psi_{\nu})|^2.$$

A második a harmadiknak következménye, ha még az első tulajdonságot is figyelembe vesszük. Így csupán a harmadik tulajdonságot kell bebizonyítani, vagyis azt, hogy $\sum(\sqrt{A} \sqrt{B})$ additív A -ban. Ez belátható, ha $\sum(\sqrt{A} \sqrt{B})$ -t így írjuk:

$$\begin{aligned} \sum(\sqrt{A} \sqrt{B}) &= \sum_{\mu=1}^{\infty} \|\sqrt{A} \sqrt{B} \varphi_{\mu}\|^2 = \sum_{\mu=1}^{\infty} (\sqrt{A} \sqrt{B} \varphi_{\mu}, \sqrt{A} \sqrt{B} \varphi_{\mu}) = \\ &= \sum_{\mu=1}^{\infty} (\sqrt{A} \sqrt{A} \sqrt{B} \varphi_{\mu}, \sqrt{B} \varphi_{\mu}) = \sum_{\mu=1}^{\infty} (A \sqrt{B} \varphi_{\mu}, \sqrt{B} \varphi_{\mu}). \end{aligned}$$

Ily módon a spur fogalmának a kívánt mértékben szigorú megalapozását kaptuk.

Az utóbbi formulából még az is következik, hogy ha AB definit, akkor $AB=0$ következménye $\text{Sp}(AB)=0$ -nak. Ez utóbbinak folyománya ugyanis, hogy $\sum(\sqrt{A} \sqrt{B})=0$, s így $\sqrt{A} \sqrt{B}=0$ (lásd az előző oldalon a következtetést és a \sum -ra vonatkozó alábbi megfontolásainkat). Így

$$AB = \sqrt{A} \sqrt{A} \sqrt{B} \sqrt{B} = 0.$$

Definit hermitikus A operátorra a számolás a spurral az eredeti formában is érvényes. Valóban, legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszer. Ekkor a

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} (A \varphi_{\mu}, \varphi_{\mu})$$

összeg (amelynek a spurt kellene megadnia!) — lévén minden tagja nemnegatív — vagy konvergens, vagy pedig $+\infty$ -hez tart. Két eset lehetséges tehát: vagy végtelen ez az összeg $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ akármilyen megválasztása esetén, ekkor a spur $+\infty$ és $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ -től független, vagy pedig az összeg véges legalább egy teljes ortonormált rendszerre, mondjuk $\bar{\varphi}_1, \bar{\varphi}_2, \dots$ -ra. Ekkor

$$\left(\sum_{\mu=1}^{\infty} (A \bar{\varphi}_{\mu}, \bar{\varphi}_{\mu}) \right)^2 = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (A \bar{\varphi}_{\mu}, \bar{\varphi}_{\mu}) (A \bar{\varphi}_{\nu}, \bar{\varphi}_{\nu}) \geq \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(A \bar{\varphi}_{\mu}, \bar{\varphi}_{\nu})|^2 = \sum(A),$$

tehát $\sum(A)$ is véges; legyen ennek értéke C^2 . Ha ψ_1, ψ_2, \dots tetszőleges teljes ortonormált rendszer, akkor

$$\sum(A) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\psi_{\mu}\|^2 = C^2, \quad \|A\psi_1\|^2 \leq C^2, \quad \|A\psi_1\| \leq C.$$

Tekintve, hogy bármely olyan ψ , amelyre $\|\psi\|=1$, választható egy ilyen rendszerben ψ_1 gyanánt, $\|\psi\|=1$ -ből következik, hogy $\|A\psi\| \leq C$. Általában $\|Af\| \leq C\|f\|$; ha $f=0$, akkor ez nyilvánvaló, ha $f \neq 0$, akkor a $\psi = \frac{1}{\|f\|}f$ helyettesítéssel látható be. Következésképpen A kielégíti a C_0 feltételt (II. 9. fejezet), tehát folytonos operátor. Azonban még több is igaz.

Mivel $\sum(A)$ véges, A az úgynevezett teljesen folytonos operátorok osztályába tartozik. HILBERT megmutatta, hogy az ilyen operátorra a sajátérték-feladat az eredeti formában oldható meg, vagyis létezik olyan ψ_1, ψ_2, \dots teljes ortonormált rendszer, amelyre $A\psi_{\mu} = \lambda_{\mu}\psi_{\mu}$ (és ha $\mu \rightarrow \infty$, akkor $\lambda_{\mu} \rightarrow 0$).¹¹⁵ Tekintve, hogy az operátor definit:

$$\lambda_{\mu} = (A\psi_{\mu}, \psi_{\mu}) \quad \text{és}$$

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \lambda_{\mu}^2 = \sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\psi_{\mu}\|^2 = \sum(A) = C^2.$$

Ha $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ bármilyen teljes ortonormált rendszer, akkor

$$\begin{aligned} \sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu}) &= \sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\sum_{\nu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) (\psi_{\nu}, \varphi_{\mu}) \right) = \\ &= \sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\sum_{\nu=1}^{\infty} (\varphi_{\mu}, A\psi_{\nu}) (\psi_{\nu}, \varphi_{\mu}) \right) = \\ &= \sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\sum_{\nu=1}^{\infty} \lambda_{\nu} (\varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) (\psi_{\nu}, \varphi_{\mu}) \right) = \\ &= \sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\sum_{\nu=1}^{\infty} \lambda_{\nu} |(\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2 \right). \end{aligned}$$

Az összegezést átrendezhetjük, hiszen minden tag nemnegatív:

$$\begin{aligned} \sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu}) &= \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} \lambda_{\nu} |(\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2 = \\ &= \sum_{\nu=1}^{\infty} \lambda_{\nu} \left(\sum_{\mu=1}^{\infty} |(\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2 \right) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \lambda_{\nu} \|\psi_{\nu}\|^2 = \sum_{\nu=1}^{\infty} \lambda_{\nu}. \end{aligned}$$

A $\sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu})$ ebben az esetben is független $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ megválasztásától és egyenlő a sajátértékek összegével. Ez az összeg véges $\bar{\varphi}_1, \bar{\varphi}_2, \dots$ esetében, tehát mindig az. Más szóval $\text{Sp}A$ most is egyértelmű, ezúttal azonban véges is.

A spurral számolni tehát mindkét esetben jogos.

Most néhány becslést adunk $\text{Sp}A$ -ra és $\sum(A)$ -ra. Minden olyan A esetében, amikor $\sum(A)$ véges, érvényes: $\|Af\| \leq \sqrt{\sum(A)} \cdot \|f\|$; minden olyan definit (hermitikus) A -ra, amelyre $\text{Sp}A$ véges, fennáll: $\|Af\| \leq \text{Sp}A \cdot \|f\|$. Legyen továbbá A definit, $\text{Sp}A = 1$ és olyan megfelelő φ -re, amelyre $\|\varphi\| = 1$, $\|A\varphi\|^2 \geq 1 - \varepsilon$, vagy $(A\varphi, \varphi) \geq 1 - \varepsilon$. Elég a második esetet megvizsgálni, mert az első a $(A\varphi, \varphi) \leq \|A\varphi\| \cdot \|\varphi\| = \|A\varphi\|$ miatt következménye a másodiknak $[(1 - \varepsilon)^2 \geq 1 - 2\varepsilon$ áll $1 - \varepsilon$ helyén, így 2ε áll ε helyén].

Legyen ψ ortogonális φ -re, $\|\psi\| = 1$. Ekkor található olyan χ_1, χ_2, \dots teljes ortonormált rendszer, hogy $\chi_1 = \varphi, \chi_2 = \psi$. Így

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\chi_{\mu}\|^2 \begin{cases} = \sum(A) \leq [\text{Sp}A]^2 = 1, \\ \geq \|A\varphi\|^2 + \|A\psi\|^2 \geq 1 - 2\varepsilon + \|A\psi\|^2, \end{cases}$$

$$\|A\psi\|^2 \leq 2\varepsilon, \quad \|A\psi\| \leq \sqrt{2\varepsilon}.$$

Így bármely, φ -re ortogonális f esetén

$$\|Af\| \leq \sqrt{2\varepsilon} \|f\|.$$

(Ha $f=0$, akkor ez nyilvánvaló, ha nem, akkor $\psi = \frac{1}{\|f\|} f$ -et kell tekinteni.) Szem előtt-tartván, hogy $(Af, g) = (f, Ag)$, kapjuk, hogy $|(Af, g)| \leq \sqrt{2\varepsilon} \|f\| \cdot \|g\|$, ha vagy f , vagy g ortogonális φ -re.

Legyen f, g tetszőleges. Ekkor

$$f = \alpha\varphi + f', \quad g = \beta\varphi + g',$$

ahol f' és g' ortogonális φ -re és $\alpha = (f, \varphi), \beta = (g, \varphi)$. Így

$$(Af, g) = \alpha\bar{\beta}(A\varphi, \varphi) + \alpha(A\varphi, g') + \bar{\beta}(Af', \varphi) + (Af', g').$$

Legyen $(A\varphi, \varphi) = c$, akkor

$$|(Af, g) - c\alpha\bar{\beta}| \leq |\alpha| \cdot |(A\varphi, g')| + |\beta| \cdot |(Af', \varphi)| + |(Af', g')|,$$

és a fenti becslések szerint

$$\begin{aligned} |(Af, g) - c\alpha\bar{\beta}| &\leq \sqrt{2\varepsilon} (|\alpha| \cdot \|g'\| + |\beta| \cdot \|f'\| + \|f'\| \cdot \|g\|) \leq \\ &\leq \sqrt{2\varepsilon} (|\alpha| + \|f'\|) (\|\beta\| + \|g\|) \leq 2\sqrt{2\varepsilon} \sqrt{|\alpha|^2 + \|f'\|^2} \sqrt{|\beta|^2 + \|g\|^2} = \\ &= 2\sqrt{2\varepsilon} \|f\| \cdot \|g\|. \end{aligned}$$

Másrészt

$$(Af, g) - c\alpha\bar{\beta} = (Af, g) - c(f, \varphi)(\varphi, g) = ((A - cP_{[\varphi]})f, g).$$

Így általában érvényes

$$|(A - cP_{[\varphi]})f, g| \leq 2\sqrt{2\varepsilon} \|f\| \cdot \|g\|.$$

A II. 9. fejezetben mondottak pedig

$$\|(A - cP_{[\varphi]})f\| \leq 2\sqrt{2\varepsilon} \|f\|$$

is.

Ez $f = \varphi$ esetében azt adja, hogy

$$\|A\varphi - c\varphi\| \leq 2\sqrt{2\varepsilon},$$

$$c = \|c\varphi\| \begin{cases} \leq \|A\varphi - c\varphi\| + \|A\varphi\| \leq 2\sqrt{2\varepsilon} + 1, \\ \geq -\|A\varphi - c\varphi\| + \|A\varphi\| \geq -2\sqrt{2\varepsilon} + (1 - \varepsilon), \end{cases}$$

$$1 - (\varepsilon + 2\sqrt{2\varepsilon}) \leq c \leq 1 + 2\sqrt{2\varepsilon}.$$

$[c = (A\varphi, \varphi)$ valós és nemnegatív]. Következésképpen

$$\begin{aligned} \|(A - P_{[\varphi]})f\| &\leq \|(A - cP_{[\varphi]})f\| + \|(c - 1)P_{[\varphi]}f\| \leq \\ &\leq 2\sqrt{2\varepsilon} \|f\| + (\varepsilon + 2\sqrt{2\varepsilon}) \|P_{[\varphi]}f\| \leq (\varepsilon + 4\sqrt{2\varepsilon}) \cdot \|f\|. \end{aligned}$$

Ha tehát $\varepsilon \rightarrow 0$, akkor A egyenletesen tart $P_{[\varphi]}$ -hez.

Végül tekintsük $\text{Sp}A$ -t és $\text{Sp}B$ -t, amikor \mathfrak{R}_∞ -t az F_Z vagy F_Ω realizálja (lásd az I. 4. és II. 3. fejezetet), a fizikai alkalmazásoknak megfelelően.

Az F_Z -ben (ez az olyan $\{x_1, x_2, \dots\}$ elemek halmaza, amelyekre $\sum_{\mu=1}^{\infty} |x_\mu|^2$ véges) A -s az $\{a_{\mu\nu}\}$ mátrixszal jellemezhetjük:

$$A\{x_1, x_2, \dots\} = \{y_1, y_2, \dots\}; \quad y_\mu = \sum_{\nu=1}^{\infty} a_{\mu\nu} x_\nu.$$

Itt $\{1, 0, 0, \dots\}, \{0, 1, 0, \dots\}$ alkotja a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszert és

$$A\varphi_\mu = \sum_{\rho=1}^{\infty} a_{\rho\mu} \varphi_\rho = \{a_{1\mu}, a_{2\mu}, \dots\}.$$

Így

$$(A\varphi_\mu, \varphi_\mu) = a_{\mu\mu}, \quad \|A\varphi_\mu\|^2 = \sum_{\rho=1}^{\infty} |a_{\rho\mu}|^2.$$

Ebből azonnal következik, hogy

$$\begin{aligned} \text{Sp}A &= \sum_{\mu=1}^{\infty} a_{\mu\mu} \\ \sum(A) &= \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |a_{\mu\nu}|^2. \end{aligned}$$

Az F_Ω -ban [ez ama Ω -ban definiált $f(P)$ -k tere, amelyekre $\int_\Omega |f(P)|^2 dV$ véges] tekintsük az

$$Af(P) = \int_\Omega a(P, P') f(P') dV'$$

integráloperátorokat. [$a(P, P')$ az Ω -ban értelmezett kétváltozós függvény, A „magja”, lásd I. 4.-et]. Legyen $\varphi_1(P), \varphi_2(P), \dots$ tetszőleges teljes ortonormált rendszer; ekkor

$$\text{Sp}A = \sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu(P), \varphi_\mu(P)) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \int_\Omega [\int_\Omega a(P, P') \varphi_\mu(P') dV'] \varphi_\mu(P) dV,$$

és mivel tetszőleges $\overline{g(P)}$ -re (7. Tétel, β) II. 2. fejezet)

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} (\int_\Omega \overline{g(P') \varphi_\mu(P')} dV') \varphi_\mu(P) = \overline{g(P)},$$

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} (\int_\Omega g(P') \varphi_\mu(P') dV) \overline{\varphi_\mu(P)} = g(P),$$

azért

$$\text{Sp}A = \int_\Omega a(P, P) dV.$$

Továbbá:

$$\sum(A) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \int_\Omega \int_\Omega |a(P, P') \varphi_\mu(P') dV'|^2 dV,$$

mivel (7. Tétel, γ) II. 2.)

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} |\int_\Omega g(P') \varphi_\mu(P') dV'|^2 = \sum_{\mu=1}^{\infty} |\int_\Omega \overline{g(P') \varphi_\mu(P')} dV'|^2 =$$

$$= \int_\Omega |\overline{g(P')}|^2 dV' = \int_\Omega |g(P')|^2 dV',$$

ezért

$$\sum(A) = \int_\Omega \int_\Omega |a(P, P')|^2 dV dV'.$$

Látható, hogy $\text{Sp}A$ és $\sum(A)$ esetén teljesül az, amit matematikailag kétséges módszerekkel kerestünk, tudniillik, hogy amikor F_Z -ről F_Ω -ra térünk rá, akkor

$\sum_{\mu=1}^{\infty} \dots$ az $\int_\Omega \dots dV$ -vel helyettesítendő.

Ezzel befejeztük a hermitikus operátorok matematikai vizsgálatát. A matematika iránt érdeklődő olvasó e témáról az idevágó irodalomból többet is megtudhat.¹¹⁶

III. A KVANTUMSTATISZTIKA

1. A kvantummechanika statisztikai állításai

Térjünk most vissza a II. fejezet matematikai megfontolásaival megszakított és a kvantummechanikai elméletekre vonatkozó elemzésünkhöz. Ebben csak azzal foglalkoztunk, hogy a kvantummechanika alapján miként lehet egy bizonyos fizikai mennyiségnek, az energiának minden lehetséges értékét meghatározni. Ezek az értékek az energiaoperátor sajátértékei (tehát a spektrumában levő számok). Nem tettünk azonban említést arról, hogy mit lehet más mennyiségek értékeiről mondani, és arról sem, hogy különböző mennyiségek értékei között ok—okozati, vagy pedig statisztikus összefüggések állnak-e fenn. Az elméletnek e problémára vonatkozó állításait vizsgáljuk most meg. Alapul a hullámmechanikai leírást vesszük, hiszen a két elmélet egyenértékűségét már bebizonyítottuk.

Ennél a leírásnál nyilvánvaló, hogy minden, ami a rendszerről elmondható, szükségképpen lezárható a $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ hullámfüggvényből. (Feltételezzük, hogy a rendszer k szabadsági fokú és a konfiguráció koordinátáit q_1, \dots, q_k jelöli.) Valójában ezzel nem korlátozzuk figyelmünket a rendszer stacionárius állapotaira (olyan kvantumpályákra, amelyekre φ a H -nak sajátfüggvénye: $H\varphi = \lambda\varphi$, lásd az I. fejezetet), hanem a rendszernek egyéb állapotait — a φ

hullámfüggvényeket — is megengedjük (ezek a $H\varphi = \frac{-\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi$ időtől függő

Schrödinger-féle differenciálegyenletet elégítik ki, lásd az I. 2. fejezetet). Milyen kijelentéseket tehetünk olyan rendszerről, amely a φ állapotban van?

Mindenekelőtt vegyük észre, hogy φ normált (I. 3. fejezet):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k = 1,$$

vagyis (új szóhasználatunkkal) az \mathfrak{R}_∞ Hilbert-tér egy pontjáról van szó. Az \mathfrak{R}_∞ azon $f(q_1, \dots, q_k)$ -k F_Ω tere, amelyekre

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} |f(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

véges. Tehát $\|\varphi\| = 1$. Más szóval φ a Hilbert-tér egységömbjének felületén van.¹¹⁷ Azt már tudjuk, hogy állandó (vagyis q_1, \dots, q_k -től független) szorzónak φ -ben nincs fizikai jelentése. (Ez azt jelenti, hogy φ az $a\varphi$ -vel helyettesíthető, ahol a komplex szám. A $\|\varphi\| = 1$ normálás miatt $|a| = 1$.) Meg kell továbbá jegyeznünk,

hogy míg φ a q_1, \dots, q_k koordináták mellett a t időtől is függ, a *Hilbert*-térben csak a q_1, \dots, q_k koordináták bukkannak fel (a normálás ugyanis csak ezekre vonatkozik). Ezért a t -től való függést a *Hilbert*-tér kialakításában nem vesszük figyelembe, hanem inkább paraméternek tekintjük. Következésképpen φ , mint az \mathfrak{R}_∞ egy pontja, függ t -től, ám q_1, \dots, q_k -től nem; valóban, mint az \mathfrak{R}_∞ egy pontja, magába foglalja a teljes funkcionális függést. Ezért a t paramétert φ -ben esetenként így tüntetjük fel: φ_t (akkor amikor a φ -t az \mathfrak{R}_∞ egy pontjának tekintjük).

Tekintsük most a $\varphi = \varphi(q_1, \dots, q_k)$ állapotot. Erről a következő statisztikai jellegű kijelentéseket tehetjük: A rendszer a konfigurációs tér q_1, \dots, q_k pontjában a $|\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2$ valószínűségi sűrűséggel található meg, más szóval annak a valószínűsége, hogy a rendszer a V térfogatban van, a következő:

$$\int_V \dots \int_V |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dV.$$

(Ez az egyik első és legegyszerűbb példa, amelyen a kvantummechanika statisztikus jellegét felismerték.¹¹⁸ Eme állítás és SCHRÖDINGERNEK a töltéeloszlásra vonatkozó feltevése között az összefüggés világos, lásd az I. 2. fejezetet). Ha a rendszer energiájának operátora H , és eme operátor sajátértékei $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, sajátfüggvényei pedig $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, akkor a λ_n energia valószínűsége a φ állapotban

$$\left| \int \dots \int \varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\varphi_n(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k \right|^2$$

(lásd a 118. jegyzetben idézett cikkeket). E két állítást most egységes alakba kívánjuk önteni.

Legyen V az alábbi k -dimenziós kocka:

$$q'_1 < q_1 \leq q''_1, \dots, \quad q'_k < q_k \leq q''_k.$$

Jelölje I_1, \dots, I_k rendre a $\{q'_1, q''_1\}, \dots, \{q'_k, q''_k\}$ intervallumokat. A q_1, \dots, q_k operátora q_1, \dots, q_k . Az ezekhez tartozó egységfelbontás értelmezése a következő (lásd a II. 8. fejezetet): ha $E_j(\lambda)$ a q_j -hez ($j=1, \dots, k$) tartozó egységfelbontás, akkor

$$E_j(\lambda) f(q_1, \dots, q_k) = \begin{cases} f(q_1, \dots, q_k), & \text{ha } q_j \leq \lambda, \\ 0, & \text{ha } q_j > \lambda. \end{cases}$$

Bevezetjük a következő általános jelölést: ha $F(\lambda)$ egységfelbontás és I a $\{\lambda', \lambda''\}$ intervallum, akkor $F(I) = F(\lambda'') - F(\lambda')$ mert ha $\lambda' \leq \lambda''$, akkor $F(\lambda') \leq F(\lambda'')$, F projektor. Így annak valószínűsége, hogy a rendszer az előbbi V -ben van, vagyis hogy q_1, \dots, q_k rendre az I_1, \dots, I_k intervallumba esik, a következő:

$$\begin{aligned} & \int_{q'_1}^{q''_1} \dots \int_{q'_k}^{q''_k} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k = \\ & = \int \dots \int |E_1(I_1) \dots E_k(I_k) \varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k \end{aligned}$$

(ugyanis $E_1(I_1) \dots E_k(I_k)\varphi(q_1, \dots, q_k) = \varphi(q_1, \dots, q_k)$ ha q_1, \dots, q_k rendre I_1, \dots, I_k pontja, különben pedig zérus), vagyis ez az integrál

$$= \|E_1(I_1) \dots E_k(I_k)\varphi\|^2.$$

A második esetben tekintsük annak valószínűségét, hogy az energia az $I = \{\lambda', \lambda''\}$ intervallumba esik. Az $E(\lambda)$ egységfelbontás értelmezés szerint (lásd a II. 8. fejezetet)

$$E(\lambda) = \sum_{\lambda_n \leq \lambda} P_{[\varphi_n]}.$$

Így

$$E(I) = E(\lambda'') - E(\lambda') = \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} P_{[\varphi_n]}.$$

Mivel az energia lehetséges értékei $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, a kérdéses valószínűség az olyan λ_n -ek valószínűségének az összege, amelyekre $\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''$, így e valószínűség

$$\begin{aligned} & \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} \left| \int \dots \int \varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\varphi_n(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k \right|^2 = \\ & = \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} |(\varphi, \varphi_n)|^2 = \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} (P_{[\varphi_n]}\varphi, \varphi) = \\ & = \left(\left\{ \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} P_{[\varphi_n]} \right\} \varphi, \varphi \right) = (E(I)\varphi, \varphi) = \|E(I)\varphi\|^2. \end{aligned}$$

Mindkét esetben a következőképpen megfogalmazható eredményt kaptuk:

(P.) Annak a valószínűsége, hogy a φ állapotban az R_1, \dots, R_l ¹¹⁹ operátoroknak megfelelő mennyiségek értéke rendre az I_1, \dots, I_l intervallumba essék, a következő:

$$\|E_1(I_1) \dots E_l(I_l) \varphi\|^2,$$

ahol $E_1(\lambda), \dots, E_l(\lambda)$ rendre az R_1, \dots, R_l operátorokhoz tartozó egységfelbontás.

Az első esetben $l=k$, $R_1=q_1, \dots, R_k=q_k$, a másodikban $l=1$, $R_1=H$. Feltételezzük tehát, hogy a **P.** állítás általánosan igaz. Ez a kvantummechanika valamennyi eddig kimondott statisztikus jellegű állítását magába foglalja.

E feltétel érvényességét azonban korlátozni kell. Az R_1, \dots, R_l sorrendje a problémában teljesen tetszőleges, így annak a képletben is tetszőlegesnek kell lennie. Így valamennyi $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ -nek, vagy ami ugyanaz, valamennyi $E_1(\lambda_1), \dots, E_l(I_l)$ -nek felcserélhetőnek kell lennie egymással. A II. 10. fejezet alapján ez azt jelenti, hogy valamennyi R_1, \dots, R_l felcserélhető egymással. Ez a kikötés q_1, \dots, q_k esetében teljesül, míg ha $l=1$, $R_1=H$, akkor érdektelen.

Következésképpen **P.**-t a felcserélhető R_1, \dots, R_l operátorokra tételezzük fel. Ekkor $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ is felcserélhető, tehát (II. 4. fejezet, 14. Tétel) $E_1(I_1) \dots E_l(I_l)$ egy projektor és a kérdéses valószínűség

$$P = \|E(I_1) \dots E_l(I_l)\varphi\|^2 = (E_1(I_1) \dots E_l(I_l)\varphi, \varphi)$$

(II. 4. fejezet, 12. Tétel).

Mielőtt továbbmennénk, **P.** néhány olyan sajátságát igazoljuk, amelynek minden ésszerű statisztikus elméletben igaznak kell lennie.

1. Az állítások sorrendje közömbös.

2. Üres állításokat tetszés szerint beírhatunk **P.**-be. Tehát olyanokat, amelyeknél I_j a $\{-\infty, +\infty\}$ intervallum, emiatt csak az

$$E_j(I_j) = E_j(+\infty) - E_j(-\infty) = 1 - 0 = 1$$

tényező jelenik meg.

3. Érvényes a valószínűségek összeadási tétele. Más szóval, ha az I_j intervallumot felbontjuk az I'_j és az I''_j intervallumra, akkor az eredeti valószínűség a részvalószínűségek összege lesz. Ugyanis, ha I_j, I'_j, I''_j rendre $\{\lambda', \lambda''\}, \{\lambda', \lambda\}, \{\lambda, \lambda''\}$, akkor

$$E(\lambda'') - E(\lambda') = (E(\lambda) - E(\lambda')) + (E(\lambda'') - E(\lambda)),$$

tehát

$$E(I_j) = E(I'_j) + E(I''_j),$$

ami **P.**-nek az előbb felírt második alakja miatt (ez lineáris $E_1(I_1) \dots E_j(I_j) \dots E_l(I_l)$ -ben) a valószínűségek additivitásához vezet.

4. Abszurd állításokra (az egyik I_j üres) $P=0$, ugyanis a megfelelő $E_j(I_j)=0$. Triviálisan igaz állításokra (minden I_j egyenlő $\{-\infty, +\infty\}$ -vel) $P=1$, ekkor ugyanis $E_j(I_j)=1$, ($j=1 \dots, l$), $P = \|\varphi\|^2 = 1$. A $0 \leq P \leq 1$ mindig igaz a II. 4. fejezet 13. Tételé miatt.

Végül figyeljük meg, hogy **P.** azt a kikötést is tartalmazza, hogy az R_j mennyiség értéke csak R_j sajátértéke, tehát spektrumának valamely pontja lehet. Ha ugyanis az $I_j = \{\lambda', \lambda''\}$ intervallum a spektrumon kívül esik, akkor benne $E_j(\lambda)$ állandó, tehát

$$E_j(I_j) = E_j(\lambda'') - E(\lambda') = 0,$$

amiből következik, hogy $P=0$.

Legyen most $l=1$ és $R_1=R$. Legyen \mathfrak{A} az a fizikai mennyiség, amelynek az R operátor felel meg (lásd a 119. jegyzetet). Legyen $F(\lambda)$ tetszőleges függvény. Számítsuk ki $F(\mathfrak{A})$ várható értékét.

E célból osszuk fel a $\{-\infty, +\infty\}$ intervallumot egymás után következő $\{\lambda_n, \lambda_{n+1}\}$ részintervallumokra, $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Annak valószínűsége, hogy \mathfrak{A} értéke $\{\lambda_n, \lambda_{n+1}\}$ -be esik, a következő:

$$(\{E(\lambda_{n+1}) - E(\lambda_n)\}\varphi, \varphi) = (E(\lambda_{n+1})\varphi, \varphi) - (E(\lambda_n)\varphi, \varphi),$$

következésképpen $F(\mathfrak{A})$ várható értéke:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} F(\lambda'_n) ((E(\lambda_{n+1})\varphi, \varphi) - (E(\lambda_n)\varphi, \varphi)),$$

ha λ'_n valamilyen közbenső pontja $\{\lambda_n, \lambda_{n+1}\}$ -nek. Amint azonban a $\dots, \lambda_{-2}, \lambda_{-1}, \lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots$ felosztást finomítjuk, ez az összeg az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(\lambda) d(E(\lambda)\varphi, \varphi)$$

Stieltjes-integrálhoz tart, így a kérdéses várható érték ezzel lesz egyenlő. Azonban az operátorfüggvényeknek a II. 8. fejezetben található meghatározása folytán ez az integrál nem más, mint $(F(R)\varphi, \varphi)$. Így kimondhatjuk a következőket:

(E₁.) Ha \mathfrak{R} valamilyen fizikai mennyiség, amelynek operátora R (lásd a 119. jegyzetet) és $F(\lambda)$ tetszőleges függvény, akkor $F(\mathfrak{R})$ várható értéke a φ állapotban

$$V(F(\mathfrak{R}); \varphi) = (F(R)\varphi, \varphi).$$

Nevezetesen, ha $F(\lambda) = \lambda$, akkor:

(E₂.) A fenti \mathfrak{R} várható értéke a φ állapotban

$$V(\mathfrak{R}; \varphi) = (R\varphi, \varphi).$$

Az alábbiakban megvizsgáljuk az összefüggést \mathbf{P} ., \mathbf{E}_1 . és \mathbf{E}_2 . között.

Levezetjük most \mathbf{E}_1 -et \mathbf{P} -ből és \mathbf{E}_2 -t \mathbf{E}_1 -ből. Jelöljük az $F(\mathfrak{R})$ operátort S -sel, ekkor az \mathbf{E}_1 . és \mathbf{E}_2 . összevetéséből

$$(S\varphi, \varphi) = (F(R)\varphi, \varphi)$$

minden φ állapotra, tehát minden olyan φ -re, amelyre $\|\varphi\| = 1$. Így általában

$$(Sf, f) = (F(R)f, f)$$

(ez $f=0$ -ra nyilvánvaló, különben pedig legyen $\varphi = \frac{1}{\|f\|}f$), ezért

$$(Sf, g) = (F(R)f, g)$$

(ha az előbbi egyenletben f helyébe $\frac{f+g}{2}$ -t, majd $\frac{f-g}{2}$ -t írunk, kivonás után kapjuk a valós részek egyenlőségét, ebben f helyébe if -et írva kapjuk a képzetes részek egyenlőségét). Következésképpen $S = F(R)$. E fontos eredményt az alábbiakban fogalmazzuk meg.

(F.) Ha az \mathfrak{R} mennyiség operátora R , akkor $F(\mathfrak{R})$ operátora $F(R)$.

Az F . miatt \mathbf{E}_1 . nyilvánvalóan folyománya \mathbf{E}_2 -nek.

Következésképpen (F -et feltételezve) \mathbf{E}_1 . és \mathbf{E}_2 . egyenértékű állítás, és most megmutatjuk, hogy ezek \mathbf{P} -vel is egyenértékűek. Mivel mindkettő \mathbf{P} . következményei, csak annyit kell megmutatnunk, hogy a \mathbf{P} . az \mathbf{E}_1 -ből vagy \mathbf{E}_2 -ből levezethető.

Tartozzék az $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ mennyiségekhez rendre az R_1, \dots, R_l egymással felcserélhető operátor. A II. 10. fejezetben mondottak alapján ezek mind valamely hermitikus operátor függvényei:

$$R_1 = F_1(R), \dots, R_l = F_l(R).$$

Feltételezzük, hogy R is valamely \mathfrak{R} mennyiség operátora. (Feltevésünk tehát az, hogy minden \mathfrak{R} mennyiséghez tartozik egy R (hipermaximális) hermitikus operátor és fordítva (lásd a 119. jegyzetet és a IV. 2. fejezetet). Ekkor F . miatt

$$\mathfrak{R}_1 = F_1(\mathfrak{R}), \dots, \mathfrak{R}_l = F_l(\mathfrak{R}).$$

Legyenek I_1, \dots, I_l a \mathbf{P} -ben szereplő intervallumok, és

$$G_j(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \lambda \text{ } I_j\text{-be esik,} \\ 0 & \text{különben.} \end{cases} \quad (j = 1, \dots, l)$$

Legyen továbbá

$$H(\lambda) = G_1(F_1(\lambda)) \dots G_l(F_l(\lambda)),$$

és képezzük a

$$\mathfrak{G} = H(\mathfrak{R})$$

mennyiséget.

Ha \mathfrak{R}_j , vagyis $F_j(\mathfrak{R})$ értéke I_j -be esik, akkor $G_j(F_j(\mathfrak{R}))$ 1-gyel egyenlő, különben pedig 0. A $\mathfrak{G} = H(\mathfrak{R})$ akkor 1, ha mindegyik \mathfrak{R}_j értéke a neki megfelelő I_j -be esik, különben 0. A \mathfrak{G} várható értéke tehát annak a P valószínűségével egyenlő, hogy \mathfrak{R}_1 értéke I_1 -be, \mathfrak{R}_2 értéke I_2 -be, ... \mathfrak{R}_l értéke I_l -be esik. Tehát:

$$\begin{aligned} P &= V(\mathfrak{G}, \varphi) = (H(R)\varphi, \varphi) = (G_1(F_1(R)) \dots G_l(F_l(R))\varphi, \varphi) = \\ &= (G_1(R_1) \dots G_l(R_l)\varphi, \varphi). \end{aligned}$$

Legyen az R_j -hez tartozó egységfelbontás ismét $E_j(\lambda)$ és legyen I_j a $\{\lambda'_j, \lambda''_j\}$ intervallum. Ekkor a II. 8. fejezet végén található meg gondolás miatt és az ott használt jelöléssel:

$$G_j(\lambda) = e_{\lambda''_j}(\lambda) - e_{\lambda'_j}(\lambda),$$

$$G_j(R_j) = e_{\lambda''_j}(R_j) - e_{\lambda'_j}(R_j) = E_j(\lambda''_j) - E_j(\lambda'_j) = E_j(I_j),$$

így tehát

$$P = (E_1(I_1) \dots E_l(I_l)\varphi, \varphi),$$

ez azonban éppen P .

Alakjuk egyszerűsége miatt E_2 és F különösen alkalmasak arra, hogy az egész elmélet alapjául szolgáló feltevéseknek tekintsük őket. Beláttuk, hogy a lehető legáltalánosabb P valószínűségi kijelentés ezeknek következménye. A P állításnak azonban két szembevethető vonása van;

1. A P statisztikus és nem kauzális, vagyis nem azt mondja meg, hogy $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ milyen értékkel rendelkezik a φ állapotban, hanem csak azt, hogy a lehetséges értékeket milyen valószínűséggel veszik fel.

2. A P -ben rejlő kérdésre nem akármilyen $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ mennyiségek esetén lehet választ adni, hanem csak olyanokra, amelyeknek megfelelő R_1, \dots, R_l operátorok egymással felcserélhetők.

Most az a feladatunk, hogy e két sajátság jelentőségét megvizsgáljuk.

2. A statisztikus értelmezés

A klasszikus mechanika kauzális tudomány. Ez azt jelenti, hogy ha pontosan ismerjük valamely rendszer állapotát — amelyhez k szabadsági fok esetén $2k$ számadat szükséges: a k számú q_1, \dots, q_k térkoordináta és ezek idő szerinti

deriváltjai: $\frac{\partial q_1}{\partial t}, \dots, \frac{\partial q_k}{\partial t}$, vagy ez utóbbiak helyett k számú impulzus: p_1, \dots, p_k —,

akkor minden más fizikai mennyiség (energia, forgatónyomaték stb.) értéke egyértelműen és numerikus szempontból pontosan megadható. Létezik azonban a klasszikus mechanika tárgyalásának statisztikus módszere is. Ez azonban a klasszikus mechanika egy kiegészítése, tulajdonképpen amolyan „fényűzés”. Eszerint, ha nem ismerjük mind a $2k$ változót ($q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$), hanem csak néhányat belőlük (esetleg néhányukat csak pontatlanul ismerjük), akkor az ismeretlen változókra bizonyos átlagolást elvégezve a fizikai mennyiségekre legalább statisztikus kijelentéseket tehetünk. Ugyanez érvényes a rendszer korábbi, illetőleg későbbi állapotaira: ha $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$ ismeretesek valamely $t = t_0$ pillanatban, akkor a klasszikus mozgásegyenletek segítségével az állapot bármely pillanatban kiszámítható (kauzálisan), míg ha csak néhány változót ismerünk, akkor a többire átlagolni kell, és a t_0 -tól különböző pillanatokban csak statisztikus kijelentéseket tehetünk.¹²⁰

A kvantummechanikában talált statisztikus kijelentések más jellegűek. Itt k szabadsági fok esetén az állapotot a $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ hullámfüggvény, vagyis \mathfrak{R}_∞ -nek valamely alkalmasan kiválasztott ($|\varphi| = 1$ és esetleg érdektelen egységnyi abszolút értékű tényezővel rendelkező) pontja jellemzi. Noha φ megadásával az állapotot kimerítően jellemezzük, a fizikai mennyiségek értékére vonatkozóan mégis csupán statisztikus jellegű kijelentéseket tehetünk.

Másrészt e statisztikus jelleg csak a fizikai mennyiségek értékére kimondott állításokra korlátozódik, a $\varphi = \varphi_{t_0}$ alapján a korábbi és a későbbi φ_t -k kauzálisan számíthatók ki. Erre az időtől függő *Schrödinger*-egyenlet nyújt módot (lásd az I. 2. fejezetet), hiszen

$$\varphi_{t_0} = \varphi, \quad \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t = -H\varphi_t$$

segítségével φ_t egész menete meghatározható. E differenciálegyenlet megoldását explicit alakban is megadhatjuk:

$$\varphi_t = e^{-\frac{2\pi i}{h} (t-t_0)H} \varphi$$

(az $e^{-\frac{2\pi i}{h} (t-t_0)H}$ unitér).¹²¹ (E képletben H -ról feltételezzük, hogy az időtől független, de még időtől függő H esetén is egyértelműen meg van határozva a φ_t , hiszen a differenciálegyenlet elsőrendű. Ebben az esetben azonban nincs egyszerű megoldóképlet.)

Ha a klasszikus mechanika nyomán kívánjuk megmagyarázni a nem kauzális jellegű kapcsolatot a φ és a fizikai mennyiségek között, akkor nyilván a következőképpen kell okoskodnunk: a valóságban φ nem határozza meg az állapotot pontosan. Ahhoz, hogy ezt az állapotot kimerítően ismerjük, további számadatokra van szükség. Más szóval a rendszernek a φ mellett további jellemzői vagy koordinátái is vannak. Ha ezeket mind ismernénk, akkor minden fizikai mennyiség értékét pontosan és biztosan meg tudnánk adni. Ha viszont csupán a φ -t

használjuk, akkor — csakúgy, mint a klasszikus mechanikában, amikor $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$ közül csupán néhányat ismerünk — csupán statisztikus jellegű kijelentéseket tehetünk.

Természetesen ez az egész csupán elképzelt, feltételezett elgondolás. Az ilyen elképzelés értéke attól függ, hogy segítségével felkutathatók-e a φ mellett a további koordináták és ezek segítségével felépíthető-e olyan kauzális elmélet, amely a kísérlettel egyező eredményt szolgáltat és amely visszaadja a kvantummechanika statisztikus megállapításait, ha csak φ -t ismerjük (és a további koordinátákra valamilyen átlagolást végzünk).

Az ilyen feltételezett további koordinátákat „rejtett paramétereknek”, vagy „rejtett koordinátáknak” szokás nevezni, mivel ezek a mérések során leleplezett φ mellett rejtett szerepet játszanak. A rejtett paraméterek használata (a klasszikus fizikában) számos látszólagosan statisztikus összefüggést vezetett vissza a mechanika kauzális megalapozására. Erre példa a gázok kinetikus elmélete (lásd a 120. jegyzetet).

Az, hogy egy ilyen jellegű magyarázat a rejtett paraméterek segítségével a kvantummechanika területén lehetséges-e, sokat vitatott kérdés. Annak a nézetnek, hogy e kérdésre majd valamikor igenlő választ kapunk, számos kiváló képviselője van. Ha ez a nézet helyes lenne, akkor az elmélet jelen formáját ideiglenesnek kellene minősíteni, hiszen az állapotok leírása nem volna teljes.

Később megmutatjuk (IV. 2. fejezet), hogy rejtett paraméterek bevezetése biztosan nem lehetséges a jelenlegi elmélet mélyreható megváltoztatása nélkül. Egyelőre ismét hangsúlyozzuk az előbbi két jellegzetességet: a φ -nek egészen más szerepe van, mint a $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$ együttesnek a klasszikus mechanikában, és φ időfüggése nem statisztikus, hanem kauzális; a φ_{t_0} valamennyi φ_t -t egyértelműen meghatározza, amint azt az előbb beláttuk.

Amíg a kvantummechanika állításainak pontosabb elemzése alapján nem tudjuk bebizonyítani, hogy a rejtett paraméterek bevezetése lehetséges-e (erről az előbb jelzett szakaszban lesz szó), addig ezt a lehetséges értelmezést nem tárgyaljuk. Így a másik szempontot fogadjuk el. Eszerint elismerjük, hogy az elemi folyamatokat kormányzó törvények (vagyis a kvantummechanika törvényei) statisztikus természetűek. (A makroszkopikus világban a kauzalitás az egyes eseményekben az egyszerre lejátszódó nagyszámú elemi folyamatot mindig kísérő kiegyenlítődés eredménye, s mint ilyen, voltaképpen a „nagy számok törvényének” folyománya. Lásd a 120. jegyzet végét és a 175. jegyzetet.) Ennek megfelelően \mathbf{P} -t (illetőleg \mathbf{E}_2 -öt) az elemi folyamatokra vonatkozó legnagyobb horderejű állításnak tekintjük.

A kvantummechanika e felfogása, mely elismeri, hogy a statisztikus állítások a természettörvények igazi alakját tükrözik és elveti az okság elvét, az úgynevezett statisztikus értelmezés. Ennek megalkotója M. BORN,¹²² és ez a kvantummechanikának, vagyis az elemi folyamatokra vonatkozó tapasztalataink összességének egyetlen konzisztens és kényszerítő erejű értelmezése. Ehhez az értelmezéshez igazodunk mi is a továbbiakban (amíg részletesen és mélyrehatóan meg nem vizsgáltuk a kapcsolatot).

3. Több mennyiség egyidejű megmérése és a mérhetőség általában

A III. 1. fejezet végén megemlített másik meglepő jellegzetesség azzal kapcsolatos, hogy P . nemcsak arról ad felvilágosítást, hogy az \mathfrak{R} mennyiség milyen valószínűséggel vesz fel valamilyen számértéket, hanem arról is, hogy több mennyiség, $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ milyen valószínűségi kapcsolatban áll egymással. A P . megadja annak valószínűségét, hogy e mennyiségek bizonyos adott értékeket egyszerre vesznek fel (pontosabban, hogy e mennyiségek bizonyos I_1, \dots, I_l intervallumokba esnek valamilyen adott φ állapotban). Eme $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ mennyiségeket azonban jellegzetes megszorításnak vetettük alá: az R_1, \dots, R_l operátoraiknak egymással felcserélhetőnek kell lenniük. Nem felcserélhető R_1, \dots, R_l esetén P . nem ad felvilágosítást $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ valószínűségeinek kapcsolatáról. Ebben az esetben P . csak arra használható, hogy e mennyiségek közül akármelyiknek a valószínűségeloszlását külön — a többit figyelmen kívül hagyva — határozzuk meg.

A legkézenfekvőbb az lenne, hogy ezt P . fogyatékoságának tekintsük és azt gondoljuk, hogy olyan általánosabb formulának kell léteznie, amely P .-t speciális esetként tartalmazza. Ugyanis, ha a kvantummechanika csupán statisztikus információkat szolgáltat is a természetről, annyit azonban elvárhatunk, hogy ne csak az egyes mennyiségek statisztikáját írja le, hanem több ilyen mennyiség között összefüggést is szolgáltatasson.

Ez, első pillantásra ésszerű, feltételezés ellnére nemsokára belátjuk majd, hogy P . ilyen általánosítása nem lehetséges, és hogy formális okokon túl (ezek az elmélet matematikai eszközeinek szerkezetében rejlenek) nyomós fizikai érvek is sugallják ezt a megkötést. E megkötés szükségessége és fizikai jelentése fényt derít majd az elemi folyamatok természetére.

Ahhoz, hogy e pontot megvilágítsuk, alaposabban meg kell vizsgálni, mit jelent a kvantummechanikai leírás módszerében az \mathfrak{R} mennyiség megméréseinek folyamata — erről mond ki P . (valószínűségi) állítást.

Először idézzünk fel egy fontos kísérletet, amelyet COMPTON és SIMONS végzett el még a kvantummechanika kialakulása előtt.¹²³ Ebben a kísérletben fény szóródott elektronokon és a szórási folyamatot úgy szabályozták, hogy a szórt fényt és a szórt elektronokat felfogták, és energiájukat, valamint impulzusukat megmérték. Más szóval fénykvantumok és elektronok ütköztek egymással és a megfigyelő, megmérve az ütközés után a pályákat, meg tudta állapítani, hogy a rugalmas ütközés törvényei érvényesek-e, vagy sem. (Csak a rugalmas ütközéseket kell figyelembe venni, hiszen nem hihető, hogy az energiát az elektronok és a fénykvantumok a kinetikus energián kívül más formában is abszorbeálhatják. Az összes kísérlet arra mutat, hogy mindkettőnek egyértelműen rögzített szerkezete van. Az ütközés számítását természetesen relativisztikusan kell végrehajtani.¹²³) Az ilyen számítás valóban lehetséges, mert a pályákat az ütközés előtt ismerték, utána pedig kimérték. Az ütközési feladat tehát teljesen határozott. Ahhoz, hogy e folyamatot mechanikailag meghatározzuk, a négy pályából kettőt és az ütközés középvonalát (az impulzusátadás irányát) elég ismerni. Így mindenképpen elég

három pálya ismerete és a negyedik ellenőrzésként szolgál. A kísérletek az ütközés mechanikai törvényeit kivétel nélkül megerősítették.

Ha az ütközés törvényeit elfogadjuk és a pályákat az ütközés előtt ismertnek tekintjük, akkor ezt az eredményt a következőképpen fogalmazhatjuk meg. Az ütközés után akár az elektron, akár a fénykvantum pályájának megmérése elengedő az ütközés helyének és középvonalának meghatározásához, a *Compton—Simons*-féle kísérlet pedig azt mutatja, hogy e két megfigyelés ugyanazt az eredményt adja.

Még általánosabban: a kísérlet azt mutatja, hogy ugyanazt a fizikai mennyiséget (nevezetesen az ütközés helyének vagy a középvonal irányának akármelyik koordinátáját) két különböző módon megmérve, az eredmény mindig ugyanaz.

E két mérés nem történik pontosan egy időben. A fénykvantum és az elektron nem érkezik be egy időben, és a mérőeszköz megfelelő elrendezésével elérhető, hogy akármelyik becsapódást figyeljük meg elsőként, az időkülönbség általában 10^{-9} — 10^{-10} másodperc. Legyen az első mérés M_1 , a második M_2 , \mathfrak{M} a mért mennyiség. A helyzet tehát a következő. Noha az elrendezés olyan, hogy a mérés előtt csak statisztikus megállapításokat tehetünk \mathfrak{M} -ről, vagyis M_1 -ről és M_2 -ről (lásd a 123. jegyzetben a hivatkozást), a statisztikus korreláció M_1 és M_2 között tökéletesen éles (kauzális): az M_1 \mathfrak{M} -értéke biztosan egyenlő M_2 -ével. Az M_1 , M_2 mérések előtt mindkét eredmény teljesen határozatlan, miután M_1 -et elvégeztük (M_2 -t még nem) M_2 eredménye már egyértelműen és kauzálisan határozott.

Az itt rejlő elvet a következőképpen fogalmazhatjuk meg: természete szerint a kauzalitásnak vagy a nemkauzalitásnak három fokozatát különböztethetjük meg. Először \mathfrak{M} értéke lehet teljesen statisztikus, más szóval a mérés eredményét csak statisztikusan jósolhatjuk meg, és ha az első mérés után azonnal egy másodikat hajtunk végre, akkor ennek is van szórása, függetlenül az először mért értéktől — például e szórás megegyezhet az eredetivel.¹²⁴ Másodszor elképzelhető, hogy \mathfrak{M} értékének van szórása az első mérésben, de az azonnal végrehajtott következő mérés csak az elsőével megegyező eredményt adhat. Harmadszor, \mathfrak{M} rögtön kauzálisan határozható meg.

A *Compton—Simons*-féle kísérlet tehát azt mutatja, hogy statisztikus elméletben csak a második eset lehetséges. Így ha a rendszer eredetileg olyan állapotban van, amelyben \mathfrak{M} értékeit nem lehet biztosan megjósolni, akkor \mathfrak{M} -nek M mérése (a fenti példában M_1) ezt az állapotot egy másikba viszi át; nevezetesen olyanba, amelyben \mathfrak{M} értéke már egyértelműen meg van határozva. Mi több, az új állapot, amelybe M viszi át a rendszert, nem csupán M elrendezésétől függ, hanem az M mérés eredményétől is (ezt nem lehetett az eredeti állapotban kauzálisan megjósolni), hiszen értékének az új állapotban egyenlőnek kell lennie M eredményével.

Legyen \mathfrak{M} olyan mennyiség, amelyhez tartozó R operátor spektruma tisztán diszkrét: $\lambda_1, \lambda_2, \dots, s$ a megfelelő, teljes ortonormált rendszert alkotó sajátfüggvények legyenek $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. Legyen továbbá minden sajátérték egyszeres (vagyis 1 multiplicitású, lásd a II. 6. fejezetet), más szóval, ha $\mu \neq \nu$, akkor $\lambda_\mu \neq \lambda_\nu$. Tegyük fel, hogy \mathfrak{M} -et megmértük és az eredmény λ^* . Milyen a rendszer állapot a mérés után?

Az előző gondolatmenet szerint eme állapotnak olyannak kell lennie, hogy \mathfrak{R} -et ismét megmérve, az eredmény biztosan λ^* legyen (természetesen ezt a mérést azonnal végre kell hajtani, mert τ másodperc elmúltával φ az

$$e^{-\frac{2\pi i}{h} \tau \cdot H} \varphi$$

állapotba megy, itt H az energiaoperátor, lásd a III. 2. fejezetet).

Most anélkül, hogy megszorításokat tennénk az R operátorra, választ adunk arra a kérdésre, hogy \mathfrak{R} mérése a φ állapotban mikor adja biztosan λ^* -t eredményül.

Legyen $E(\lambda)$ az R -hez tartozó egységfelbontás és I a $\{\lambda', \lambda''\}$ intervallum. Kérdésünkkel kapcsolatban így fogalmazhatunk: az \mathfrak{R} 0 valószínűséggel esik I -be, ha λ^* nem pontja I -nek, illetőleg 1 valószínűséggel esik I -be, ha λ^* ennek pontja. A **P.** folytán az utóbbi esetben $\|E(I)\varphi\|^2 = 1$, és mivel $\|\varphi\| = 1$, azért $\|E(I)\varphi\| = \|\varphi\|$. Tekintve, hogy $E(I)$ és $1 - E(I)$ projektor (II. 4. fejezet, 13. Tétel):

$$\|\varphi - E(I)\varphi\|^2 = \|\varphi\|^2 - \|E(I)\varphi\|^2 = 0,$$

$$\varphi - E(I)\varphi = 0,$$

$$E(\lambda'')\varphi - E(\lambda')\varphi = E(I)\varphi = \varphi.$$

Ha $\lambda' \rightarrow -\infty$, akkor eszerint $E(\lambda'')\varphi = \varphi$, ha pedig $\lambda'' \rightarrow +\infty$, akkor $E(\lambda')\varphi = 0$ (lásd **S**₁, II. 7. fejezet). Így

$$E(\lambda)\varphi = \begin{cases} \varphi, & \text{ha } \lambda \geq \lambda^*, \\ 0, & \text{ha } \lambda < \lambda^*. \end{cases}$$

Ez azonban a II. 8. fejezet szerint azt jelenti, hogy $R\varphi = \lambda^*\varphi$.

Az **E**₁ (vagyis **E**₂) alapján is bebizonyíthatjuk, hogy $R\varphi = \lambda^*\varphi$. Az, hogy \mathfrak{R} értéke biztosan λ^* , annyit jelent, hogy $(\mathfrak{R} - \lambda^*)$ várható értéke 0. Más szóval, ha $F(\lambda) = (\lambda - \lambda^*)$, akkor az $F(R)$ operátornak, s így $(R - \lambda^* \cdot 1)$ -nek is ez a várható értéke. Ezek szerint:

$$\begin{aligned} ((R - \lambda^* \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) &= ((R - \lambda^* \cdot 1)\varphi, (R - \lambda^* \cdot 1)\varphi) = \\ &= \|(R - \lambda^* \cdot 1)\varphi\|^2 = \|R\varphi - \lambda^*\varphi\|^2 = 0, \end{aligned}$$

vagyis $R\varphi = \lambda^*\varphi$.

Így eredeti feladatunk esetében $R\varphi = \lambda^*\varphi$. Ahogy azt a II. 6. fejezetben kimutattuk, ebből következik, hogy λ^* -nak valamelyik λ_μ -vel kell egyenlőnek lennie (tekintve, hogy $\|\varphi\| = 1$, $\varphi \neq 0$), és $\varphi = a\varphi_\mu$, mivel $\|\varphi\| = \|\varphi_\mu\| = 1$, azért $|a| = 1$, s így a az állapot megváltoztatása nélkül elhagyható. Tehát $\lambda^* = \lambda_\mu$, $\varphi = \varphi_\mu$ valamelyik μ -vel ($\mu = 1, 2, \dots$). (A λ^* -ra vonatkozó megállapítás közvetlenül is megkapható **P.**-ből, a φ -re vonatkozó azonban nem.)

Az R -re tett előbbi feltevésünk mellett tehát \mathfrak{R} -nek a mérése azzal a következménnyel jár, hogy bármely ψ állapotot a mérés megváltoztatja, s a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotok valamelyikébe viszi át, s ezzel együtt $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ közül a megfelelőt kapjuk a mérés eredményeként. E változások valószínűsége tehát egyenlő a $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ mérésének valószínűségével, s így **P.**-ből kiszámítható.

Annak valószínűsége, hogy \mathfrak{R} értéke I -be esik, tehát P . alapján $\|E(I)\psi\|^2$. Így, tekintve, hogy a II. 8. fejezet folytán $E(I) = \sum_{\lambda_n \text{ I-ben}} P_{[\varphi_n]}$, azért

$$P = \|E(I)\psi\|^2 = (E(I)\psi, \psi) = \sum_{\lambda_n \text{ I-ben}} (P_{[\varphi_n]}\psi, \psi) = \sum_{\lambda_n \text{ I-ben}} |(\psi, \varphi_n)|^2.$$

Innen gyanítható, hogy λ_n valószínűsége $|(\psi, \varphi_n)|^2$. Ha I úgy megválasztható, hogy egyetlen λ_m -et tartalmaz, s ez éppen λ_n , akkor ez a fenti képlet egyenes következménye. Különbözik pedig (vagyis, ha λ_n közelében a többi λ_m sűrűn helyezkedik el), például a következőképpen érvelhetünk: legyen $F(\lambda) = 1$, ha $\lambda = \lambda_n$, különben pedig 0. A λ_n keresett várható értéke eszerint $F(\mathfrak{R})$ várható értéke, s így E_2 (vagy E_1 .) miatt $(F(R)\psi, \psi)$ -vel egyenlő. Ám definíció szerint (II. 8. fejezet):

$$(F(R)\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\lambda) d(\|E(\lambda)\psi\|^2),$$

és ha visszagondolunk a *Stieltjes*-integrál definíciójára, könnyen belátható, hogy ez zérus, ha $E(\lambda)\psi$ (λ -ban) folytonos $\lambda = \lambda_n$ -nél és általában egyenlő a (monoton növekvő) $\|E(\lambda)\psi\|^2$ λ -függvény ugrásával a $\lambda = \lambda_n$ pontban. Ez azonban $\|P_{\mathfrak{R}}\psi\|^2$ -tel egyenlő, ahol \mathfrak{R} az $R\psi = \lambda_n\psi$ egyenlet összes megoldásai által kifeszített zárt lineáris sokaság (lásd a II. 8. fejezetet). Esetünkben $\mathfrak{R} = [\varphi_n]$, s így

$$P_n = \|P_{[\varphi_n]}\psi\|^2 = |(\psi, \varphi_n)|^2.$$

Választ adtunk tehát arra a kérdésre, hogy mi történik az olyan \mathfrak{R} mennyiség mérésekor, amelynek R operátorára a fenti feltevéseket tettük. Vigyázzunk! A dolog hogyanjára jelenleg nincs magyarázat. A ψ e nem folytonos átmenete a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotok valamelyikébe (ezek ψ -től függetlenek, ψ csak az eme ugrás $P_n = |(\psi, \varphi_n)|^2$, $n = 1, 2, \dots$ valószínűségében jelenik meg) biztosan nem olyan, amelyet az időtől függő *Schrödinger*-egyenlet ír le. Ez utóbbi mindig ψ folytonos változására vonatkozik, amelynél a végső állapot a ψ egyértelműen meghatározott függvénye (lásd a III. 2. fejezet okfejtését). E szakadékot később igyekszünk majd áthidalni (lásd a VI. fejezetet).¹²⁵

Tegyük fel továbbra is, hogy R spektruma tisztán diszkrét, de ne kössük ki, hogy a sajátértékek egyszeresek. Ismét felírhatjuk a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvényeket és a $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ sajátértékeket, de most ez utóbbiak nem mind különbözőek. Az \mathfrak{R} mérés után most is biztosan olyan φ állapot jön létre, amelyre $R\varphi = \lambda^*\varphi$ (λ^* a mérés eredménye). Következésképpen λ^* valamelyik λ_n -vel egyenlő, de φ -ről csak a következő mondható: legyen $\lambda_{n_1}, \lambda_{n_2}, \dots$ azon λ_n -ek (véges vagy végtelen) sorozata, amelyek λ^* -gal egyenlők. Ekkor

$$\varphi = \sum_v a_v \varphi_{n_v}$$

(ha az összeg végtelen sok tagból áll, akkor $\sum_v |a_v|^2$ -nek végesnek kell lennie). Két ilyen φ ugyanazt az állapotot ábrázolja, ha egymástól csak egy szorzóban különbözik, vagyis ha az $a_1 : a_2 : \dots$ arányok megegyeznek. Így, amint egynél több

n_v van, más szóval, ha λ^* többszörös, a φ -t a mérés után annak eredménye nem határozza meg egyértelműen.

A λ^* valószínűségét pontosan ugyanúgy számítjuk ki, mint előbb (P . vagy E_1 . vagy E_2 . alapján). Azt kapjuk, hogy

$$P(\lambda^*) = \sum_{\lambda_n = \lambda^*} |(\psi, \varphi_n)|^2 = \sum_v |(\psi, \varphi_n)|^2.$$

Ha R spektruma nem tisztán diszkrét, akkor a helyzet a következő:

Az $Rf = \lambda f$ megoldásai az \mathfrak{M}_λ zárt lineáris sokaságot feszítik ki; az összes \mathfrak{M}_λ együtt alkotja \mathfrak{M} -et és a tisztán diszkrét spektrum hiányára jellemző, hogy $\mathfrak{M} \neq \mathfrak{R}_\infty$, vagyis, hogy $\mathfrak{R} = \mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{M} \neq [0]$. (Ezzel és a következőkkel kapcsolatban lásd a II. 8. fejezetet.) A legjobb esetben $\mathfrak{M}_\lambda \neq [0]$ valamely λ sorozatra; e λ -k alkotják R diszkrét spektrumát. Ha megmérjük \mathfrak{M} -et valamely ψ állapotban, akkor annak valószínűsége, hogy a mérés eredménye λ^* , a következő:

$$P(\lambda^*) = \|P_{\mathfrak{M}_{\lambda^*}} \psi\|^2 = (P_{\mathfrak{M}_{\lambda^*}} \psi, \psi).$$

Ezt a legegyszerűbben a korábban alkalmazott és az E_2 -n (vagy E_1 -en) alapuló gondolatmenet és az

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \lambda = \lambda^*, \\ 0, & \text{ha } \lambda \neq \lambda^* \end{cases}$$

függvény segítségével lehet belátni. Annak valószínűsége, hogy \mathfrak{M} értéke valamely, az R diszkrét \mathfrak{B} spektrumába eső λ^* lesz, a következő:

$$P = \sum_{\lambda^* \in \mathfrak{B}\text{-ben}} (P_{\mathfrak{M}_{\lambda^*}} \psi, \psi) = (P_{\mathfrak{M}} \psi, \psi) = \|P_{\mathfrak{M}} \psi\|^2,$$

ez közvetlenül az

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \lambda^* \text{ a } \mathfrak{B}\text{-be esik,} \\ 0, & \text{különben} \end{cases}$$

függvény segítségével is belátható.

Ha azonban \mathfrak{M} -et pontosan mérjük meg, akkor ezután olyan φ áll elő, amelyre $R\varphi = \lambda^* \varphi$, s így a mérés λ^* eredményének \mathfrak{B} -hez kell tartoznia, annak valószínűsége tehát, hogy pontos mérést hajthatunk végre (legfeljebb) $\|P_{\mathfrak{M}} \psi\|^2$. Ez a szám azonban nem mindig 1, ha ψ az \mathfrak{R} eleme, akkor biztosan 0, így pontos mérés nem mindig lehetséges.

Látjuk tehát, hogy az \mathfrak{M} mennyiség akkor és csak akkor mérhető meg mindig (tehát minden ψ állapotban) pontosan, ha spektruma tisztán diszkrét. Ha nincs diszkrét spektrum, akkor viszont csak korlátozott pontossággal mérhető; vagyis a $-\infty < \lambda < +\infty$ számkontinuum $\dots, I^{(-2)}, I^{(-1)}, I^{(0)}, I^{(1)}, I^{(2)}, \dots$ intervallumokra osztható fel (legyenek az osztáspontok $\dots, \lambda^{(-2)}, \lambda^{(-1)}, \lambda^{(0)}, \lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots, I^{(n)} = \{\lambda^{(n)}, \lambda^{(n+1)}\}$; a maximális intervallumhossz: $\varepsilon = \text{Max}(\lambda^{(n+1)} - \lambda^{(n)})$ lesz a mérés pontossága) és meghatározható az az intervallum, amelybe \mathfrak{M} értéke esik. Ez az

utóbbi eljárás matematikailag tovább nyomozható. Legyen $F(\lambda)$ következő függvény (λ'_n az I_n -nek tetszőleges, de a továbbiakban rögzített pontja; $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$):

$$F(\lambda) = \lambda'_n, \quad \text{ha } \lambda \text{ az } I^{(n)}\text{-be esik.}$$

Így \mathfrak{R} közelítő mérése egyenértékű $F(\mathfrak{R})$ pontos mérésével;

$$\begin{aligned} F(R) &= \int_{-\infty}^{+\infty} F(\lambda) dE(\lambda) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \int_{\lambda^{(n)}}^{\lambda^{(n+1)}} F(\lambda) dE(\lambda) = \\ &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \lambda'_n \int_{\lambda^{(n)}}^{\lambda^{(n+1)}} dE(\lambda) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \lambda'_n E(I^{(n)}). \end{aligned}$$

Az $F(R)f = \lambda'_n f$ egyenlet nyilvánvalóan minden olyan f -re érvényes, amely az $E(I^n)$ -hez tartozó zárt lineáris sokasághoz tartozik, ám f nyilván eleme az $F(R)$ -hez tartozó $\mathfrak{R}_{\lambda'_n}$ -nek is, s így

$$P_{\mathfrak{R}_{\lambda'_n}} \geq E(I^n),$$

$$\begin{aligned} P_{\mathfrak{R}} &\geq \sum_{n=-\infty}^{+\infty} P_{\mathfrak{R}_{\lambda'_n}} \geq \sum_{n=-\infty}^{+\infty} E(I^n) = \\ &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (E(\lambda^{(n+1)}) - E(\lambda^{(n)})) = 1 - 0 = 1. \end{aligned}$$

Ebből következik, hogy

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} P_{\mathfrak{R}_{\lambda'_n}} = P_{\mathfrak{R}} = 1, \quad P_{\mathfrak{R}_{\lambda'_n}} = E(I^{(n)}),$$

vagyis $F(R)$ spektruma tisztán diszkrét, s ez a λ'_n -ekből áll.

Így $F(\mathfrak{R})$ pontosan mérhető és annak valószínűsége, hogy értéke λ'_n , vagyis hogy \mathfrak{R} értéke $I^{(n)}$ -be esik:

$$\|P_{\mathfrak{R}_{\lambda'_n}} \psi\|^2 = \|E(I^{(n)}) \psi\|^2,$$

az \mathfrak{R} -re kimondott **P.** állítással összhangban.

Ezt az eredményt fizikailag is megmagyarázhatjuk, s ez azt mutatja, hogy az elmélet az intuitív fizikai nézőponttal összhangban van.

A klasszikus mechanikában a megfigyelés során (nemkvantum körülmények között) minden \mathfrak{R} mennyiséghez pontosan meghatározott értéket rendelünk hozzá minden állapotban. Ugyanakkor azonban jól tudjuk, hogy bármely elképzelhető mérőberendezés az emberi megfigyelő eszközök tökéletlensége folytán (ami például a mutató állásának leolvasásából, vagy a fényképező lemezen a feketedés helyének meghatározásából ered) ezt az értéket csak bizonyos (soha el nem tűnő) hiba határain belül szolgáltatja. E hibát a mérési módszer megfelelő finomításával zérushoz lehet közelíteni, azonban soha sem lesz pontosan zérus. Várható, hogy ez

igaz marad a kvantummechanikában is olyan \mathfrak{R} mennyiségekre, amelyek — az ilyen mennyiségekhez a szokásosan (főleg a kvantummechanika felfedezése előtt) kialakított kép szerint — nem kvantáltak; ilyenek például az elektron *Descartes*-koordinátái (ezek $-\infty$ és $+\infty$ között minden értéket felvehetnek, s operátoraik spektruma folytonos). Az olyan mennyiségekre azonban, amelyek (intuitív elképzelésünk szerint) kvantáltak, az ellenkezője igaz; ezek csak diszkrét értékeket vehetnek fel, s így ezeket elég olyan pontossággal megfigyelni, hogy ne legyen kétséges, hogy melyik „kvantált” értékről van szó. Az ilyen mérési eredmény olyan, mintha „abszolút” pontos lenne. Ha például tudjuk, hogy a hidrogénatom energiája kisebb, mint a második szint energiája, akkor abszolút pontosan ismert az energia, ez ugyanis a legalacsonyabb szint energiája.

A mennyiségeknek e felosztása kvantáltakra és nem kvantáltakra, ahogy a mátrixelmélettel kapcsolatos elemzésünk megmutatta (lásd I. 2. és II. 6. fejezetet), megfelel az \mathfrak{R} mennyiségek aszerinti felosztásának, hogy a megfelelő R operátor spektruma tisztán diszkrét-e, vagy sem. Az előbbiekre és csak az előbbiekre igaz, hogy lehetséges abszolút pontos mérésük, az utóbbiakat csak tetszőleges (de sohasem abszolút) pontossággal lehet megmérni.¹²⁶

(Rámutatunk még arra, hogy a *Hilbert*-térhez nem tartozó „nem igazi”, mesterkéltséggel sajátfüggvény bevezetése — erről tettünk említést az előszóban, I. 3. és II. 8. fejezetben, és különösen a 84. és a 86. jegyzetben — a valóságnak nem oly testhezálló leírása, mint a mienk. Az ilyen módszernél úgy tűnhet, mintha léteznének olyan állapotok, amelyekben folytonos spektrumú mennyiségek bizonyos értékeket pontosan vesznek fel, holott ilyesmi sohasem fordul elő. Bár ilyen idealizációt gyakran hajtottak végre, szerintünk ez elkerülendő mind a fenti érvelés, mind pedig matematikai tarthatatlansága miatt.)

Ezzel a konklúzióval azt a kérdést, hogy mi játszódik le egyetlen mennyiség mérésekor, lezárjuk, és most rátérhetünk több mennyiség egyidejű mérésének problémájára.

Először legyen \mathfrak{R} és \mathfrak{S} két mennyiség, s a nekik megfelelő operátorok legyenek R és S . Feltételezzük, hogy ezek egyszerre mérhetők. Mi következik ebből?

Kezdjük azzal, hogy pontos mérhetőséget tételezünk fel tehát, hogy mind R , mind pedig S spektruma tisztán diszkrét: $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, illetőleg μ_1, μ_2, \dots . A megfelelő két teljes ortonormált függvényrendszer legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ és ψ_1, ψ_2, \dots .

A legegyszerűbb esetet vizsgáljuk először, s így egyelőre feltesszük, hogy a két operátor közül az egyik, mondjuk R , sajátértékei egyszeresek, vagyis, ha $m \neq n$, akkor $\lambda_m \neq \lambda_n$.

Ha \mathfrak{R} -et és \mathfrak{S} -et egyszerre mérjük meg, akkor olyan állapot keletkezik, amelyben mind \mathfrak{R} , mind pedig \mathfrak{S} értéke biztosan az előző mérés eredménye lesz. Legyen e két érték $\lambda_{\bar{m}}$ és $\mu_{\bar{n}}$. Emellett állapotnak ki kell elégítenie az $R\psi = \lambda_{\bar{m}}\psi$, $S\psi = \mu_{\bar{n}}\psi$ összefüggéseket. Az elsőből következik, hogy $\psi = \varphi_{\bar{m}}$ (egy elhagyható numerikus tényezőtől eltekintve), a második szerint $\psi = \sum_v a_v \psi_v$, ha $\mu_{n_1}, \mu_{n_2}, \dots$ azok a μ_n -ek, amelyek $\mu_{\bar{n}}$ -sal egyenlők. Ha a kezdeti állapot φ , akkor $\lambda_{\bar{m}} \varphi_{\bar{m}}$ valószínűsége $|(\varphi, \varphi_{\bar{m}})|^2$. Ha $\varphi = \varphi_{\bar{m}}$, akkor $\bar{m} = m$ biztos, s így mondhatjuk, hogy minden m -re φ_m

valamelyik olyan $\sum a_n \psi_n$ -vel egyezik meg, amelyben a μ_n -k egyenlők; vagyis $S\varphi_m = \bar{\mu}\varphi_m$ (ahol $\bar{\mu} = \mu_{n_1} = \mu_{n_2} = \dots$). Ha tehát $f = \varphi_m$, akkor $RSf = SRf$ (mindkettő $\lambda_m \bar{\mu} \cdot \varphi_m$ -mel egyenlő). Ez azonban a lineáris kombinációkra, s ha R és S folytonos, akkor ezek határpontjaira is, vagyis minden f -re igaz. Tehát R és S egymással felcserélhető.

Ha R és S nem folytonos, akkor a következőképpen okoskodunk. Az R -hez és az S -hez tartozó $E(\lambda)$, illetőleg $F(\mu)$ egységfelbontás meghatározása

$$E(\lambda) = \sum_{\lambda_m \leq \lambda} P_{[\varphi_m]}, \quad F(\mu) = \sum_{\mu_n \leq \mu} P_{[\psi_n]}.$$

Következésképpen $F(\mu)\varphi_m = \varphi_m$ vagy $= 0$ aszerint, hogy μ legalább akkora, mint a fenti $\bar{\mu}$, vagy sem. Továbbá $E(\lambda)\varphi_m = \varphi_m$ vagy $= 0$ aszerint, hogy λ legalább akkora, mint λ_m , vagy sem. Így mindenestre $E(\lambda)F(\mu)\varphi_m = F(\mu)E(\lambda)\varphi_m$, minden φ_m -re, amiből $E(\lambda)$ és $F(\mu)$ felcserélhetősége az előzőekhez hasonlóan következik, s így (lásd a II. 10. fejezetet) R és S is felcserélhető egymással.

A II. 10. fejezet szerint azonban R -nek és S -nek közös teljes ortonormált sajátfüggvényrendszere van, tehát feltehetjük, hogy $\varphi_m = \psi_m$. Mivel $\lambda_m \neq \lambda_n$, ha $m \neq n$, található olyan $F(\lambda)$ függvény, amelyre

$$F(\lambda) = \begin{cases} \mu_n, & \text{ha } \lambda = \lambda_n, \quad n = 1, 2, \dots \\ \text{egyebütt tetszőleges} \end{cases}$$

és ekkor $S = F(R)$, vagyis $\mathfrak{S} = F(\mathfrak{R})$. Más szóval \mathfrak{R} és \mathfrak{S} nemcsak egyidejűleg mérhető, hanem \mathfrak{R} -nek minden mérése egyúttal \mathfrak{S} -nek is mérése, hiszen \mathfrak{S} az \mathfrak{R} -nek függvénye, tehát \mathfrak{S} -et \mathfrak{R} kauzálisan határozza meg.¹²⁷

Áttérünk most arra az általánosabb esetre, midőn R és S sajátértékeinek multiplicitásáról semmit nem kötünk ki. Ilyenkor lényegesen más módszert kell használni.

Tekintsük először az $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ mennyiséget. Az \mathfrak{R} és \mathfrak{S} egyidejű mérése egyúttal $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ mérése is, mert az eredmények összege megadja $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ értékét. Következésképpen $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ várható értéke bármely ψ állapotban nem egyéb, mint \mathfrak{R} és \mathfrak{S} várható értékeinek összege. Vegyük észre, hogy ez attól függetlenül érvényes, hogy \mathfrak{R} és \mathfrak{S} statisztikusan független-e, vagy esetleg valamilyen korreláció van közöttük, hiszen — mint az jól ismert — általánosan érvényes az

„összeg várható értéke = a várható értékek összege”

törvény. Így, ha T az $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ operátora, akkor ez a várható érték egyrészt $(T\psi, \psi)$, másrészt pedig

$$(R\psi, \psi) + (S\psi, \psi) = ((R + S)\psi, \psi),$$

vagyis bármely ψ -re

$$(T\psi, \psi) = ((R + S)\psi, \psi).$$

Tehát $T = R + S$, így $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ operátora $R + S$.¹²⁸ Ugyanígy megmutatható, hogy $a\mathfrak{R} + b\mathfrak{S}$ (a, b valós szám) operátora $aR + bS$. (Ez az első képletből is következik, ha az $F(\lambda) = a\lambda$, $G(\mu) = b\mu$ képletekbe \mathfrak{R} -et és \mathfrak{S} -et, illetőleg R -et és S -et helyettesítünk.)

Az \mathfrak{A} és \mathfrak{B} egyidejű mérése egyben mérése az

$$\frac{\mathfrak{A} + \mathfrak{B}}{2}, \quad \left(\frac{\mathfrak{A} + \mathfrak{B}}{2}\right)^2, \quad \frac{\mathfrak{A} - \mathfrak{B}}{2}, \quad \left(\frac{\mathfrak{A} - \mathfrak{B}}{2}\right)^2,$$

$$\left(\frac{\mathfrak{A} + \mathfrak{B}}{2}\right)^2 - \left(\frac{\mathfrak{A} - \mathfrak{B}}{2}\right)^2 = \mathfrak{A} \cdot \mathfrak{B}$$

mennyiségeknek is. Ezen mennyiségek operátorai (felhasználva azt, hogy ha \mathfrak{I} operátora T , akkor $F(\mathfrak{I})$ operátora $F(T)$) rendre a következők:

$$\frac{R+S}{2}, \quad \left(\frac{R+S}{2}\right)^2, \quad \frac{R-S}{2}, \quad \left(\frac{R-S}{2}\right)^2$$

$$\left(\frac{R+S}{2}\right)^2 - \left(\frac{R-S}{2}\right)^2 = \frac{RS+SR}{2}.$$

Tehát $\mathfrak{A} \cdot \mathfrak{B}$ operátora $\frac{RS+SR}{2}$. Ez minden $F(\mathfrak{A})$ -re és $G(\mathfrak{B})$ -re is igaz (a méréskor ezeket is megmérjük), így $F(\mathfrak{A}) \cdot G(\mathfrak{B})$ operátora

$$\frac{F(R)G(S) + G(S)F(R)}{2}.$$

Legyen az R -hez és az S -hez tartozó egységfelbontás $E(\bar{\lambda})$, illetőleg $F(\bar{\mu})$. Legyen továbbá

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \lambda \leq \bar{\lambda}, \\ 0, & \text{ha } \lambda > \bar{\lambda}, \end{cases}$$

$$G(\mu) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \mu \leq \bar{\mu}, \\ 0, & \text{ha } \mu > \bar{\mu}. \end{cases}$$

Mint tudjuk, $F(R) = E(\bar{\lambda})$, $G(S) = F(\bar{\mu})$, így $F(\mathfrak{A}) \cdot G(\mathfrak{B})$ operátora $\frac{EF+FE}{2}$

(rövidség kedvéért $E(\bar{\lambda})$, $F(\bar{\mu})$ helyébe E -t és F -et írtunk). Tekintve, hogy $F(\mathfrak{A})$ vagy zérus vagy egy, $F(\mathfrak{A})^2 = F(\mathfrak{A})$, s így

$$F(\mathfrak{A}) \cdot (F(\mathfrak{A}) \cdot G(\mathfrak{B})) = F(\mathfrak{A}) \cdot G(\mathfrak{B}).$$

Alkalmazzuk most a szorzási képletünket $F(\mathfrak{A})$ -re és $F(\mathfrak{A}) \cdot G(\mathfrak{B})$ -re (ezek mind egyidejűleg mérhetőek). Így az

$$\frac{E \frac{EF+FE}{2} + \frac{EF+FE}{2} E}{2} = \frac{E^2F + 2EFE + FE^2}{4} = \frac{EF + FE + 2EFE}{4}$$

operátort kapjuk e szorzatra. Ennek $\frac{EF + FE}{2}$ -vel kell egyenlőnek lennie, amelyből következik, hogy

$$EF + FE = 2EFE.$$

Ezt E -vel balról szorozva kapjuk, hogy

$$E^2 + EFE = 2E^2FE, \quad EF \rightarrow EFE = 2EFE, \quad EF = EFE,$$

míg E -vel jobbról szorozva az adódik, hogy

$$EFE + FE^2 = 2EFE^2, \quad EFE + FE = 2EFE,$$

$$FE = EFE,$$

így $EF = FE$. Más szóval minden $E(\bar{\lambda})$ és $F(\bar{\mu})$, tehát R és S felcserélhető egymással.

A II. 10. fejezet alapján az a feltétel, hogy R és S felcserélhetőek, nem jelent egyebet, mint azt, hogy létezik oly T hermitikus operátor, amelynek mind R , mind pedig S függvénye: $R = F(T)$, $S = G(T)$. Ha ez az operátor a \mathfrak{I} mennyiséghez tartozik, akkor $\mathfrak{R} = F(\mathfrak{I})$, $\mathfrak{S} = G(\mathfrak{I})$. Ez azonban az egyidejű mérhetőség elégséges feltétele is, hiszen \mathfrak{I} mérése (amely abszolút pontos, mert \mathfrak{I} spektruma tisztán diszkrét, lásd a II. 10. fejezetet) egyúttal az \mathfrak{R} és az \mathfrak{S} függvények mérési eredményét is szolgáltatja. Ezért \mathfrak{R} és \mathfrak{S} felcserélhetősége \mathfrak{R} és \mathfrak{S} egyidejű mérhetőségének szükséges és elégséges feltétele.

Ha több (de véges számú) \mathfrak{R} , \mathfrak{S} , ... mennyiség van adva, a megfelelő operátorok R , S , ... és ismét az abszolút pontos mérhetőséget követeljük meg, akkor az egyidejű mérhetőséggel kapcsolatban a helyzet a következő. Ha valamennyi \mathfrak{R} , \mathfrak{S} , ... mennyiség egyszerre mérhető, akkor a belőlük kiválasztott bármely pár is egyszerre mérhető. Ez azt jelenti, hogy az R , S , ... operátoroknak páronként felcserélhetőnek kell lenniük. Fordítva, ha R , S , ... felcserélhetőek egymással, akkor a II. 10. fejezet alapján létezik olyan T operátor, amelynek mindegyik a függvénye: $R = F(T)$, $S = G(T)$, ... és így a megfelelő \mathfrak{I} mennyiségre $\mathfrak{R} = F(\mathfrak{I})$, $\mathfrak{S} = G(\mathfrak{I})$, ... , a \mathfrak{I} pontos mérése (\mathfrak{I} spektruma ismét tisztán diszkrét, lásd a II. 10. fejezetet) következképpen egyidejű mérése az \mathfrak{R} , \mathfrak{S} , ... mennyiségeknek is. Leszögezhetjük tehát, hogy R , S , ... felcserélhetősége szükséges és elégséges feltétele \mathfrak{R} , \mathfrak{S} , ... egyidejű mérhetőségének.

Tekintsünk most olyan méréseket, amelyek nem abszolút pontosak, hanem csupán előre megadott (tetszőleges) pontosságúak. Ekkor R , S , ... spektruma már nem szükségképpen tisztán diszkrét.

Mivel \mathfrak{R} , \mathfrak{S} , ... korlátolt pontosságú mérése tulajdonképpen ugyanazt jelenti, mint $F(\mathfrak{R})$, $G(\mathfrak{S})$, ... abszolút pontosságú mérése — itt $F(\lambda)$, $G(\lambda)$, ... azok a függvények, melyek megalkotásáról e szakasz elején már szóltunk (egyetlen korlátozott pontosságú mérés tárgyalásakor természetesen csak $F(\lambda)$ -t adtuk meg) —, \mathfrak{R} , \mathfrak{S} , ... biztosan egyidejűleg mérhető, ha $F(\mathfrak{R})$, $G(\mathfrak{S})$, ... egyidejűleg mérhető és természetesen abszolút pontossággal. Ez utóbbi azonban azzal egyenértékű, hogy $F(R)$, $G(S)$, ... felcserélhetőek egymással, amely R , S , ... felcserélhetőségének következménye, ez tehát mindenesetre elégséges feltétel.

Fordítva, ha $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ egyidejűleg mérhető, akkor a következőképpen járunk el. Az \mathfrak{R} elegendően pontos mérése alapján meg tudjuk mondani, hogy értéke nagyobb-e $\bar{\lambda}$ -nál, vagy sem (a „korlátozott pontosság” fogalmának elemzését lásd a 126. jegyzetben). Ekkor egy $F(\lambda)$ függvény definiálható, $F(\lambda) = 1$ ha $\lambda \leq \bar{\lambda}$ és 0 ha $\lambda > \bar{\lambda}$, s így $F(\mathfrak{R})$ abszolút pontossággal mérhető. Ugyanígy, ha $G(\mu) = 1$ $\mu \leq \bar{\mu}$ esetén és 0, ha $\mu > \bar{\mu}$, akkor $G(\mathfrak{S})$ is abszolút pontossággal — és $F(\mathfrak{R}), G(\mathfrak{S})$ egyszerre is — mérhető. Így $F(\mathfrak{R})$ és $G(\mathfrak{S})$ felcserélhetőek egymással. Legyen $E(\lambda)$ és $F(\mu)$ az R -hez, illetőleg az S -hez tartozó egységfelbontás. Ekkor $F(\mathfrak{R}) = E(\bar{\lambda}), G(\mathfrak{S}) = F(\bar{\mu})$, így $E(\bar{\lambda})$ és $F(\bar{\mu})$ minden $\bar{\lambda}, \bar{\mu}$ esetén felcserélhető egymással, következésképpen R és S felcserélhetőek, s mivel R, S, \dots közül valamennyi párra ez igaz, R, S, \dots mind felcserélhetőek egymással. E feltétel tehát szükséges is.

Látjuk tehát, hogy tetszőleges (véges) számú $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ mennyiség egyidejű mérhetőségének jellemző feltétele a megfelelő R, S, \dots operátorok felcserélhetősége. Valóban, ez mind abszolút pontos, mind pedig tetszőlegesen pontos mérésre érvényes. Az első esetben azonban azt is megköveteljük, hogy az operátorok spektruma legyen tisztán diszkrét; ez az abszolút pontos mérésekre jellemző.

Előállítottuk most annak matematikai bizonyítását, hogy P . a lehető legmesszebbmenő állítás, amely ebben az (a P . állítást is tartalmazó) elméletben általában kimondható. Ez annak a következménye, hogy csak az R_1, \dots, R_l operátorok felcserélhetőségét kell feltételezni. E feltétel nélkül semmit sem mondhatunk $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ egyidejű mérésének eredményéről, mivel enélkül e mennyiségek egyidejű mérése nem lehetséges.

4. A határozatlansági relációk

Az előző szakaszban egyetlen mennyiség, vagy több, egyszerre mérhető mennyiség mérési folyamatára vonatkozó értékes ismeretek birtokába jutottunk. Most azonban az egyidejűleg nem mérhető mennyiségekre kell az eljárást kidolgozni, ha kíváncsiak vagyunk ezek statisztikájára egy és ugyanazon (φ állapotú) rendszerben.

Legyen tehát \mathfrak{R} és \mathfrak{S} ilyen mennyiség, és legyen R , illetőleg S ezeknek (nem felcserélhető!) az operátora. E feltevés ellenére létezhet olyan állapot, amelyben mindkét mennyiség értéke élesen (tehát 0 szórással) meghatározott, ilyenek például a közös sajátfüggvények, ezekből azonban nem lehet teljes ortonormált rendszert kiválasztani, hiszen ekkor R és S felcserélhető lenne egymással. [Lásd a II. 8. fejezetben megadott eljárást a megfelelő $E(\lambda)$ és $F(\lambda)$ egységfelbontások megalkotására. Ha $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ az említett teljes ortonormált rendszer, akkor mind $E(\lambda)$, mind pedig $F(\lambda)$ a $P_{[\varphi_n]}$ -k összege, s így biztosan felcserélhetőek egymással, hiszen a $P_{[\varphi_n]}$ -k is azok.] Hogy ez mit jelent, az könnyen látható. Az ilyen φ -k által kifeszített zárt, lineáris \mathfrak{R} sokaságnak kisebbnek kell lennie \mathfrak{R}_∞ -nél, mert ha egyenlő volna vele, akkor a kívánt teljes ortonormált rendszert pontosan ugyanúgy felépíthetnénk, amint azt a II. 6. fejezet elején egyetlen operátor esetén megtettük.

Az \mathfrak{R} -hez tartozó állapotokban azonban \mathfrak{R} és \mathfrak{S} egyidejűleg mérhető. Ezt legegyszerűbben úgy mutathatjuk meg, hogy modellt vázolunk ilyen egyidejű mérésre. Az R és S közös sajátfüggvényei kifeszítik \mathfrak{R} -et, létezik tehát az ilyen φ -k olyan ortonormált $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszere, amely ugyancsak kifeszíti \mathfrak{R} -et. (Ezt is azzal a módszerrel alkothatjuk meg, amelyet már a II. 6. fejezetben ismertettünk.) A $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ ortonormált rendszerre terjeszthető ki az $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{R}$ sokaságot kifeszítő ψ_1, ψ_2, \dots ortonormált rendszer hozzátételével. Legyen $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ egymástól különböző számok sorozata és legyen T meghatározása a következő:

$$T\left(\sum_n x_n \varphi_n + \sum_n y_n \psi_n\right) = \sum_n \lambda_n x_n \varphi_n + \sum_n \mu_n y_n \psi_n$$

és legyen \mathfrak{I} a T -nek megfelelő mennyiség.

A \mathfrak{I} mérése (amint azt a III. 3. fejezetből tudjuk) a $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ állapotok közül valamelyiket fogja létrehozni. Ha ez az állapot valamelyik φ_n (amiről megbizonyosodhatunk, ha a mérés eredménye λ_n), akkor \mathfrak{R} és \mathfrak{S} értékét is ismerjük, hiszen \mathfrak{R} -nek és \mathfrak{S} -nek feltételeink szerint élesen meghatározott értéke van φ_n -ben, így megjósolhatjuk, hogy \mathfrak{R} , ill. \mathfrak{S} egy rögtön ezután végrehajtott mérésében biztosan ezeket az értékeket fogjuk megkapni. Ha azonban ψ_n jön létre, akkor semmi ilyesmit nem tudunk mondani (ψ_n nem \mathfrak{R} -hez tartozik, így \mathfrak{R} és \mathfrak{S} a ψ_n -ben nincsen élesen meghatározva). Annak valószínűsége, hogy ψ_n -et kapjuk meg, mint tudjuk, $(P_{[\psi_n]} \varphi, \varphi)$ és annak valószínűsége, hogy akármelyik ψ_n -et kapjunk ($n=1, 2, \dots$), a következő:

$$\sum_n (P_{[\psi_n]} \varphi, \varphi) = (P_{\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{R}} \varphi, \varphi) = \|P_{\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{R}} \varphi\|^2 = \|\varphi - P_{\mathfrak{R}} \varphi\|^2.$$

Ha φ az \mathfrak{R} -hez tartozik, akkor $\varphi = P_{\mathfrak{R}} \varphi$, tehát e valószínűség zérus, vagyis \mathfrak{R} és \mathfrak{S} ekkor biztosan egyidejűleg mérhető.¹²⁹

Minket most az egyszerre nem mérhető mennyiségek érdekelnek, s így feltesszük, hogy az $\mathfrak{R} = (0)$ szélsőséges eset valósul meg, vagyis, hogy \mathfrak{R} és \mathfrak{S} egyetlen állapotban sem mérhető egyidejűleg, vagy ismét más szóval, hogy R -nek és S -nek nincs közös sajátfüggvénye.

Legyen $E(\lambda)$ és $F(\lambda)$ az R , illetőleg S egységfelbontása. Az R és S várható értéke a φ állapotban, mint azt a III. 1. fejezetből tudjuk:

$$\rho = (R\varphi, \varphi), \quad \sigma = (S\varphi, \varphi),$$

szórásuk, vagyis $(\mathfrak{R} - \rho)^2$, $(\mathfrak{S} - \sigma)^2$ várható értéke pedig (lásd az abszolút pontos mérés elemzését a III. 3. fejezetben) a következő:

$$\varepsilon^2 = ((R - \rho \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = \|(R - \rho \cdot 1)\varphi\|^2 = \|R\varphi - \rho\varphi\|^2,$$

$$\eta^2 = ((S - \sigma \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = \|(S - \sigma \cdot 1)\varphi\|^2 = \|S\varphi - \sigma\varphi\|^2.$$

A szokásos átalakítás után azt kapjuk, hogy¹³⁰

$$\varepsilon^2 = \|R\varphi\|^2 - (R\varphi, \varphi)^2, \quad \eta^2 = \|S\varphi\|^2 - (S\varphi, \varphi)^2$$

(a $\|\varphi\|=1$ miatt a Schwarz-egyenlőtlenség, vagyis a II. 1. fejezet 1. Tétéle azt mutatja, hogy a két bal oldal nemnegatív). Itt felmerül a következő kérdés: tekintve, hogy ε és η együtt nem tűnhet el, viszont külön ε és külön η tetszőlegesen kicsinnyé tehető (\Re és \Im külön-külön tetszőleges pontossággal, esetleg abszolút pontosan is mérhető), léteznek-e olyan összefüggések ε és η között, amelyek gátat szabnak annak, hogy ezek egyszerre váljanak tetszőlegesen kicsinnyé és milyen alakúak ezek az összefüggések?

Az ilyen összefüggések létezését HEISENBERG fedezte fel.¹³¹ Ezek igen fontosak a természet kvantummechanikai leírásában fellelhető határozatlanságok ismereténél a szempontjából. Ezek „határozatlansági relációk” néven ismeretesek. Először a legfontosabb ilyen reláció matematikai levezetését adjuk meg, majd visszatérünk alapvető jelentőségű kapcsolatára a kísérlettel.

A mátrixelméletben fontos szerepet játszott a

$$PQ - QP = \frac{h}{2\pi i} \cdot 1$$

felcserélési tulajdonságú P és Q operátor, ezeket kapcsoltuk össze a koordinátával és annak konjugált impulzusával (lásd az I. 2. fejezetet), vagy általánosabban, bármely két olyan mennyiséggel, amelyek egymás kanonikus konjugáltjai (lásd például a 2. jegyzetben említett irodalmat). Vizsgáljunk meg hát bármilyen P és Q hermitikus operátort, amelyre

$$PQ - QP = a \cdot 1.$$

[Tekintve, hogy $(PQ - QP)^* = QP - PQ$, azért $(a \cdot 1)^* = \bar{a} \cdot 1 = -a \cdot 1$, tehát $\bar{a} = -a$, más szóval a tisztán imaginárius. Eme operátoregyenlőségbe nem kell feltétlenül beleírni a két oldal értelmezési tartományának egyenlőségét is: $PQ - QP$ nincs feltétlenül mindenütt értelmezve.] Bármely φ állapotra tehát

$$2\text{Im}(P\varphi, Q\varphi) = -i[(P\varphi, Q\varphi) - (Q\varphi, P\varphi)] =$$

$$= -i[(QP\varphi, \varphi) - (PQ\varphi, \varphi)] = (i(PQ - QP)\varphi, \varphi) = ia \cdot \|\varphi\|^2.$$

Legyen $a \neq 0$, akkor (II. 1. 1. Tétéle)

$$\|\varphi\|^2 = -\frac{2i}{a} \text{Im}(P\varphi, Q\varphi) \leq \frac{2}{|a|} |(P\varphi, Q\varphi)| \leq \frac{2}{|a|} \|P\varphi\| \cdot \|Q\varphi\|,$$

így, ha $\|\varphi\|=1$, akkor

$$\|P\varphi\| \cdot \|Q\varphi\| \geq \frac{|a|}{2}.$$

Mivel a $P - \rho \cdot 1$, $Q - \sigma \cdot 1$ felcserélési tulajdonsága ugyanilyen, tehát az előbbihez hasonlóan kapjuk, hogy

$$\|P\varphi - \rho\varphi\| \cdot \|Q\varphi - \sigma\varphi\| \geq \frac{|a|}{2}.$$

Bevezetve a

$$\rho = (P\varphi, \varphi), \quad \sigma = (Q\varphi, \varphi)$$

középértéket és az

$$\varepsilon^2 = \|P\varphi - \rho\varphi\|^2, \quad \eta^2 = \|Q\varphi - \sigma\varphi\|^2$$

szórásnégyzetet, írhatjuk tehát, hogy

$$(U.) \quad \varepsilon\eta \geq \frac{|a|}{2}.$$

Ahhoz, hogy itt az egyenlőséggel legyen érvényes, az szükséges és elégséges, hogy a levezetés során felhasznált \leq egyenlőtlenségeknél mindenütt egyenlőséggel forduljon elő. Ha tehát $P' = P - \rho \cdot 1$, $Q' = Q - \sigma \cdot 1$, akkor

$$-\frac{i|a|}{a} \operatorname{Im} (P'\varphi, Q'\varphi) = |(P'\varphi, Q'\varphi)| = \|P'\varphi\| \cdot \|Q'\varphi\|.$$

A II. 1. fejezet 1. Tétele szerint a második egyenlőség azt jelenti, hogy $P'\varphi$, $Q'\varphi$ egymástól csupán állandó tényezőben különbözik és tekintve, hogy $\|P'\varphi\| \cdot \|Q'\varphi\| \geq \frac{|a|}{2}$, $P'\varphi \neq 0$ és $Q'\varphi \neq 0$, tehát $P'\varphi = cQ'\varphi$, ahol $c \neq 0$. Az első egyenlet miatt azonban $(P'\varphi, Q'\varphi) = c\|Q'\varphi\|^2$ tisztán imaginárius és benne i együtthatójának ugyanolyan az előjele, mint (a valós) $\frac{-i|a|}{a}$ előjele, vagyis $\frac{a}{i}$ -ével ellentétes. Ily

módon $c = i\gamma$, γ valós és ≥ 0 aszerint, hogy $\frac{a}{i} \leq 0$. Következésképpen

$$(Eq.) \quad P'\varphi = i\gamma Q'\varphi, \quad \gamma \text{ valós és } \leq 0 \text{ aszerint, hogy } ia \leq 0.$$

A ρ és σ meghatározása megköveteli $(P'\varphi, \varphi) = 0$ és $(Q'\varphi, \varphi) = 0$ teljesülését. Ez (Eq.) következménye, hiszen a $(P'\varphi, \varphi) = i\gamma(Q'\varphi, \varphi)$ egyenlőség bal oldalán valós, jobb oldalán pedig tiszta imaginárius mennyiség áll, tehát mindkét oldalnak el kell tűnnie, s így a fenti egyenletek kielégülnek. Meg kell még határozni ε -t és η -t. Az előbbiek szerint

$$\varepsilon : \eta = \|P'\varphi\| : \|Q'\varphi\| = |c| = |\gamma|,$$

$$\varepsilon\eta = \frac{|a|}{2},$$

így, lévén mind ε , mind pedig η pozitív, kapjuk, hogy

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{|a| \cdot |\gamma|}{2}}, \quad \eta = \sqrt{\frac{|a|}{2|\gamma|}}.$$

A kvantummechanikában $a = \frac{h}{\lambda\pi i}$, tehát (U.) miatt

$$(U'.) \quad \varepsilon\eta \geq \frac{h}{4\pi}.$$

Az (Eq.) abban az esetben, amikor P és Q a Schrödinger-féle elmélet operátorai, tehát $P = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \dots$, $Q = q \dots$ (feltételezzük, hogy a vizsgált rendszer egy szabadsági fokú és q a koordináta, lásd az I. 2. fejezetet), a következőt adja:

$$\left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} - \rho \right) \varphi = i\gamma(q - \sigma) \varphi.$$

Ám $ia = \frac{\hbar}{2\pi} > 0$, tehát $\gamma > 0$, így

$$\frac{\partial}{\partial q} \varphi = \left\{ -\frac{2\pi}{\hbar} \gamma \cdot q + \frac{2\pi}{\hbar} \gamma \cdot \sigma + \frac{2\pi}{\hbar} \rho \cdot i \right\} \varphi;$$

vagyis

$$\varphi = e^{\int \left\{ -\frac{2\pi}{\hbar} \gamma \cdot q + \frac{2\pi}{\hbar} \gamma \cdot \sigma + \frac{2\pi}{\hbar} \rho \cdot i \right\} dq} = C e^{-\frac{\pi\gamma}{\hbar} q^2 + \frac{2\pi\gamma\sigma}{\hbar} q + \frac{2\pi\rho}{\hbar} iq} = C' e^{-\frac{\pi\gamma}{\hbar} (q - \sigma)^2 + \frac{2\pi\rho}{\hbar} iq}.$$

Mivel $\gamma > 0$,

$$\|\varphi\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq$$

valóban véges. A C' meghatározására $\|\varphi\| = 1$ szolgál:

$$\|\varphi\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq = |C'|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\pi\gamma}{\hbar} (q - \sigma)^2} dq =$$

$$= |C'|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi\gamma}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx =$$

$$= |C'|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi\gamma}} \sqrt{\pi} = |C'|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2\gamma}} = 1,$$

$$|C'| = \left(\frac{2\gamma}{\hbar} \right)^{1/4}.$$

A fizikai szempontból érdektelen egységnyi abszolút értékű tényező elhagyásával tehát

$$C' = \left(\frac{2\gamma}{\hbar} \right)^{1/4},$$

tehát

$$\varphi = \varphi(q) = \left(\frac{2\gamma}{\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{\pi\gamma}{\hbar} (q - \sigma)^2 + \frac{2\pi\rho}{\hbar} iq}.$$

Az ε -t és η -t az

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{h\gamma}{4\pi}}, \quad \eta = \sqrt{\frac{h}{4\pi\gamma}}$$

adja meg, ezek az $\varepsilon\eta = \frac{h}{4\pi}$ feltételtől eltekintve tetszőlegesen, hiszen γ a 0 és $+\infty$ között változhat. Ez azt jelenti, hogy φ -ben minden olyan ρ , σ , ε , η számnegyese előfordulhat, amelyre $\varepsilon\eta = \frac{h}{4\pi}$. Az ilyen φ -ket először HEISENBERG vizsgálta meg és a

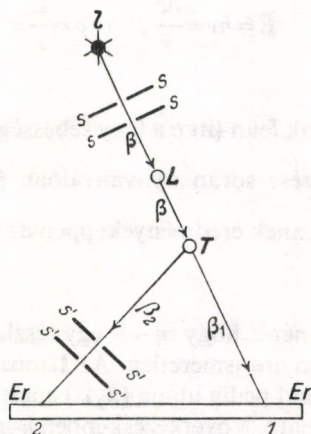
kvantummechanikai helyzetek értelmezésére használta fel. E φ -k ilyen célra különösen alkalmasak, mert ezek valószínűsítik meg a klasszikus mechanika (ahol p -nek és q -nak nincs szórása) legnagyobb mérvű (kvantummechanikai) közelítését és ezekben ε -ra és η -ra további korlátozás nincs. (Lásd a 131. jegyzet hivatkozását.)

Az előző megfontolásaink során a határozatlansági összefüggéseknek csupán egyik, nevezetesen a formális vonatkozásában mélyedtünk el, ezeket a teljes megértéshez még egy további szempontból, tudniillik a közvetlen fizikai tapasztalat oldaláról is meg kell vizsgálni. A határozatlansági összefüggések viszonya a közvetlen tapasztalattal ugyanis egyszerűbben és könnyebben érthető, mint sok más tény, amelyre a kvantummechanikát eredetileg alapozták, így az előző, teljesen formális levezetés nem helyezi ezeket az összefüggéseket a megfelelő megvilágításba. Mélyebb átgondolásuk azért is szükséges, mert az első pillantásra az a benyomásunk támadhat, hogy ellentmondásba keveredtünk az egyszerű intuitív nézőponttal: további megfontolás nélkül a józan ész számára érthetetlen, hogy az anyagi test helyzete és sebessége (azaz koordinátái és impulzusa) miért nem mérhető egyszerre tetszőleges pontossággal, ha elég pontos mérőberendezések állnak rendelkezésre. Így az (esetleg csak gondolat kísérlet formájában) elképzelhető legpontosabb mérési folyamatok egzakt elemzésével kell megvilágítanunk, hogy ez valóban nem lehetséges. Az elektrodinamika, a hullámoptika és az elemi atomi folyamatok jól ismert törvényei éppen ott gördítenek a pontos mérés útjába komoly akadályokat, ahol ilyen mérésre a határozatlansági összefüggések miatt szükség van. Valójában ez már a mérési folyamatok klasszikus (tehát nem kvantumelméleti) vizsgálata során is felderíthető. És elvi szempontból igen fontos; így kitűnik ugyanis, hogy a látszólag paradox határozatlansági relációk nem mondanak ellent a klasszikus tapasztalatoknak, tehát olyanoknak, amelyeknél a kvantumjelenségek megértéséhez korábbi gondolkodásunk lényeges megváltoztatására nincs szükség. Az ilyen klasszikus tapasztalatokra a kvantummechanika korrektségétől függetlenül is támaszkodhatunk. Ezek azok, amelyek hétköznapi, intuitív gondolkodásunk számára egyedül hozzáférhetők.¹³²

Meg kell tehát mutatnunk, hogy ha p és q kanonikusan konjugált mennyiségek és a rendszer olyan állapotban van, amelyben p értékét ε pontossággal lehet megadni (vagyis p mérésének hibája ε), akkor q -t nem lehet az $\eta = \frac{h}{4\pi}$: ε hibánál pontosabban

megmérni. Másként fogalmazva, p -nek ε pontosságú mérése q értékének $\eta = \frac{h}{4\pi} : \varepsilon$ nagyságú határozatlanságával jár együtt.

Természetesen az ilyen nagyon kvalitatív megfontolásban nem lehet elvárni, hogy mindenre pontosan és részletesen kitérjünk. Így $\varepsilon \cdot \eta = \frac{h}{4\pi}$ helyett csak azt tudjuk majd megmutatni, hogy a legpontosabb mérésben (vagyis h nagyságrendjébe eső értékekkel dolgozva) $\varepsilon \eta \sim h$. Jellemző példaként a T részecske helyzet (koordináta) — impulzus konjugált párosát tekintjük.^{1,33}



1. ábra

Először a helymeghatározást vizsgáljuk meg. Ezt úgy végezzük el, hogy ránézünk T-re, vagyis megvilágítjuk és a szórt fény abszorbeálódik a szemünkben. Tehát az L fényforrás a T irányába kibocsát egy L fénykvantumot és az T-vel ütközve áttér a $\beta\beta_1$ egyenes pályáról $\beta\beta_2$ -re, útjának végén elnyelődik az Er ernyőn (ez jelenti a szemet vagy a fényképező lemezt, 1. ábra). A mérés lényege az, hogy megfigyeljük L becsapódását, mégpedig nem az 1 pontban (ez a nem eltérített $\beta\beta_1$ pálya vége), hanem 2 -ben (ez $\beta\beta_2$ vége). Ahhoz azonban, hogy ebből az ütközés (tehát T) helyét meghatározzuk, β és β_2 irányát (tehát L irányát az ütközés előtt és után) is ismerni kell. Ezt az ss és az $s's'$ résrendszer közbeiktatásával érhetjük el. (Ilyen módon voltaképpen nem T koordinátáját mérjük meg, hanem választ kapunk arra a kérdésre, hogy e koordináta értéke az-e, ami a β és a β_2 egyenesek metszésének felel meg. Ez az érték tetszés szerint választható meg a rések megfelelő elrendezésével. Több ilyen behatárolás, tehát további ss és $s's'$ rések használata a még pontosabb koordinátaméréssel egyenértékű.) Mekkora e helymérés pontossága?

A mérésnek az optikai képződés törvényeiből eredő alapvető korlátai vannak. Valóban, λ hullámhosszú fényvel λ -nál kisebb tárgyakat lehetetlen leképezni, sőt a szóródást még annyira sem lehet csökkenteni, hogy egyáltalán valamilyen torz képről beszélhessünk. Felhívjuk a figyelmet arra, hogy nem hű optikai képet

követeltünk meg, hiszen L elhajlása elegendő T helyének meghatározásához. Az ss és $s's'$ rés azonban nem lehet λ -nál keskenyebb, különben L csak nagy diffrakcióval tud áthaladni rajtuk, s ilyenkor interferenciacsík-rendszer alakul ki és az ss , $s's'$ réseket összekötő vonalról, tehát az ezeken áthaladó fénysugár β és β_2 irányáról semmit sem tudunk mondani. Ebből következik, hogy az L lövedékkel sohasem lehet λ -nál pontosabban célozni és találni.

A λ hullámhossz tehát a koordináta mérési hibájának is mértéke: $\varepsilon \sim \lambda$. Az L további adata a ν frekvencia, az \bar{E} energia és a \bar{p} impulzus, és ezek között a

$$\nu = \frac{c}{\lambda}, \quad \bar{E} = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \quad \bar{p} = \frac{\bar{E}}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

jól ismert összefüggések állnak fenn (itt c a fény sebessége).¹³⁴ Így $\bar{p} \sim \frac{h}{\varepsilon}$. Az L és T nem pontosan ismert ütközése során nyilvánvalóan \bar{p} , vagyis $\frac{h}{\varepsilon}$ nagyságrendű impulzusváltozás történik. Ennek eredményeképpen az impulzus bizonytalansága $\eta \sim \frac{h}{\varepsilon}$.

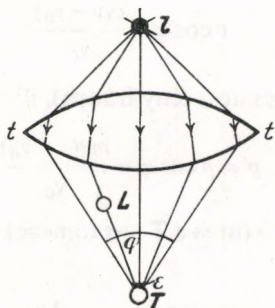
Ebből arra következtethetnénk, hogy $\varepsilon\eta \sim h$, egy részleten azonban átsiklottunk. Az ütközés ugyanis nem ennyire ismeretlen. Az L mozgásának irányát ismerjük mind az ütközés előtt (β), mind pedig utána (β_2). Ismert az impulzus is, és a T -nek átadott impulzus is kiszámítható. Következésképpen η -nak nem \bar{p} a mértéke, hanem inkább a β és a β_2 sugarak bizonytalanságából kell η -t kiszámítani. Pontosabban megállapítható az összefüggés a T tárgy „megcélzása” és az iránybizonytalanság között, ha az ss résnél jobb fókuszáló berendezést, nevezetesen lencsét használunk. Ekkor a mikroszkóp jól ismert elméletét alkalmazhatjuk. Eszerint ε lineáris méretű felület megvilágításához (tehát ahhoz, hogy T -t az L ε pontossággal találja el) olyan λ hullámhossz és φ apertúra szükséges, amelyekre a

$$\frac{\lambda}{2 \sin \frac{\varphi}{2}} \sim \varepsilon$$

összefüggés érvényes (2. ábra).¹³⁵ Az L impulzusának irányáról csak annyit tudunk, hogy $\frac{\varphi}{2}$ és $-\frac{\varphi}{2}$ közé esik, s ez szabja meg eme impulzus tt -komponensének bizonytalanságát. E határozatlanság tehát

$$2 \sin \frac{\varphi}{2} \cdot \bar{p} = \frac{\lambda}{\varepsilon} \cdot \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\varepsilon}.$$

Ez azonban η igazi mértéke, tehát ismét azt kapjuk, hogy $\eta \sim \frac{h}{\varepsilon}$.



2. ábra

Ez a példa a határozatlansági összefüggés lényegét világítja meg: ahhoz, hogy pontosan célozzunk, nagy φ apertúrára és rövid hullámhosszra van szükség, így a fénykvantum impulzusa igen nagy, de egyúttal erősen határozatlan lesz, így a T tárggyal nagyon határozatlan, nagymértékben ellenőrizhetetlen ütközések játszódnak le (ez egyébként a *Compton*-effektus). Ezért T impulzusa szórni fog.

Tekintsük most a kiegészítő mérést: a sebesség (impulzus) mérést. Először is meg kell jegyeznünk, hogy T sebességének mérésére a természetes módszer az, hogy két időpontban, mondjuk 0-ban és t -ben megmérjük a helyét és a koordináták különbségét elosztjuk t -vel. Ekkor azonban a 0, t időintervallumban a sebességnek állandónak kell lennie, ha közben megváltozik, akkor e változás a fent számított átlagos sebesség és mondjuk a t pillanatban a tényleges sebesség közötti eltérés, tehát a mérés határozatlanságának mértéke is. Az ε pontosságú koordinátamérés tulajdonképpen nem befolyásolja az átlagos impulzus mérésének pontosságát,

hiszen t tetszőlegesen nagyra választható. Számolnunk kell azonban a $\frac{h}{\varepsilon}$ nagyságú impulzusszórással; a végső impulzus is (az átlagos impulzussal összehasonlítva)

$\eta = \frac{h}{\varepsilon}$ mértékben ingadozni fog. Az ilyen eljárással tehát $\varepsilon\eta \sim h$. Ennél jobb

eredményt — ha egyáltalán kaphatunk — csak olyan impulzusmérés során kaphatunk, amely nincs kapcsolatban helyzetméréssel. Ilyen mérés valóban lehetséges, a csillagászatban gyakran használnak ilyen, az úgynevezett *Doppler*-effektuson alapuló mérést.

A *Doppler*-effektus, amint az jól ismert, a következő. Ha a v sebességgel mozgó T test (e mozgó testen mérve) ν_0 rezgésszámú fényt bocsát ki, akkor nyugvó megfigyelő ν rezgésszámot fog észlelni; ν a $(\nu - \nu_0)/\nu_0 = v \cos \varphi/c$ képletből számítható ki. (Itt φ a mozgás és az emisszió iránya közötti szög. E képlet nemrelativisztikus, vagyis csak kicsiny v/c esetén igaz, ez azonban könnyen helyesbíthető.) A sebesség tehát meghatározható, ha v -t megmérjük és ν_0 ismert — ez utóbbi valamelyik elem ismert színképvonala lehet. Pontosabban, a megfigyelő irányába eső

$$v \cos \varphi = \frac{c(v - v_0)}{v_0}$$

sebességkomponens (a kibocsátott fény iránya), illetőleg a megfelelő

$$p' = p \cos \varphi = \frac{mc(v - v_0)}{v_0}$$

impulzuskomponens mérhető (itt m a T test tömege). A p' szórása nyilván v -nek Δv szórásától függ:

$$\eta = \frac{mc \Delta v}{v_0} = mc \frac{\Delta v}{v}$$

A T impulzusa természetesen attól is megváltozik, hogy v frekvenciájú (tehát $\bar{p} = h\nu/c$ impulzusú) fénykvantumot bocsát ki, ennek $h\Delta\nu/c$ bizonytalansága általában azonban elhanyagolható $mc \Delta v/v$ mellett.¹³⁶

A v -t interferenciamódszerrel mérik, az ilyen jellegű mérés azonban csak tisztán monokromatikus hullámvonulat esetében ad teljesen éles v értéket eredményül. Az

ilyen hullámvonulat alakja a következő: $a \sin \left[2\pi \left(\frac{q}{\lambda} - vt \right) + \alpha \right]$ (itt q a koordináta, t

az idő, a az amplitúdó, α pedig a fázis), ez a kifejezés az elektromos és mágneses térerősség akármilyen komponensére érvényes, és mind térben, mind időben az egész végtelen tartományban nem zérus. Ezt elkerülendő, e kifejezést (mely az

$a \sin \left[2\pi v \left(\frac{q}{c} - t \right) + \alpha \right]$ alakban is írható, $\lambda = c/v$) olyan $F \left(\frac{q}{c} - t \right)$ -vel kell helyettesí-

teni, amely argumentumának csak véges tartományában nem tűnik el. Ha a fényforrás ilyen alakú, akkor a jól ismert *Fourier*-analízist elvégezve:

$$F(x) = \int_0^{+\infty} a_v \sin(2\pi vx + \alpha_v) dv.$$

Az interferenciakép ilyenkor minden olyan v -t kimutat, amelyre $a_v \neq 0$. Valóban a $v, v + dv$ frekvenciatartomány relatív intenzitása $a_v^2 dv$. A v szórását, Δv -t, ebből az eloszlásból kell kiszámítani.

Ha τ a hullámvonulat hossza x -ben, vagyis t -ben és q -ban a megfelelő hosszúság τ ,

illetőleg $c\tau$, akkor belátható, hogy v szórása körülbelül $\frac{1}{\tau}$.¹³⁷ A hely bizonytalansá-

ga az ilyen mérési módszernél abból ered, hogy a T test $\frac{h\nu}{c}$ nagyságú visszalökődést

sz szenved el (a megfigyelés irányában) egy fénykvantum kibocsátásakor, vagyis

sebessége $\frac{h\nu}{mc}$ -vel változik meg. A kibocsátás folyamata τ ideig tart, így a

sebességváltozás ideje nem rögzíthető τ -nál pontosabban. Ennek eredménye $\varepsilon \sim h\nu\tau/mc$ nagyságú helybizonytalanság. Így

$$\varepsilon \sim \frac{h\nu}{mc} \tau, \quad \eta \sim mc \frac{\Delta v}{v} = \frac{mc}{v} \frac{1}{\tau}, \quad \varepsilon\eta \sim h.$$

Így ismét $\varepsilon\eta \sim h$.

Ha **T** maga nem világít, hanem csak szórja a fényt (vagyis meg van világítva), ahogy azt eredetileg feltételeztük, a számítás hasonló módon hajtható végre.

5. A projektorok, mint állítások

Ahogy a III. 1. fejezetben, most is tekintsük a k szabadsági fokú **S** fizikai rendszert. Ennek konfigurációs terét a k számú q_1, \dots, q_k koordináta írja le (lásd az I. 2. fejezetet). A klasszikus mechanika szerint az **S**-ben képezhető valamennyi \mathfrak{R} fizikai mennyiség a q_1, \dots, q_k és a p_1, \dots, p_k konjugált impulzusok függvénye: $\mathfrak{R} = \mathfrak{R}(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ (például az energia a $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ *Hamilton-függvény*). A kvantummechanikában viszont az \mathfrak{R} mennyiségnek egyértelműen az R hipermaximális hermitikus operátor felel meg; nevezetesen q_1, \dots, q_k -nak

$$Q_1 = q_1, \dots, \dots, \quad Q_k = q_k, \dots, \quad \text{a } p_1, \dots, p_k\text{-nak pedig a } P_1 = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \dots, \dots,$$

$P_k = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k} \dots$ operátorok felelnek meg. Már korábban megjegyeztük (I. 2. fejezet) a *Hamilton-függvény* esetében, hogy általában nem határozható meg az

$$R = \mathfrak{R}(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k),$$

mert Q_i és P_i nem cserélhető fel egymással. Anélkül, hogy megadtuk volna az

$$\mathfrak{R}(q_1, \dots, q_k, P_1, \dots, P_k)$$

és R között az összefüggést teljes és végleges alakban, néhány speciális szabályt már lerögzítettünk a III. 1. és III. 3. fejezetben:

L. Ha az egyszerre megfigyelhető \mathfrak{R} és \mathfrak{S} mennyiségeknek az R , illetőleg az S operátor felel meg, akkor az $a\mathfrak{R} + b\mathfrak{S}$ mennyiségnek az $aR + bS$ operátor felel meg (a, b valós szám).

F. Ha az \mathfrak{R} mennyiség megfelelője az R operátor, akkor $F(\mathfrak{R})$ -nek az $F(R)$ operátor felel meg [$F(\lambda)$ tetszőleges valós függvény].

L. és **F.** bizonyos mértékig általánosítható. Az **F.** általánosítása **L.** és **F.** következménye. Ez így szól:

F.* Ha az egyszerre mérhető $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ mennyiségeknek megfelelő operátorok R, S, \dots (ezek szükségképpen felcserélhetők és feltesszük, hogy véges számú mennyiségről van szó), akkor az $F(\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots)$ mennyiségnek az $F(R, S, \dots)$ operátor felel meg.

Ebben az esetben feltételezzük, hogy $F(\lambda, \mu, \dots)$ valós polinomja a λ, μ, \dots változóknak, tehát $F(R, S, \dots)$ jelentése nyilvánvaló R, S, \dots felcserélhetősége miatt; bár **F.***-ot tetszőleges $F(\lambda, \mu, \dots)$ -re is kimondhatnánk (általános $F(R, S, \dots)$)

meghatározásával kapcsolatban lásd a 94. jegyzet hivatkozását). Tekintve, hogy minden polinom megkapható három művelet, $a\lambda$, $\lambda + \mu$, $\lambda\mu$ ismételt alkalmazásával, elegendő csak ezeket megvizsgálni. Azonban

$$\lambda\mu = \frac{1}{4} [(\lambda + \mu)^2 - (\lambda - \mu)^2],$$

tehát

$$\lambda\mu = \frac{1}{4} \cdot (\lambda + \mu)^2 + (-\frac{1}{4}) \cdot (\lambda + (-1)\mu)^2,$$

a három operáció az $a\lambda$, $\lambda + \mu$, λ^2 operációra vezethető vissza. Az első kettőre **L**-et, a harmadikra **F**-et alkalmazva látható, hogy **F**.* bizonyítást nyert.

Az **L**-et a kvantummechanikában arra az esetre is általánosítják, amikor \mathfrak{R} és \mathfrak{S} nem mérhető egyszerre. E kérdést később vizsgáljuk meg (a IV. 1. fejezetben), egyelőre lerögzítjük, hogy ha \mathfrak{R} és \mathfrak{S} egyidőben nem mérhető, akkor még $a\mathfrak{R} + b\mathfrak{S}$ jelentése sem világos.

Az \mathfrak{R} fizikai mennyiségek mellett a fizika tárgya még a fogalmak egy fontos további osztálya; nevezetesen az **S** rendszer állapotainak tulajdonságai. Ilyen tulajdonság az, hogy bizonyos \mathfrak{R} mennyiség a λ értéket veszi fel, vagy hogy ez az érték pozitív, vagy hogy az \mathfrak{R} , \mathfrak{S} egyidőben mérhető mennyiség értéke λ , illetőleg μ , hogy ezek négyzetösszege > 1 , és így tovább. A mennyiségeket jelölje \mathfrak{R} , \mathfrak{S} , ..., a tulajdonságokat pedig \mathfrak{E} , \mathfrak{F} , ... A mennyiségeknek az R, S, \dots hipermaximális hermitikus operátorok felelnek meg. Kérdés, mi felel meg a tulajdonságoknak?

Minden \mathfrak{E} tulajdonsághoz egy mennyiséget rendelünk hozzá. Ezt a következőképpen definiáljuk: minden olyan mérés, amely megmondja, hogy az \mathfrak{E} tulajdonság fennforog-e, vagy sem, e mennyiség mérésének tekintendő. Értéke 1, ha \mathfrak{E} teljesül és 0, ha nem. Az \mathfrak{E} -nek megfelelő ezen mennyiséget is \mathfrak{E} -vel jelöljük.

Az ilyen mennyiségek csak a 0 és az 1 értéket vehetik fel. Fordítva, ha az \mathfrak{R} mennyiség csak a 0 és az 1 értéket veheti fel, akkor \mathfrak{R} -nek nyilvánvalóan az „ \mathfrak{R} értéke $\neq 0$ ” tulajdonság felel meg. A tulajdonságoknak megfelelő \mathfrak{E} mennyiségekre tehát ez a viselkedés jellemző.

Az, hogy \mathfrak{E} értéke csak 0 vagy 1, még másként is megfogalmazható. Ha \mathfrak{E} -t az $F(\lambda) = \lambda - \lambda^2$ polinomba behelyettesítjük, akkor az azonosan eltűnik. Legyen \mathfrak{E} operátora E , akkor $F(\mathfrak{E})$ operátora $E - E^2$, vagyis azt kapjuk, hogy $E - E^2 = 0$, $E = E^2$, más szóval \mathfrak{E} -nek E operátora projektor.

Az E projektorok felelnek meg tehát az \mathfrak{E} tulajdonságoknak (ezeket a most definiált \mathfrak{E} mennyiségek kötik össze). Bevezetvén az E projektorokhoz tartozó \mathfrak{M} zárt lineáris halmazokat ($E = P_{\mathfrak{M}}$), látható, hogy az \mathfrak{E} tulajdonságoknak zárt lineáris halmazok is megfeleltethetők.

Megvizsgáljuk most részletesen az egymásnak megfelelő \mathfrak{E} , E , \mathfrak{M} számolási szabályait.

Ha meg akarjuk mondani, hogy az \mathfrak{E} tulajdonság teljesül-e a φ állapotban, akkor meg kell az \mathfrak{E} mennyiséget mérnünk és meg kell néznünk, hogy értéke 1 vagy 0 (e két lépés definíció szerint egybeesik). Annak valószínűsége, hogy \mathfrak{E} teljesül, egyenlő tehát \mathfrak{E} várható értékével, vagyis

$$(E\varphi, \varphi) = \|E\varphi\|^2 = \|P_{\mathfrak{M}}\varphi\|^2,$$

annak valószínűsége viszont, hogy \mathfrak{E} nem teljesül, $1 - \mathfrak{E}$ várható értékével egyenlő:

$$((1 - E)\varphi, \varphi) = \|(1 - E)\varphi\|^2 = \|\varphi - P_{\mathfrak{M}}\varphi\|^2.$$

[E kettőnek összege természetesen (φ, φ) vagyis 1.] Így \mathfrak{E} biztosan teljesül, vagy nem teljesül attól függően, hogy a második, vagy az első valószínűség 0, tehát, hogy $P_{\mathfrak{M}}\varphi = \varphi$ vagy zérus, más szóval attól függően, hogy φ az \mathfrak{M} -hez tartozik-e, vagy \mathfrak{M} -re ortogonális; vagy ismét más szóval aszerint, hogy φ az \mathfrak{M} -hez, vagy $\mathfrak{R}_x - \mathfrak{M}$ -hez tartozik.

Az \mathfrak{M} tehát úgy jellemezhető, mint az olyan φ -k halmaza, amelyek biztosan \mathfrak{E} tulajdonságúak. [Voltaképpen ez \mathfrak{M} -nek a $\|\varphi\|=1$ felületen lévő részhalmaza, maga \mathfrak{M} ezen φ -kből pozitív állandóval szorozva áll elő, és még a zérus elemet is csatolnunk kell.]

Legyen az \mathfrak{E} -vel ellentétes tulajdonság (\mathfrak{E} tagadása) „nem \mathfrak{E} ”, akkor a fentiekből azonnal következik, hogy ha \mathfrak{E} -hez E és \mathfrak{M} tartozik hozzá, akkor „nem \mathfrak{E} ”-hez az $1 - E$ és $\mathfrak{R}_x - \mathfrak{M}$ fog tartozni.

Éppúgy, mint a mennyiségek esetében, felmerül a tulajdonságok egyidejű mérhetőségének (vagy inkább eldönthetőségének) kérdése. Világos, hogy \mathfrak{E} és \mathfrak{F} akkor és csak akkor dönthető el egyidőben, ha a megfelelő \mathfrak{E} és \mathfrak{F} mennyiség egyszerre mérhető (hogy tetszőleges vagy abszolút pontossággal, az érdektelen, hiszen ezek értéke csak 0 vagy 1 lehet), vagyis ha E és F felcserélhető egymással. Ugyanez érvényes több $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}, \mathfrak{G}, \dots$ tulajdonságra is.

Az egyidőben eldönthető \mathfrak{E} és \mathfrak{F} tulajdonságokból az „ \mathfrak{E} és \mathfrak{F} ” és az „ \mathfrak{E} vagy \mathfrak{F} ” további tulajdonságok képezhetők. Az „ \mathfrak{E} és \mathfrak{F} ”-nek megfelelő mennyiség akkor 1, ha mind az \mathfrak{E} -nek, mind az \mathfrak{F} -nek megfelelő mennyiség 1; és 0, ha ezek bármelyike 0. Ez tehát e két mennyiség szorzata. Az F szerint operátora az \mathfrak{E} és \mathfrak{F} operátorának szorzata, tehát EF . A 14. Tétel folytán (II. 4. fejezet) a megfelelő \mathfrak{P} zárt lineáris sokaság \mathfrak{M} és \mathfrak{N} közös része.

Az „ \mathfrak{E} vagy \mathfrak{F} ” viszont így is írható:

$$\text{„nem ((nem } \mathfrak{E}) \text{ és (nem } \mathfrak{F}))\text{”},$$

s így operátora:

$$1 - (1 - E)(1 - F) = E + F - EF$$

(származtatása miatt ez is projektör). Mivel $F - EF$ is projektör, az $E + F - EF$ -hez tartozó lineáris sokaság $\mathfrak{M} + (\mathfrak{N} - \mathfrak{P})$. Ez $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ részhalmaza, amely nyilván tartalmazza \mathfrak{M} -et, szimmetria miatt \mathfrak{N} -et, s így $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ -et is, tehát egyenlő $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ -nel, s ez, mivel zárt, egyenlő $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}]$ -nel.

Ha \mathfrak{E} olyan tulajdonság, amely mindig teljesül (vagyis érdektelen), akkor a megfelelő mennyiség azonosan 1, tehát $E=1$, $\mathfrak{M}=\mathfrak{R}_x$. Ha viszont \mathfrak{E} sohasem teljesül (vagyis lehetetlen), akkor a megfelelő mennyiség azonosan 0, tehát $E=0$, $\mathfrak{M}=(0)$. Ha az \mathfrak{E} és az \mathfrak{F} tulajdonság nem fér össze egymással, akkor mindenesetre egyszerre eldönthetők és „ \mathfrak{E} és \mathfrak{F} ” biztosan lehetetlen, tehát E és F felcserélhető és $EF=0$. Azonban a felcserélhetőség következménye $EF=0$ -nak (II. 4. fejezet, 14. Tétel), s így ez egyedül is jellemző ebben az esetben. Ha E és F felcserélhető, akkor $EF=0$ csupán annyit jelent, hogy \mathfrak{M} és \mathfrak{N} közös része csak a 0-t tartalmazza. Az E és

F felcserélhetősége egyedül ez utóbbiból nem következik. Valóban, $EF=0$ azt jelenti, hogy az egész \mathfrak{M} ortogonális az egész \mathfrak{N} -re (II. 4. fejezet, 14. Tétele).

Ha az \mathfrak{N} mennyiség operátora R , s az ehhez tartozó egységfelbontás $E(\lambda)$, akkor annak a tulajdonságnak, hogy „ \mathfrak{N} értéke az $I = \{\lambda', \mu'\}$ intervallumba esik ($\lambda' \leq \mu'$),” az operátora: $E(\mu) - E(\lambda')$. Ehhez csak azt kell meggondolni, hogy a fenti tulajdonság teljesülésének valószínűsége $((E(\mu') - E(\lambda'))\varphi, \varphi)$ (lásd II. 1. fejezet P.). Másként fogalmazva: a kérdéses tulajdonsághoz tartozó mennyiség $\mathfrak{E} = F(\mathfrak{N})$, ahol

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \lambda' < \lambda \leq \mu', \\ 0, & \text{egyébként,} \end{cases}$$

és $F(R) = E(\mu') - E(\lambda')$ (lásd a II. 8. vagy III. 1. fejezetet). Ezt az operátort $E(I)$ -nek neveztük a III. 1. fejezetben.

Összefoglalva: az \mathfrak{E} tulajdonság, annak E projektora és e projektor zárt lineáris \mathfrak{M} sokasága közötti összefüggésekről a következő ismereteket szereztük:

α) A φ állapotban az \mathfrak{E} tulajdonság az

$$(E\varphi, \varphi) = \|E\varphi\|^2 = \|P_{\mathfrak{M}} \varphi\|^2,$$

illetőleg

$$((1-E)\varphi, \varphi) = \|(1-E)\varphi\|^2 = \|\varphi - P_{\mathfrak{M}} \varphi\|^2$$

valószínűleg teljesül, illetőleg nem teljesül.

β) Az \mathfrak{E} tulajdonság biztosan teljesül, vagy biztosan nem teljesül aszerint, hogy φ csak \mathfrak{M} -hez, vagy csak $\mathfrak{N}_\infty - \mathfrak{M}$ -hez tartozik.

γ) Több tulajdonság, $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}, \dots$ akkor és csak akkor dönthető el egyszerre, ha E, F, \dots operátoraik felcserélhetők.

δ) Ha \mathfrak{E} -nek E és \mathfrak{M} felel meg, akkor „nem \mathfrak{E} ”-nek $1 - E$ és $\mathfrak{N}_\infty - \mathfrak{M}$ felel meg.

ϵ) Ha \mathfrak{E} -nek E és \mathfrak{M} , \mathfrak{F} -nek F és \mathfrak{N} felel meg, továbbá \mathfrak{E} és \mathfrak{F} egyidőben eldönthető, akkor „ \mathfrak{E} és \mathfrak{F} ”-nek EF , valamint \mathfrak{M} és \mathfrak{N} közös része, „ \mathfrak{E} vagy \mathfrak{F} ”-nek $E + F - EF$ és $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ (ami egyenlő $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}]$ -nel) felel meg.

η) \mathfrak{E} mindig teljesül, ha $E = 1$, vagy ha $\mathfrak{M} = \mathfrak{N}_\infty$; \mathfrak{E} sohasem teljesül, ha $E = 0$, vagy ha $\mathfrak{M} = (0)$.

θ) \mathfrak{E} és \mathfrak{F} nem fér össze, ha $EF = 0$, vagy ha \mathfrak{M} ortogonális \mathfrak{N} -re.

ζ) Legyen az \mathfrak{N} mennyiség operátora R , I egy intervallum, $I = \{\lambda', \mu'\}$, ($\lambda' \leq \mu'$) és tartozzék az $E(\lambda)$ egységfelbontás R -hez, $E(I) = E(\mu') - E(\lambda')$ (lásd a III. 1. fejezetet). Ekkor az $E(I)$ operátor az „ \mathfrak{N} értéke I -be esik” tulajdonság operátora.

Az α – ζ)-ből korábbi valószínűségi állításaink, P., E_1 , E_2 , és a III. 3. fejezetnek az egyidejű mérhetőségre vonatkozó állításai levezethetők. Világos, hogy az utóbbiak γ -val egyenértékűek, P. az α -nak, ϵ -nak és ζ -nek, E_1 és E_2 viszont P.-nek következménye.

Amint látható, az összefüggés a fizikai rendszer tulajdonságai és a projektorok között bizonyos logikai kalkulusra nyújt módot. A szokásos logika fogalmi körével szemben azonban e rendszer a kvantummechanikára jellemző „egyidejű eldönthetőség” fogalmával ki van egészítve.

Mi több, ennek a projektorokra alapozott ítéletkalkulusnak előnye a (hipermaximális) hermitikus operátorokra alapozott mennyiségkalkulussal szemben az, hogy az „egyidejű eldönthetőség” az „egyidejű mérhetőség” fogalmának finomítása. Például az „ \mathfrak{R} értéke I -be esik-e?” és az „ \mathfrak{S} értéke J -be esik-e?” (\mathfrak{R} , \mathfrak{S} operátora R , S , a megfelelő egységfelbontás $E(\lambda)$ és $F(\mu)$, $I = \{\lambda', \lambda''\}$, $J = \{\mu', \mu''\}$) egyidejű eldönthetőségéhez (γ) és ζ) folytán) csak az $E(I) = E(\lambda'') - E(\lambda')$ és az $F(J) = F(\mu'') - F(\mu')$ operátorok felcserélhetőségét követeljük meg. Az \mathfrak{R} és \mathfrak{S} egyidejű mérhetőségéhez valamennyi $E(\lambda)$ és valamennyi $F(\mu)$ felcserélhetősége szükséges.

6. Sugárzáselmélet

Egy kivétellel ismét megkaptuk, lényegesen általánosítva és rendszerezve az I. 2. fejezetben kifejtett kvantummechanika statisztikus megállapításait. Hiányzik a kvantált rendszer egyik stacionárius állapotából a másikba történő átmenete valószínűségének a kvantummechanika felépítésében oly fontos szerepet játszó Heisenberg-féle kifejezése (lásd a megjegyzéseket az I. 2. fejezetben). DIRAC módszerét¹³⁸ követve most megmutatjuk, hogy eme átmeneti valószínűségek miként vezethetők le a kvantummechanika szokásos statisztikus állításaiból. Az ilyen levezetés azért is nagyon fontos, mert mélyebb bepillantást enged a stacionárius állapotok átmeneteinek mechanizmusába és az Einstein—Bohr-féle energia—frekvencia feltételek lényegébe. A DIRAC által kidolgozott sugárzáselmélet a kvantummechanika egyik legszebb fejezete.

Legyen az S rendszer (mondjuk kvantált atom) energiájának megfelelő hermitikus operátor H_0 . Az S konfigurációs terét jellemző koordinátákat egyetlen szimbólummal: ξ -vel jelöljük (ha például S l részecskét tartalmaz, akkor a $3l$ db, $x_1 = q_1, y_1 = q_2, z_1 = q_3, \dots, x_l = q_{3l-2}, y_l = q_{3l-1}, z_l = q_l$ Descartes-koordinátákat együtt ξ -vel jelöljük); egyszerűség kedvéért feltételezzük még, hogy H_0 spektruma tisztán diszkrét; w_1, w_2, \dots legyenek a sajátértékek (w_n -ek között lehetnek megegyezők is), $\varphi_1(\xi), \varphi_2(\xi), \dots$ pedig a sajátfüggvények. Az S bármely állapotának $\varphi(\xi)$ hullámfüggvénye az időtől függő Schrödinger-egyenlet alapján sorba fejthető (lásd a III. 2. fejezetet):

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t(\xi) = -H_0 \varphi_t(\xi),$$

tehát, ha $t = t_0$ -ban

$$\varphi_{t_0}(\xi) = \varphi(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \varphi_k(\xi),$$

akkor tetszőleges t időpontban:

$$\varphi_t(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} w_k (t-t_0)} \varphi_k(\xi).$$

Így a $\varphi(\xi) = \varphi_k(\xi)$ állapot időfüggetlensége

$$e^{-\frac{2\pi i}{h} W_k(t-t_0)} \varphi_k(\xi),$$

tehát önmagába megy át (minthogy az

$$e^{-\frac{2\pi i}{h} W_k(t-t_0)}$$

tényező érdektelen). A $\varphi_k(\xi)$ -k stacionáriusak. Így ezek egyikéből a másikba nincs átmenet. Hogyan beszélhetünk mégis átmenetekről? A magyarázat egyszerű. Nem vettük figyelembe azt, ami az átmenetet okozza, nevezetesen a sugárzást. Az eredeti Bohr-elmélet nyomán csak a sugárzás kibocsátásakor tűnik el a stacionárius kvantumpálya (lásd az 5. jegyzet hivatkozását), ha ezt elhanyagoljuk (ahogy azt az előbb vázolt helyzetben tettük), akkor nem meglepő, hogy állandó és tökéletes stabilitást kapunk. A vizsgálandó rendszert tehát az S által kibocsátható sugárzás figyelembevételével ki kell terjesztenünk, pontosabban figyelembe kell vennünk általában minden sugárzást, amellyel S egyáltalán kölcsönhat. Legyen L a sugárzást tartalmazó rendszer (ez a klasszikus elmélet elektromágneses tere, az elektronok és a nukleonok töltése által létrehozott stacionárius teret itt nem vesszük figyelembe), így $S + L$ a vizsgálandó rendszer.

A következőket kell tehát tennünk:

1. Meg kell alkotnunk L kvantummechanikai leírását, vagyis meg kell adnunk L konfigurációs terét.

2. Fel kell kutatni $S + L$ energiaoperátort. Ez három részre osztható:

α) S energiája, mely L -től független; ez S perturbálatlan energiája, operátora legyen H_0 .

β) L energiája, mely S -től független, ez L perturbálatlan energiája, legyen ennek operátora H_L .

γ) A harmadik, a maradék energia, mely S és L kölcsönhatási energiája. Legyen ez H_I .

Nyilvánvaló, hogy itt olyan kérdések merülnek fel, amelyekre a kvantummechanika alapelvei szerint klasszikus jellegű választ kell adni. Az így kapott eredményt ezután operátor alakba kell önteni (lásd az I. 2. fejezetet). Így az első lépésben a sugárzást tisztán klasszikus szempontból tárgyaljuk, tehát (a sugárzás elektromágneses elméletének értelmében) az elektromágneses tér oszcillátorállapotának tekintjük.¹³⁹

A felesleges bonyodalmak elkerülése érdekében (ilyen például a végtelen térben elvesző sugárzás) S -et és L -et nagy, V térfogatú H üregbe bezártnak képzeljük. A H fala tökéletes tükör. Amint azt jól tudjuk, az elektromágneses tér állapotát a H üregben az $\mathcal{E} = \{\mathcal{E}_x, \mathcal{E}_y, \mathcal{E}_z\}$, $\mathcal{H} = \{\mathcal{H}_x, \mathcal{H}_y, \mathcal{H}_z\}$ elektromos, illetőleg mágneses térerősséggel jellemezzük. Az $\mathcal{E}_x, \dots, \mathcal{H}_z$ mennyiségek mindannyian H valamely pontjában a pont x, y, z Descartes-koordinátáinak és a t időnek a függvényei. A továbbiakban gyakran használunk valós $\mathbf{a} = \{a_x, a_y, a_z\}$, $\mathbf{b} = \{b_x, b_y, b_z\}$ térvektorokat (ilyen például \mathcal{E} és \mathcal{H}) és ezek

$$[\mathbf{a}, \mathbf{b}] = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z$$

skalárszorzatát, amely nem keverendő össze $\mathfrak{R}_\infty(\varphi, \psi)$ skalárszorzatával. A

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

differenciáloperátort Δ jelöli, a jól ismert vektoriális differenciáloperációkat pedig div , grad , rot . Az \mathfrak{E} , \mathfrak{H} vektor \mathbf{H} -ban eleget tesz az üres tér *Maxwell*-egyenleteinek:

$$\text{div } \mathfrak{H} = 0, \quad \text{rot } \mathfrak{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial t} = 0,$$

$$\text{div } \mathfrak{E} = 0, \quad \text{rot } \mathfrak{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathfrak{E}}{\partial t} = 0.$$

Az első sor első egyenlete kielégíthető \mathbf{H} -nak $\mathbf{H} = \text{rot } \mathfrak{A}$ alakú kifejezésével ($\mathfrak{A} = \{\mathfrak{A}_x, \mathfrak{A}_y, \mathfrak{A}_z\}$ az úgynevezett vektorpotenciál, komponensei x, y, z, t függvényei), a második egyenletből $\mathfrak{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial t}$. A második sor egyenletei így írhatók

$$(A.) \quad \text{div } \mathfrak{A} = 0, \quad \Delta \mathfrak{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathfrak{A}}{\partial t^2} = 0.$$

(A vektorpotenciált kissé másként szokás bevezetni azért, hogy a tér és az idő szimmetriája szembeötlőbb legyen. Az \mathfrak{A} fenti bevezetése a *Maxwell*-egyenletek általános megoldását szolgáltatja, ez a *Maxwell*-elmélet legtöbb tárgyalásában fellelhető. Meg kell itt jegyezni, hogy a második sor első egyenlete a szokásos eljárásnál csupán annyit ad, hogy $\frac{\partial}{\partial t} \text{div } \mathfrak{A} = 0$ vagyis $\text{div } \mathfrak{A} = f(x, y, z)$. Ezt most nem taglaljuk tovább, hanem felhívjuk a figyelmet a 139. jegyzet hivatkozására.) Az (A.) a kiindulópontunk. Azt, hogy \mathbf{H} falai tükrözőek, azzal a feltétellel vesszük figyelembe, hogy \mathfrak{A} -nak \mathbf{H} határán a falra merőlegesnek kell lennie. Az ilyen \mathfrak{A} -k felkutatásának jól ismert módszere a következő: t sehol sem szerepel expliciten a feladatban, tehát a legáltalánosabb \mathfrak{A} olyan megoldások lineáris kombinációja, amelyek egy időtől függő skalár és egy olyan vektor szorzatai, amely csak x, y, z függvénye:

$$\mathfrak{A} = \mathfrak{A}(x, y, z, t) = \mathfrak{A}(x, y, z) \cdot \tilde{q}(t).$$

Ily módon (A.) miatt

$$(A_1.) \quad \text{div } \mathfrak{A} = 0, \quad \Delta \mathfrak{A} = \eta \mathfrak{A},$$

ahol \mathfrak{A} a \mathbf{H} határán a falra merőleges és

$$(A_2.) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{q}(t) = c^2 \eta \tilde{q}(t).$$

Az (A₁.) miatt η csak x, y, z , az (A₂.) miatt csak t függvénye, így η állandó.

Az (A_1) tehát sajátérték-feladat, ahol η a sajátérték-paraméter, \mathfrak{A} pedig az általános sajátfüggvény. E feladat elmélete ismert, így itt csak az eredményeket közöljük.¹⁴⁰ Az (A_1) spektruma tisztán diszkrét, valamennyi η_1, η_2, \dots sajátérték negatív (legyen a megfelelő $\mathfrak{A}_1, \mathfrak{A}_2, \dots$) és $\eta_n \rightarrow -\infty$ ha $n \rightarrow \infty$. A teljes $\mathfrak{A}_1, \mathfrak{A}_2, \dots$ rendszer normálható:

$$\iiint_{\mathbf{H}} [\mathfrak{A}_m, \mathfrak{A}_n] dx dy dz = \begin{cases} 4\pi c^2, & \text{ha } m=n, \\ 0, & \text{ha } m \neq n. \end{cases}$$

(A szokásos 1 helyett $4\pi c^2$ -et használunk, ez a továbbiakban hasznosabbnak bizonyul.) Az $\eta_n (< 0)$ helyett a

$$-\frac{4\pi^2 \rho_n^2}{c^2}$$

kifejezést írva (A_2) azt adja, hogy

$$\tilde{q}_n(t) = \gamma_n \cos 2\pi \rho_n(t - \tau) \quad (\gamma, \tau \text{ tetszőleges}).$$

Így \mathfrak{A} általános megoldása a következő:

$$\begin{aligned} \mathfrak{A} = \mathfrak{A}(x, y, z, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \mathfrak{A}_n(x, y, z) \cdot \tilde{q}_n(t) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \mathfrak{A}_n(x, y, z) \cdot \gamma_n \cos 2\pi \rho_n(t - \tau) \end{aligned}$$

($\gamma_1, \gamma_2, \dots, \tau_1, \tau_2, \dots$ tetszőleges állandó). Tetszőleges

$$\mathfrak{A} = \sum_{n=1}^{\infty} \mathfrak{A}_n(x, y, z) \cdot \tilde{q}_n(t)$$

tér esetén (\mathfrak{A} nem feltétlenül megoldása (A_1) -nak, így $\tilde{q}_n(t)$ tetszőleges) az energia

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{8\pi} \iiint_{\mathbf{H}} ([\mathfrak{E}, \mathfrak{E}] + [\mathfrak{H}, \mathfrak{H}]) dx dy dz = \frac{1}{8\pi} \iiint_{\mathbf{H}} \left(\frac{1}{c^2} \left[\frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial t}, \frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial t} \right] + \right. \\ &\quad \left. + [\text{rot } \mathfrak{A}, \text{rot } \mathfrak{A}] \right) dx dy dz = \\ &= \frac{1}{8\pi} \sum_{m,n=1}^{\infty} \iiint_{\mathbf{H}} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_m(t) \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n(t) [\mathfrak{A}_m, \mathfrak{A}_n] + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{q}_m(t) \tilde{q}_n(t) [\text{rot } \mathfrak{A}_m, \text{rot } \mathfrak{A}_n] \right) dx dy dz. \end{aligned}$$

Parciális integrálás után kapjuk, hogy¹⁴¹

$$\begin{aligned} & \iiint_{\mathbf{H}} [\text{rot } \mathfrak{A}_m, \text{rot } \mathfrak{A}_n] dx dy dz = \\ & = \iiint_{\mathbf{H}} [-\Delta \mathfrak{A}_m + \text{grad div } \mathfrak{A}_m, \mathfrak{A}_n] dx dy dz = \\ & = \frac{4\pi^2 \rho_m^2}{c^2} \iiint_{\mathbf{H}} [\mathfrak{A}_m, \mathfrak{A}_n] dx dy dz. \end{aligned}$$

Tehát

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{8\pi} \sum_{m,n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_m(t) \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n(t) + \right. \\ & \left. + \frac{4\pi^2 \rho_m^2}{c^2} \tilde{q}_m(t) \tilde{q}_n(t) \right) \iiint_{\mathbf{H}} [\mathfrak{A}_m, \mathfrak{A}_n] dx dy dz = \\ & = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_m(t) \right)^2 + 4\pi^2 \rho_m^2 (\tilde{q}_m(t))^2 \right]. \end{aligned}$$

A $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ a tér pillanatnyi állapotát leíró koordinátáknak tekinthetők, ezek tehát az \mathbf{L} konfigurációs terének koordinátái. A \tilde{p}_m (klasszikus mechanikai) konjugált impulzusok az

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n(t) \right)^2 + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{q}_n^2 \right]$$

képletből kaphatók meg. Eszerint

$$\tilde{p}_n = \frac{\partial}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n \right)} E = \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n,$$

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (\tilde{p}_n^2 + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{q}_n^2)$$

(lásd az I. 2. fejezetet). Ez a

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{p}_n = \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_n} E = -4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{q}_n,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n = \frac{\partial}{\partial \tilde{p}_n} E = \tilde{p}_n$$

klasszikus mechanikai mozgásegyenletekhez vezet, így pontosan (\mathbf{A}_2)-t kaptuk a Maxwell-egyenletek segítségével. Igaz tehát JEANS tétele:

Az \mathbf{L} sugárzási tér a $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ koordinátákkal tisztán klasszikusan jellemezhető, ezek a teret leíró \mathfrak{A} pillanatnyi vektorpotenciállal az

$$\mathfrak{A} = \mathfrak{A}(x, y, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{q}_n \mathfrak{A}_n(x, y, z)$$

kapcsolatban vannak. Az energia (Hamilton-függvény):

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (\tilde{p}_n^2 + 4\pi^2 \rho_n^2 q_n^2),$$

ami teljesen a klasszikus mechanika alapján írható fel.

Az egységnyi tömegű, \tilde{q} koordinátájú egyenes mentén $c\tilde{q}^2$ ($c = 2\pi^2 \rho^2$) potenciál-térben mozgó tömegpont energiája

$$\frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q} \right)^2 + 4\pi^2 \rho^2 q^2 \right].$$

Mivel pedig $\tilde{p} = \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}$, azért ismét azt kapjuk, hogy

$$E = \frac{1}{2} (\tilde{p}^2 + 4\pi^2 \rho^2 q^2).$$

Az ilyen részecske mozgásegyenlete

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{q} + 4\pi^2 \rho^2 q = 0,$$

amelynek megoldása

$$\tilde{q} = \gamma \cos 2\pi\rho(t - \tau)$$

(γ és τ tetszőleges). Mozgásának alakja miatt ezt a rendszert ρ rezgésszámú lineáris oszcillátornak nevezzük. Az \mathbf{L} tehát olyan lineáris oszcillátorok rendszerének tekinthető, amelyek ρ_1, ρ_2, \dots rezgésszámúai a \mathbf{H} üreg sajátfrekvenciái.

Az elektromágneses tér e mechanikai leírása azért fontos, mert a kvantummechanika szokásos módján azonnal átértelmezhető. Az \mathbf{L} konfigurációs terét $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ írja le. E kifejezésben \tilde{p}_n és \tilde{q}_n a $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_n} \dots$, illetőleg a $\tilde{q}_n \dots$ operátorokkal helyettesítendő. Ezeket az operátorokat \tilde{P}_n -nel és \tilde{Q}_n -nel jelöljük. Így az 1. és a 2. β) feladatunkat teljesítettük, s a 2. β)-ban szereplő operátorra ezt kaptuk:

$$\mathbf{H}_l = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (\tilde{P}_n^2 + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{Q}_n^2).$$

A 2. α -t már korábban megoldottuk, hiszen \mathbf{H}_0 -t ismertnek tételeztük fel. Már csak 2. γ van hátra, de ez sem okoz majd nehézséget.

A klasszikus elektrodinamikában \mathbf{S} és \mathbf{L} kölcsönhatását a következőképpen kell kiszámítani: tartalmazzon \mathbf{S} l részecskét (például protonokat és elektronokat), melyeknek töltése és tömege legyen $e_1, m_1, \dots, e_l, m_l$, koordinátája $x_1 = q_1, y_1 = q_2, z_1 = q_3, \dots, x_l = q_{3l-2}, y_l = q_{3l-1}, z_l = q_{3l}$ (ezeket foglalja össze a korábban használt ξ szimbólum), a megfelelő impulzusok pedig $p_1^x, p_1^y, p_1^z, \dots, p_l^x, p_l^y, p_l^z$. Ekkor a kölcsönhatási energia (megfelelő közelítésben):

$$\sum_{v=1}^l \frac{e_v}{cm_v} [p_v^x \mathfrak{A}_x(x_v, y_v, z_v) + p_v^y \mathfrak{A}_y(x_v, y_v, z_v) + p_v^z \mathfrak{A}_z(x_v, y_v, z_v)].^{142}$$

A kvantummechanika megfelelő operátorait úgy kapjuk meg, hogy $p_v^x, p_v^y, p_v^z, x_v, y_v, z_v (v=1, \dots, l)$ helyébe a

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_v}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y_v}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z_v}, \dots, \\ x_v, \dots, y_v, \dots, z_v, \dots$$

operátorokat írjuk. Ezeket $P_v^x, P_v^y, P_v^z, Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z$ -vel jelöljük. Felhasználva az

$$\mathfrak{A}(x, y, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{q}_n \mathfrak{A}_n(x, y, z)$$

összefüggést, megkapjuk a keresett \mathbf{H}_i -t:

$$\mathbf{H}_i = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{cm_v} \tilde{Q}_n [P_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + P_v^y \mathfrak{A}_{n,y}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + P_v^z \mathfrak{A}_{n,z}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z)].$$

Felhívjuk a figyelmet arra, hogy a $p_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(x, y, z)$ alakú szorzatokat így írtuk át: $P_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z)$, bár ezt is írhattuk volna: $\mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) P_v^x$. (Az eredményül kapott operátor hermitikus voltát biztosítandó, tulajdonképpen az

$$\frac{1}{2} [P_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) P_v^x]$$

alakot kellett volna használni.) Szerencsére e kettő között nincs különbség, mert

$$[P_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots] - [\mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) P_v^x + \dots] = \\ = [P_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) - \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) P_v^x] + \dots = \quad 143$$

$$= \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots = \frac{h}{2\pi i} \operatorname{div} \mathfrak{A}_n(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) \sim 0.$$

Elkészítettük tehát az $S + L$ rendszer teljes energiáját s annak operátorát:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_l + \mathbf{H}_i.$$

Mielőtt \mathbf{H} -t tovább alakítanánk, vegyük észre a következőt: az $S + L$ konfigurációs terét a ξ (vagyis a q_1, \dots, q_{3l} , vagy másként az $x_1, y_1, z_1, \dots, x_l, y_l, z_l$) és a $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ koordináták jellemzik. A hullámfüggvény is ezektől fog függni. Formálisan azonban zavaró és egyébként is kétértékű végtelen sok szabadsági fokú rendszerrel, vagy végtelen sok argumentumú hullámfüggvénnyel számolni. Eredetileg az utasításaink mindig véges számú koordináta esetére vonatkoztak. Ezért előbb $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ közül csak az első N számút tekintjük: $\tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N$ (más szóval \mathfrak{A} először csak $\mathfrak{A}_1, \dots, \mathfrak{A}_N$ lineáris kombinációja lesz), s majd ha ebből kiindulva megkaptuk az eredményt, akkor végezzük el az $N \rightarrow \infty$ határártmenetet.

Tehát

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \mathbf{H}_0 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N (\tilde{P}_n^2 + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{Q}_n^2) + \\ & + \sum_{n=1}^N \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{cm_v} \tilde{Q}_n [P_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + P_v^y \mathfrak{A}_{n,y}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \\ & + P_v^z \mathfrak{A}_{n,z}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z)]. \end{aligned}$$

Kényelmesebb a (nem hermitikus) \tilde{R}_n operátort és annak adjungáltját, \tilde{R}_n^* -ot bevezetni \tilde{P}_n és \tilde{Q}_n helyett:

$$\tilde{R}_n = \frac{1}{\sqrt{2h\rho_n}} (2\pi\rho_n \tilde{Q}_n + i\tilde{P}_n),$$

$$\tilde{R}_n^* = \frac{1}{\sqrt{2h\rho_n}} (2\pi\rho_n \tilde{Q}_n - i\tilde{P}_n).$$

Ekkor

$$\tilde{Q}_n = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{2\rho_n}} (\tilde{R}_n + \tilde{R}_n^*)$$

és

$$\tilde{P}_n \tilde{Q}_n - \tilde{Q}_n \tilde{P}_n = \frac{h}{2\pi i} \cdot 1$$

miatt

$$\tilde{R}_n \tilde{R}_n^* = \frac{1}{2h\rho_n} (\tilde{P}_n^2 + 4\pi^2 \rho_n \tilde{Q}_n^2) + \frac{1}{2} \cdot 1,$$

$$\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n = \frac{1}{2h\rho_n} (\tilde{P}_n^2 + 4\pi^2 \rho_n \tilde{Q}_n^2) - \frac{1}{2} \cdot 1.$$

Így $\tilde{R}_n \tilde{R}_n^* - \tilde{R}_n^* \tilde{R}_n = 1$. Az energiára a következő képletet kapjuk:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \mathbf{H}_0 + \sum_{n=1}^N h \rho_n \tilde{R}_n^* \tilde{R}_n + \sum_{n=1}^N \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{2\pi c m_v} \sqrt{\frac{h}{2\rho_v}} (\tilde{R}_n + \tilde{R}_n^*) \times \\ & \times [P_v^x \tilde{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + P_v^y \tilde{\mathcal{A}}_{n,y}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \\ & + P_v^z \tilde{\mathcal{A}}_{n,z}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z)] + C, \end{aligned}$$

amelyben C állandó: $C = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N h \rho_n$. Az energia kifejezésében additív állandónak nincs jelentősége, ezért azt elhagyjuk. Ez azért is tanácsos, mert C végtelenné válik, ha $N \rightarrow \infty$, s így az az elmélet végleges alakba öntésekor nehézséget jelentene.

Az $\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n$ operátor hipermaximális, spektruma tisztán diszkrét, és a $0, 1, 2, \dots$ számokból áll. A megfelelő sajátfüggvények legyenek $\psi_0^n(\tilde{q}_n), \psi_1^n(\tilde{q}_n), \psi_2^n(\tilde{q}_n), \dots$

[Ha \tilde{q}_n helyébe az

$$\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{\rho_n}} q$$

kifejezést írjuk, akkor

$$\frac{1}{\sqrt{2h\rho_n}} 2\pi\rho_n \tilde{q}_n = 2\pi \sqrt{\frac{\rho_n}{2h}} \tilde{q}_n,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2h\rho_n}} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{2\rho_n}} \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_n}$$

átmegy $\frac{1}{\sqrt{2}} q$ -ba, illetőleg $\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial q}$ -ba, így

$$\tilde{R}_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q + \frac{\partial}{\partial q} \right), \quad \tilde{R}_n^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q - \frac{\partial}{\partial q} \right),$$

$$\tilde{R}_n \tilde{R}_n^* = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} q^2 + \frac{1}{2},$$

$$\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} q^2 - \frac{1}{2}.$$

Eme operátorok sajátérték-elmélete több kézikönyvben is megtalálható. (Lásd például COURANT—HILBERT, 261. oldal a (42), (43) képlet és az odavágó anyag, 76. oldal (60), (61) képlet, vagy WEYL: Gruppentheorie und Quantenmechanik, 74. oldal és az utána következő rész.)]

A $\psi_1(\xi), \psi_2(\xi), \dots$ a ξ térben, a $\psi_0^n(\tilde{q}_n), \psi_1^n(\tilde{q}_n), \dots$ a \tilde{q}_n térben alkot teljes ortonormált függvényrendszert, így a

$$\Phi_{kM_1 \dots M_N}(\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N) = \psi_k(\xi) \psi_{M_1}^1(\tilde{q}_1) \dots \psi_{M_N}^N(\tilde{q}_N),$$

$$k = 1, 2, \dots; \quad M_1, \dots, M_N = 0, 1, 2, \dots,$$

a $\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N$ térben, tehát a konfigurációs térben lesz teljes ortonormált rendszer. Tehát minden $\Phi = \Phi(\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N)$ hullámfüggvény a következőképpen fejthető ki:

$$\begin{aligned} \Phi(\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N) &= \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{M_1=0}^{\infty} \dots \sum_{M_N=0}^{\infty} a_{kM_1 \dots M_N} \Phi_{kM_1 \dots M_N}(\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N) = \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{M_1=0}^{\infty} \dots \sum_{M_N=0}^{\infty} a_{kM_1 \dots M_N} \psi_k(\xi) \psi_{M_1}^1(\tilde{q}_1) \dots \psi_{M_N}^N(\tilde{q}_N). \end{aligned}$$

Annak nincs jelentősége, hogy a teljes ortonormált rendszert és a kifejtési együtthatókat az $N+1$ számú k, M_1, \dots, M_N indexszel jelöljük meg egyetlen index helyett. Valóban, a II. 2. fejezet megfontolásai ezt igazolják. A Φ hullámfüggvények *Hilbert*-terét úgy is felfoghatjuk, mint az $(N+1)$ indexű $a_{kM_1 \dots M_N}$ -ek *Hilbert*-terét (ezekre $\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{M_1=0}^{\infty} \dots \sum_{M_N=0}^{\infty} |a_{kM_1 \dots M_N}|^2$ véges). Vajon ilyen felfogásban a *Hilbert*-tér melyik operátora lesz \mathbf{H} ? Ahhoz, hogy erre válaszolhassunk, számítsuk ki először a $\mathbf{H}\Phi_{kM_1 \dots M_N}$ -et. A \mathbf{H}_0 csak a $\psi_k(\xi)$ -re hat, ami \mathbf{H}_0 -nak W_k sajátértékű sajátvektora; hasonlóképpen $R_n^* R_n$ csak $\psi_{M_n}^n(q_n)$ -re hat, és ez $R_n^* R_n$ -nek M_n sajátértékű sajátvektora. Így

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\Phi_{kM_1 \dots M_N} &= (W_k + \sum_{n=1}^N h\rho_n \cdot M_n) \Phi_{kM_1 \dots M_N} + \\ &+ \sum_{n=1}^N \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{2\pi c m_v} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho_n}} \cdot [P_v^x \mathfrak{Q}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \\ &+ P_v^y \mathfrak{Q}_{n,y}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + P_v^z \mathfrak{Q}_{n,z}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z)] \psi_k(\xi) \times \\ &\times \psi_{M_1}^1(\tilde{q}_1) \dots (\tilde{R}_n + \tilde{R}_n^*) \psi_{M_n}^n(\tilde{q}_n) \dots \psi_{M_N}^N(\tilde{q}_N). \end{aligned}$$

Az olyan operátorokra, amelyek csak a ξ változókra hatnak (ilyen a $[\dots]$ operátor is), az

$$A\psi_k(\xi) = \sum_{j=1}^{\infty} (A\psi_k, \psi_j) \psi_j(\xi) = \sum_{j=1}^{\infty} (A)_{kj} \psi_j(\xi)$$

kifejtést alkalmazhatjuk; itt $(A)_{kj} = (A\psi_k, \psi_j)$. Továbbá a mondott hivatkozásban megmutatják, hogy

$$\tilde{R}_n \psi_M^n(\tilde{q}_n) = \sqrt{M} \psi_{M-1}^n(\tilde{q}_n),$$

$$\tilde{R}_n^* \psi_M^n(\tilde{q}_n) = \sqrt{M+1} \psi_{M+1}^n(\tilde{q}_n)$$

(ha $M=0$, akkor az első egyenletben az értelmetlen ψ_{-1}^n bukkanna fel, helyett ilyenkor zérust kell írni). Következésképpen

$$\begin{aligned} \mathbf{H} \Phi_{kM_1 \dots M_N} &= (W_k + \sum_{n=1}^N h \rho_n \cdot M_n) \Phi_{kM_1 \dots M_N} + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^N \sqrt{\frac{h}{2\rho_n}} \left(\sum_{v=1}^l \frac{e_v}{2\pi c m_v} (P_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kj} \right) \times \\ &\times (\sqrt{M_n+1} \Phi_{kM_1 \dots M_{n+1} \dots M_N} + \sqrt{M_n} \Phi_{kM_1 \dots M_{n-1} \dots M_N}). \end{aligned}$$

Most már megadhatjuk \mathbf{H} -t, mint az $a_{kM_1 \dots M_N}$ együtthatókra ható operátort:

$$\mathbf{H} \sum_{kM_1 \dots M_N} a_{kM_1 \dots M_N} \Phi_{kM_1 \dots M_N} = \sum_{kM_1 \dots M_N} a'_{kM_1 \dots M_N} \Phi_{kM_1 \dots M_N},$$

ahol

$$\begin{aligned} \mathbf{H} a_{kM_1 \dots M_N} &= a'_{kM_1 \dots M_N} = \\ &= \left(W_k + \sum_{n=1}^N h \rho_n M_n \right) a_{kM_1 \dots M_N} + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^N \sqrt{\frac{h}{2\rho_n}} \left(\sum_{v=1}^l \frac{e_v}{2\pi c m_v} (P_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kj} \right) \times \\ &(\sqrt{M_n} a_{jM_1 \dots M_{n-1} \dots M_N} + \sqrt{M_n+1} a_{jM_1 \dots M_{n+1} \dots M_N}). \end{aligned}$$

A \mathbf{H} vizsgálatában most már eljutottunk az $N \rightarrow \infty$ határátmenet elvégzéséhez. Mivel e határátmenetkor $a_{kM_1 \dots M_N}$ indexelése változik, egész új \mathbf{H} operátor jön majd létre. Olyan $a_{kM_1 M_2 \dots}$ komponenseket kell bevezetni, amelyeknek végtelen sok M_1, M_2, \dots indexe van, de olyan M_1, M_2, \dots sorozatokra korlátozódunk, amelyből csak véges sok különbözik 0-tól. Ez például biztosítja azt, hogy a \mathbf{H} -ban előforduló

$$\sum_{n=1}^{\infty} h \rho_n M_n$$

összeg véges. Ettől kezdve tehát az olyan $a_{kM_1 M_2 \dots}$ sorozatok *Hilbert*-terét használjuk, amelyekre

$$\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{M_1=0}^{\infty} \sum_{M_2=0}^{\infty} \dots |a_{kM_1M_2\dots}|^2$$

véges, a k, M_1, M_2, \dots indexek a $k=1, 2, \dots, M_1, M_2, \dots=0, 1, 2, \dots$ tartományt futják be és az M_n -ek közül csak véges (bár tetszőleges) számú nem zérus.¹⁴⁴ A \mathbf{H} végső alakja tehát a következő:

$$\mathbf{H}a_{kM_1M_2\dots} = \left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} h\rho_n \cdot M_n \right) a_{kM_1M_2\dots} + \\ + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} W_{kj}^n \cdot (\sqrt{M_{n+1}} a_{jM_1M_2\dots M_{n+1}\dots} + \sqrt{M_n} a_{jM_1M_2\dots M_{n-1}\dots}),$$

ahol W_{kj}^n definíciója:

$$W_{kj}^n = \sqrt{\frac{h}{2\rho_n}} \sum_{v=1}^i \frac{e_v}{2\pi cm_v} (P_v^x \mathfrak{I}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kj}.$$

Mielőtt ebből a bennünket érdeklő fizikai következtetéseket levonnánk, emlékeztünk arra, hogy ezt az eredményt a sugárzás elektrodinamikai elméletéből kiindulva kaptuk meg. Most pedig arra vagyunk kíváncsiak, hogy az általunk végrehajtott szabványos kvantummechanikai átalakítások elégségesek-e ahhoz, hogy számot adjanak a sugárzás diszkrét, részecsketermészetéről, s arról, hogy ez mennyire tér el a hullámmódelből származó eredményektől. (Vegyük észre, hogy ilyesmire akkor is számíthatnánk, ha közvetlenül a fény részecskemodelljéből indulnánk ki ahelyett, hogy — miként most tettük — az elektromágneses teret kvantálnánk.)

Az már látszik, hogy kifejezésünk a részecskeszűrő fénykvantumot valamiképpen tartalmazza. Tekintsünk el a második tagtól, amely a perturbációnak felel meg és az \mathbf{S} rendszernek az egyik stacionárius állapotból a másikba történő kvantumugrásait írja le. (Bár voltaképpen ez utóbbi jelenség érdekel bennünket, azonban nem annyira jelentős, mint maga az \mathbf{S} anyagi rendszer és a már rendelkezésre álló sugárzás, amit, ahogy látni fogjuk, \mathbf{H} első tagja jelent.) Így csupán

$$\mathbf{H}_1 a_{kM_1M_2\dots} = \left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} h\rho_n \cdot M_n \right) a_{kM_1M_2\dots}$$

marad. Az energiának ezt a kifejezését a következőképpen értelmezhetjük: ez nem egyéb, mint az \mathbf{S} rendszer W_k energiája, meg a $h\rho_n \cdot M_n$ mennyiségek összege. Kézenfekvő tehát az $M_n=0, 1, 2, \dots$ számokat a $h\rho_n$ energiájú részecskék számaként felfogni. $h\rho_n$ azonban éppen az az energia, amelyet EINSTEIN szerint ρ_p rezgésszámú fénykvantum hordoz (lásd a 134. jegyzetet). Ily módon \mathbf{H}_1 alapján az elektromágneses teret \mathbf{H} -ban (eltekintve az elektrosztatikus résztől), vagyis \mathbf{L} -et úgy foghatjuk fel, hogy az voltaképpen ρ_1, ρ_2, \dots rezgésszámú, tehát $h\rho_1, h\rho_2, \dots$ energiájú fénykvantumokból áll. E részecskék számát az $M_1, M_2, \dots (=0, 1, 2, \dots)$ indexek adják meg. Azt, hogy ρ_1, ρ_2, \dots mellett más rezgésszám nem fordul elő, úgy indokolhatjuk meg, hogy ezek éppen a \mathbf{H} üreg saját rezgésszámai. Valóban, az

$$\mathfrak{A}_n(x, y, z) \cdot \gamma \cos 2\pi\rho_n(t - \tau)$$

vektorpotenciálok írják le a \mathbf{H} űregben egyedül lehetséges stacionárius elektromágneses rezgéseket.

E meggondolások és értelmezések csupán heurisztikusak. Teljesen kielégítő megállapítást csak akkor tehetünk, ha a \mathbf{H} energiakifejezést az \mathbf{L} sugárzás fénykvantummodelljéből kiindulva alkotjuk meg. Azért követtük először a klasszikus eljárást, mert a kvantummechanika előtti fénykvantum-hipotézis nem szolgáltat kifejezést a fénykvantumok és az anyag kölcsönhatását leíró energiára (a klasszikus elektrodinamika átértelmezése e ponton sohasem volt sikeres). Mi azonban, ha eredményünk (melyet úgy származtatunk le, hogy a kölcsönhatási energia kifejezést nem specializáljuk) alakja \mathbf{H} -éval megegyezik, e kölcsönhatást az együttthatók összehasonlításával meg tudjuk majd határozni.

A fénykvantum-hipotézis alapján mit tudunk mondani az \mathbf{L} állapotteréről? Egyetlen fénykvantumot (\mathbf{H} -ban) bizonyos koordináták összességével jellemezhetünk. Jelöljük ezeket együtt az u szimbólummal.¹⁴⁵ Ennek stacionárius állapotai legyenek $\psi_1(u), \psi_2(u), \dots$ (ezek ortonormált rendszert alkotnak), a megfelelő energiák pedig E_1, E_2, \dots . Ezek felelnek meg a ρ_1, ρ_2, \dots rezgésszámú $\mathfrak{A}_1, \mathfrak{A}_2, \dots$ elektromágneses sajátrezgéseknek. (Az *Einstein*-féle felfogás szerint $E_n = h\rho_n$, amit be is fogunk bizonyítani.) Ily módon a következőt állapíthatjuk meg. Az elektromágneses felfogásban a fény energiáját úgy normálhatjuk, hogy a fény energiájának minimális értéke legyen 0 s ez feleljen meg az $M_1 = M_2 = \dots = 0$ indexértékeknek. Így felismerjük, hogy a „nem létezés”, a „hiány” valójában a fény lehetséges állapota. A valóságban a fénykvantumok kibocsátódnak és elnyelődnek, tehát fény keletkezik és eltűnik. Ám a kvantummechanika számára az ilyen felfogás teljesen idegen. A rendszer állapotteréhez minden részecske a saját koordinátaival járul hozzá és így a rendszer formális leírásában oly lényeges szerepet játszik, hogy tulajdonképpen eltüntethetetlennek kellene lennie. Így az elnyelődés után a részecskének egyfajta rejtett létezését kell tulajdonítanunk, melyben a koordinátái továbbra is részt vállalnak a konfigurációs tér jellemzésében. Következésképpen a $\psi_n(u)$ állapotok közül az egyiknek (melynek energiája $E_n = 0$) a fénykvantum nemlétének kell megfelelnie. Ezt $\psi_0(u)$ -val jelöljük ($E_0 = 0$), így $\psi_1(u), \psi_2(u), \dots$ a létező fénykvantumoknak felel meg, a teljes ortonormált rendszert $\psi_0(u), \psi_1(u), \psi_2(u), \dots$ alkotja.

Tekintsük most \mathbf{L} -et, az összes fénykvantum rendszerét. Most „nemlétező”, jelen nem levő fénykvantumokat is figyelembe veszünk; az \mathbf{L} -ben lehetséges előforduló fénykvantumok száma végtelen. Kényelmetlen azonban úgy dolgozni, hogy \mathbf{L} -ben végtelen számú alkotórész van, ezért először S fénykvantummal számolunk ($S = 1, 2, \dots$) és utána térünk át az $S \rightarrow \infty$ ¹⁴⁶ határesetre. Legyen ezen fénykvantumok sorszáma $1, \dots, S$, koordinátája pedig u_1, \dots, u_S . Az \mathbf{L} konfigurációs terét tehát u_1, \dots, u_S , $\mathbf{S} + \mathbf{L}$ -ét pedig ξ, u_1, \dots, u_S jellemzi. Az $\mathbf{S} + \mathbf{L}$ általános hullámfüggvénye tehát $f(\xi, u_1, \dots, u_S)$ és a $\varphi_k(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \cdot \dots \cdot \psi_{n_S}(u_S)$ függvények ($k = 1, 2, \dots, n_1, \dots, n_S = 0, 1, 2, \dots$) teljes ortonormált rendszert alkotnak.

E leírásban a fénykvantumok alapvető tulajdonsága, hogy azonosak egymással, vagyis nincs ésszerű mód arra, hogy ugyanolyan u koordinátájú két fénykvantumot megkülönböztessünk egymástól. Másként fogalmazva, az olyan állapot, amelyben az m és az n fénykvantum koordinátája $u_m = u'$, $u_n = u''$, nem különböztethető meg attól, amelyben $u_m = u''$, $u_n = u'$. (Ez a klasszikus, nem kvantummechanikai leírás mód; nem a $\varphi(u)$ hullámfüggvénynek, hanem u -nak értékét adjuk meg.) A kvantummechanika nyelvén ez azt jelenti, hogy az $f(\xi, u_1, \dots, u_m, \dots, u_n, \dots, u_S)$ hullámfüggvény nem különböztethető meg az $f(\xi, u_1, \dots, u_n, \dots, u_m, \dots, u_S)$ hullámfüggvénytől. Eszerint bármely \mathfrak{R} fizikai mennyiség várható értéke ugyanaz e két állapotban (mivel ez $F(R)$ -re is érvényes, minden fizikai mennyiség statisztikája is egyforma. Lásd E_1 . és E_2 . vizsgálatát a III. 1. fejezetben). Legyen u_m és u_n felcserélésének operációja O_{mn} (O_{mn} egyszerre hermitikus és unitér, $O_{mn}^2 = 1$, amint az azonnal belátható), ennek segítségével tehát \mathfrak{R} várható értéke f -re és $O_{mn}f$ -re ugyanaz, tehát

$$(Rf, f) = (RO_{mn}f, O_{mn}f) = (O_{mn}RO_{mn}f, f),$$

így

$$R = O_{mn}RO_{mn}, \quad \text{vagyis} \quad O_{mn}R = RO_{mn}.$$

Ez azt jelenti, hogy esetünkben csak olyan R operátor engedhető meg, amely valamennyi O_{mn} -nel felcserélhető ($m, n = 1, \dots, S, m \neq n$), tehát (tekintettel az O_{mn} definíciójára) amelyben az összes u_1, \dots, u_S koordináta szimmetrikusan szerepel.

Az olyan f hullámfüggvényt, amely az u_1, \dots, u_S koordinátákban szimmetrikus, vagyis, amelyre $O_{mn}f = f$ ($m, n = 1, \dots, S, m \neq n$) ilyen R operátor ismét szimmetrikus hullámfüggvénybe transzformálja át: $O_{mn}Rf = RO_{mn}f = Rf$. Ezek az f -ek zárt lineáris sokaságot alkotnak, amely az f -ek $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ Hilbert-terének $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ Hilbert-altere, R pedig $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ -t önmagába képezi le. Az ilyen R tehát az $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ Hilbert-tér operátorának tekinthető. Következésképpen a kvantummechanika céljainak $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ éppúgy megfelel, mint az eredetileg tekintett $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$. Figyelembe véve L szimmetriáját a fénykvantumok felcserélésekor, felmerül a kérdés, hogy vajon nem korlátozhatjuk-e figyelmünket csak a szimmetrikus hullámfüggvényekre, más szóval nem helyettesíthetjük-e $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ -et $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ -sel. Ezt meg is tesszük és az, hogy eredményünk teljesen meg fog egyezni a \mathbf{H} -ra az elektromágneses elméletből lezármaztatott kifejezéssel, végül is igazolni fogja ezt a lépésünket.¹⁴⁷

A $\varphi_k(\xi)\psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_S}(u_S)$ függvények teljes ortonormált rendszert alkotnak $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ -ben. Ennek segítségével megalkotunk most ilyen rendszert $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ -ben is. Legyen M_0, M_1, \dots ($= 0, 1, 2, \dots$) olyan számsorozat, amelyre $M_0 + M_1 + \dots = S$, ezek közül tehát csak végezzámú különbözik 0-tól.

Jelölje $[M_0, M_1, \dots]$ azon u_1, \dots, u_S indexrendszerek halmazát, amelyben a 0 M_0 -szor, az 1 M_1 -szer, \dots fordul elő. Pontosan $M_0! M_1! \dots$ ilyen rendszer van. Legyen

$$\Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S) = \sum_{n_1, \dots, n_S \text{ az } [M_0, M_1, \dots]\text{-ben}} \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_S}(u_S).$$

Tekintve, hogy a $\varphi_{M_0 M_1 \dots}$ az $M_0! \cdot M_1! \dots$ páronként ortogonális egységnyi abszolút értékű tag összege, azért abszolút értékének négyzete $M_0! \cdot M_1! \dots$, tehát abszolút értéke $\sqrt{M_0! \cdot M_1! \dots}$. Két különböző $\Phi_{M_0 M_1 \dots}$ tagjai páronként ortogonálisak, így a

$$\psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S) = \frac{1}{\sqrt{M_0! \cdot M_1! \dots}} \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S)$$

függvények ortonormált rendszert alkotnak. Az u_1, \dots, u_S változóiban szimmetrikus $f(\xi, u_1, \dots, u_S)$ skalárszorzata $\varphi_k(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S)$ minden tagjával egyforma, így ortogonális rájuk, ha ortogonális $\varphi_k(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S)$ -re, tehát $\varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S)$ -re. Ha tehát ortogonális valamennyi $\varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S)$ -re, akkor ortogonális valamennyi $\varphi_k(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_S}(u_S)$ -re, is, tehát zérus. Következésképpen (az $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ -hez tartozó) $\varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S)$ függvények $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ -ben teljes ortonormált rendszert alkotnak.

Tekintsük $S+L$ lehetséges energiáinak halmazát. Ennek első összetevője S energiája (2α), amelyre definíció szerint $\mathbf{H}_0 \varphi_k(\xi) = W_k \varphi_k(\xi)$; tehát $S+L$ estén

$$\mathbf{H}_0 \varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S) = W_k \varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S).$$

Másodszor (2β), mindegyik l fénykvantum energiája $\mathbf{H}_l \psi_n(u) = E_n \psi_n(u)$. Az m -edik kvantum energiája $S+L$ -ben ($m=1, \dots, S$), tehát

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_l \varphi_k(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_m}(u_m) \dots \psi_{n_S}(u_S) &= \\ &= E_{n_m} \varphi_k(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_m}(u_m) \dots \psi_{n_S}(u_S), \end{aligned}$$

és $\mathbf{H}_l = \mathbf{H}_{l_1} + \dots + \mathbf{H}_{l_S}$ -et kell képezni. Végül, az l fénykvantum és S kölcsönhatásának energiáját írja le a V operátor. A V még nem ismert pontosan, azonban mátrixa segítségével azonosítható:

$$V_l \varphi_k(\xi) \psi_n(u) = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} V_{kn|jp} \varphi_j(\xi) \psi_p(u).$$

Az $S+L$ -ben tehát az m -edik fénykvantumra

$$\begin{aligned} &V_l \varphi_k(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_m}(u_m) \dots \psi_{n_S}(u_S) = \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{\infty} V_{kn_m|jp} \varphi_j(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_p(u_m) \dots \psi_{n_S}(u_S) = \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{p_1 \dots p_m \dots p_S=0}^{\infty} \delta(n_1 - p_1) \dots V_{kn_m|jp_m} \dots \delta(n_S - p_S) \times \\ &\quad \times \varphi_j(\xi) \cdot \psi_{p_1}(u_1) \dots \psi_{p_m}(u_m) \dots \psi_{n_S}(u_S) \end{aligned}$$

$[\delta(n)=1, \text{ ha } n=0, \text{ és } 0, \text{ ha } n \neq 0]$ és képezni kell a

$$\mathbf{H}_i = V_{i_1} + \dots + V_{i_S}$$

összeget.

Mindent összevéve azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & \mathbf{H}\varphi_k(\xi) \cdot \psi_{n_1}(u_1) \cdot \dots \cdot \psi_{n_S}(u_S) = \\ & = (W_k + E_{n_1} + \dots + E_{n_S})\varphi_k(\xi)\psi_{n_1}(u_1) \cdot \dots \cdot \psi_{n_S}(u_S) + \\ & + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{p_1, \dots, p_S=0}^{\infty} \sum_{m=1}^S \delta(n_1 - p_1) \cdot \dots \cdot V_{kn|jp_m} \cdot \dots \cdot \delta(n_S - p_S) \times \\ & \quad \times \varphi_j(\xi) \cdot \psi_{p_1}(u_1) \cdot \dots \cdot \psi_{p_S}(u_S). \end{aligned}$$

Egyszerű transzformációval ez átalakítható:

$$\begin{aligned} & \mathbf{H}\varphi_k(\xi) \cdot \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S) = \\ & = \left(W_k + \sum_{n=0}^{\infty} M_n E_n \right) \varphi_k(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S) + \\ & + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n,p}^{\infty} M_n V_{kn|jp} \varphi_j(\xi) \times \Phi_{M_0 M_1 \dots M_{n-1} \dots M_p + 1 \dots}(u_1, \dots, u_S) \end{aligned}$$

($n=p$ esetén $\dots M_{n-1} \dots M_p + 1 \dots \dots M_n \dots$ -nel helyettesítendő), tehát az ortonormált függvényeket használva

$$\begin{aligned} & \mathbf{H}\varphi_k(\xi) \cdot \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S) = \\ & = \left(W_k + \sum_{n=0}^{\infty} M_n E_n \right) \varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S) + \\ & + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n,p}^{\infty} \sqrt{M_n(M_p + 1 - \delta(n-p))} V_{kn|jp} \varphi_j(\xi) \times \\ & \quad \times \psi_{M_0 M_1 \dots M_{n-1} \dots M_p + 1 \dots}(u_1, \dots, u_S). \end{aligned}$$

Az általános $f(\xi, u_1, \dots, u_S)$ függvény sorbafejtethető:

$$\begin{aligned} & f(\xi, u_1, \dots, u_S) = \\ & = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{M_0 + M_1 + \dots = S}^{\infty} a_{k M_0 M_1 \dots} \varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S). \end{aligned}$$

Így $\mathfrak{R}_{\infty}^{(S)}$ felfogható, mint az $a_{k M_0 M_1 \dots}$ együtthatók sorozatainak ($k=1, 2, \dots, M_0, M_1, \dots=0, 1, 2, \dots, M_0 + M_1 + \dots S$) Hilbert-tere; e sorozatokra

$$\sum_{kM_0M_1\dots} |a_{kM_0M_1\dots}|^2$$

véges. Ekkor \mathbf{H} a

$$\mathbf{H}a_{kM_0M_1\dots} = a'_{kM_0M_1\dots}$$

egyenlettel a következőképpen definiálható:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\substack{M_0, M_1, \dots = 0 \\ (M_0 + M_1 + \dots = S)}} a_{kM_0M_1\dots} \varphi_k(\xi) \psi_{M_0M_1\dots}(u_1, \dots, u_S) = \\ = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\substack{M_0, M_1, \dots = 0 \\ (M_0 + M_1 + \dots = S)}} a'_{kM_0M_1\dots} \varphi_k(\xi) \psi_{M_0M_1\dots}(u_1, \dots, u_S), \end{aligned}$$

amiből

$$\begin{aligned} \mathbf{H}a_{kM_0M_1\dots} = a'_{kM_0M_1\dots} = \left(W_k + \sum_{n=0}^{\infty} M_n E_n \right) a_{kM_0M_1\dots} + \\ + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n,p=0}^{\infty} \sqrt{M_n(M_p+1-\delta(n-p))} \times \bar{V}_{kn|jp} a_{jM_0M_1\dots M_n-1\dots M_p+1\dots} \end{aligned}$$

[k, j és n, p szerepe a $\varphi_k(\xi) \psi_{M_0M_1\dots}(u_1, \dots, u_S)$ -et tartalmazó formulához képest itt felcserélődött, $V_{jp|kn}$ helyett V hermitikus voltát figyelembe véve $\bar{V}_{kn|jp}$ -t írtunk].

Most sor kerül az $S \rightarrow +\infty$ határátmenet elvégzésére. Az M_0 -t M_1, M_2, \dots meghatározza, mert $M_0 = S - M_1 - M_2 - \dots$, így $a_{kM_0M_1\dots}$ helyett $a_{kM_1M_2\dots}$ írható.

Így az indexeket a

$$k = 1, 2, \dots; \quad M_1, M_2, \dots = 0, 1, 2, \dots;$$

$$M_1 + M_2 + \dots \leq S$$

feltételek szabják meg. Bevezetve az

$$S V_{k0|j0} = V_{k|j}, \quad \sqrt{S} V_{k0|jn} = V_{k|jn},$$

$$\sqrt{S} V_{kn|j0} = \bar{V}_{j|kn}$$

($V_{kn|jp}$ hermitikus!) jelöléseket és figyelembe véve, hogy $E_0 = 0$, írható, hogy

$$\begin{aligned} \mathbf{H}a_{kM_1M_2\dots} = a'_{kM_1M_2\dots} = \left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} M_n E_n \right) a_{kM_1M_2\dots} + \\ + \sum_{j=1}^{\infty} V_{k|j} a_{jM_1M_2\dots} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{M_n} \frac{\sqrt{S - M_1 - M_2 - \dots + 1}}{S} V_{j|kn} a_{jM_1 M_2 \dots M_n - 1 \dots} + \\
& + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{M_n + 1} \frac{\sqrt{S - M_1 - M_2 - \dots}}{S} \bar{V}_{k|jn} a_{jM_1 M_2 \dots M_n + 1 \dots} + \\
& + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n,p=1}^{\infty} \sqrt{M_n(M_p + 1)} \bar{V}_{kn|jp} a_{jM_1 M_2 \dots M_n - 1 \dots M_p + 1 \dots}
\end{aligned}$$

Tartson most $S + \infty$ -hez. Az $a_{kM_1 M_2 \dots}$ továbbra is meg van határozva minden olyan $kM_1 M_2 \dots$ sorozatra ($k=1, 2, \dots, M_1, M_2, \dots=0, 1, 2, \dots$), amelyekre csupán véges számú M_n különbözik zérustól (lásd a 144. jegyzetet), és \mathbf{H} -ra azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
\mathbf{H} a_{kM_1 M_2 \dots} &= a'_{kM_1 M_2 \dots} = \left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} M_n E_n \right) a_{kM_1 M_2 \dots} + \\
& + \sum_{j=1}^{\infty} V_{k|j} a_{jM_1 M_2 \dots} + \\
& + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} (V_{j|kn} \sqrt{M_n + 1} a_{jM_1 M_2 \dots M_n + 1 \dots} + \\
& + \bar{V}_{k|jn} \sqrt{M_n} a_{jM_1 M_2 \dots M_n - 1 \dots}) + \\
& + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n,p=1}^{\infty} \bar{V}_{kn|jp} \sqrt{M_n(M_p + 1)} a_{jM_1 M_2 \dots M_n - 1 \dots M_p + 1 \dots}
\end{aligned}$$

A sugárzás elektromágneses elmélete alapján levezetett egyenlettel a hasonlóság nyilvánvaló. A két összefüggés azonossá válik az

$$\begin{aligned}
E_n &= h\rho_n, & V_{k|j} &= 0, & V_{k|jn} &= W_{jk}^n = \bar{W}_{kj}^n, \\
V_{kn|jp} &= 0
\end{aligned}$$

azonosításokkal. Látható tehát, hogy a fénykvantumfelfogás a klasszikus elektromágneses felfogással azonossá válik, ha figyelembe vesszük az alábbi szabályokat:

1. Az utóbbit az általános kvantummechanikai séma szerint kell átírni.
2. Minden fénykvantum energiáját az *Einstein*-törvény szerint a rezgésszám h -szorosával kell egyenlővé tenni.
3. A fénykvantum és az anyag kölcsönhatási energiáját megfelelő módon kell definiálni (lásd V fenti kifejezését).

Ilyen módon a korai kvantumelmélet egyik legnehezebb paradoxona, a fény kettős természete (elektromágneses hullámok, vagy diszkrét részecskék, azaz kvantumok) briliáns megoldást kapott.¹⁴⁸ Megjegyezzük, hogy a most kiszámított

V kölcsönhatási energia közvetlen és világos értelmezése nehéz. Ez annál is inkább igaz, mivel a zérustól különböző $V_{kn|jp}$ mátrixelemek (ezekben $n \neq 0$ és $p=0$, vagy pedig $n=0$ és $p \neq 0$) függenek az összes lehetséges fénykvantumok S számától ($1/\sqrt{S}$ -sel arányosak) — bár végül végre kell hajtani az $S \rightarrow +\infty$ határátmenetet. Elfogadhatjuk azonban azt a felfogást, hogy minden modell-leírás közelítő és az elmélet pontos tartalma az egész \mathbf{H} operátorban rejlik.

Visszatérünk most eredeti feladatunkhoz: az átmeneti valószínűségek meghatározásához. Az időtől függő *Schrödinger*-egyenlet értelmében az

$$a_{kM_1M_2\dots} = a_{kM_1M_2\dots}(t)$$

együtthatók változását az időben a

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} a_{kM_1M_2\dots} &= -\mathbf{H} a_{kM_1M_2\dots} = \\ &= -\left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} \hbar \rho_n \cdot M_n \right) a_{kM_1M_2\dots} - \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} W_{kj}^n \cdot (\sqrt{M_n+1} \times \\ &\quad \times a_{jM_1M_2\dots M_n+1\dots} + \sqrt{M_n} a_{jM_1M_2\dots M_n-1\dots}) \end{aligned}$$

egyenlet határozza meg. Az $a_{kM_1M_2\dots}$ változását főképpen e kifejezés első tagja okozza, ezért tanácsos ezt az

$$a_{kM_1M_2\dots}(t) = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} \hbar \rho_n M_n \right) t} b_{kM_1M_2\dots}(t)$$

helyettesítéssel leválasztani. Ekkor

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} b_{kM_1M_2\dots} &= -\frac{2\pi i}{\hbar} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} W_{kj}^n \left(e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (W_j - W_k + \hbar \rho_n) t} \sqrt{M_{n+1}} \times b_{jM_1M_2\dots M_{n+1}\dots} - \right. \\ &\quad \left. - e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (W_j - W_k - \hbar \rho_n) t} \sqrt{M_n} b_{jM_1M_2\dots M_n-1\dots} \right). \end{aligned}$$

Az $a_{kM_1M_2\dots}$ és $b_{kM_1M_2\dots}$ fizikai jelentése származtatásuk alapján érthető meg. Ha $\bar{M}_0 + \bar{M}_1 + \dots = S$ véges, akkor a $\varphi_k(\xi) \cdot \psi_{\bar{M}_0\bar{M}_1\dots}(u_1, \dots, u_S)$ állapotban S a k -adik kvantumpályán van és $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots$ állapotban $\bar{M}_0, \bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ számú fénykvantum van, azaz \bar{M}_0 számú van a „nincs jelen” állapotban és $\bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ számú van a $\bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ karakterisztikus rezgéseknek megfelelő állapotokban.

E hullámfüggvénynek megfelelő $a_{kM_1M_2\dots}$ -k a következők:

$$a_{kM_1M_2\dots} = \delta(k - \bar{k}) \delta(M_1 - \bar{M}_1) \delta(M_2 - \bar{M}_2) \dots$$

(Csak véges számú tényező különbözik 1-től, hiszen $M_n = \bar{M}_n = 0$, véges számú kivételtől eltekintve.) Ez természetesen érvényes marad akkor is, ha $S \rightarrow +\infty$. Az $S + L$ tetszőleges $a_{kM_1M_2\dots}$ állapotában a konfiguráció valószínűsége (a nem degenerált diszkrét spektrumon mérve, lásd a III. 3. fejezet gondolatmenetét) ezért

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{kM_1M_2\dots} a_{kM_1M_2\dots} \delta(k-\bar{k})\delta(M_1-\bar{M}_1)\delta(M_2-\bar{M}_2)\dots \right|^2 = \\ & = |a_{\bar{k}\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}|^2 = |b_{\bar{k}\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}|^2. \end{aligned}$$

Annak valószínűsége pedig, hogy S-et a \bar{k} -adik kvantumpályán találjuk, a következő:

$$\Theta_k = \sum_{M_1M_2\dots} |b_{kM_1M_2\dots}|^2.$$

Legyen az atom a kezdeti időpillanatban ($t=0$) a \bar{k} -adik állapotban és legyen $\bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ fénykvantum a megfelelő $\bar{\mathfrak{A}}_1, \bar{\mathfrak{A}}_2, \dots$ állapotban jelen, vagyis

$$b_{kM_1M_2\dots} = a_{kM_1M_2\dots} = \delta(k-\bar{k}) \cdot \delta(M_1-\bar{M}_1) \cdot \delta(M_2-\bar{M}_2) \cdot \dots$$

A fenti differenciálegyenlet értelmében az első közelítésben (vagyis olyan rövid t időkre, amelyekre a jobb oldal állandónak tekinthető) csak azok a $\frac{\partial}{\partial t} b_{kM_1M_2\dots}$ -k fognak zérustól különbözni, amelyekre vagy az $M_1, M_2, \dots, M_n+1, \dots$ vagy pedig az $M_1, M_2, \dots, M_n-1, \dots$ sorozat megegyezik az $\bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ sorozattal; vagyis azok, amelyeknek indexsorozata $\bar{k}, \bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots, \bar{M}_n \pm 1, \dots$. Elvégezve az integrálást:

$$b_{kM_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n\dots} = W_{k\bar{k}}^n \frac{1 - e^{-\frac{2\pi i}{h}(W_k - W_{\bar{k}} - h\rho_n)t}}{W_k - W_{\bar{k}} - h\rho_n} \sqrt{\bar{M}_n + 1},$$

$$b_{b\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n\dots} = W_{k\bar{k}}^n \frac{1 - e^{-\frac{2\pi i}{h}(W_k - W_{\bar{k}} - h\rho_n)t}}{W_k - W_{\bar{k}} - h\rho_n} \sqrt{\bar{M}_n}.$$

Az összes többi $b_{kM_1M_2\dots}$ zérus ebben a közelítésben. (Kivéve $b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}$ -t, amely egyenlő a kezdeti 1 értékkel e közelítésben, vagyis t^2 -es tagoktól eltekintve. Mégis az a következtetés, hogy $\frac{\partial}{\partial t} b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots} = 1$, kétes, hiszen ebben az esetben a differenciálegyenlet végtelen sok $b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n \pm 1\dots}$ jellegű tagot tartalmaz, melyek közelítésünkben nem tűnnek el. Nem érvelhetünk tehát úgy, hogy kis t -re e tagok kicsinyek, következésképpen összegük is kicsiny. Valóban, a következő rendű közelítésben számolva belátható, hogy $b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}$ eltérése 1-től nem t^2 -tel, hanem t -vel arányos.¹⁴⁹ Mivel azonban

$$\sum_{kM_1M_2\dots} |b_{kM_1M_2\dots}|^2 = \sum_{kM_1M_2} |a_{kM_1M_2\dots}|^2 = 1$$

$$|b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}|^2 = 1 - \sum_{kM_1M_2\dots \neq \bar{k}\bar{M}_1\bar{M}_2\dots} |b_{kM_1M_2\dots}|^2,$$

a $b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}$ közvetlen meghatározására nincs szükség.)

A folyamat kvalitatív jellege világosan felismerhető: az \bar{M}_n (vagyis ρ_n rezgésszá-
mú) fénykvantum kibocsátásának megfelelő $b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_{n+1}\dots}$ annál nagyobb, minél
kisebb a $W_k - W_k - h\rho_n$ nevező, más szóval minél közelebb esik a fény ρ_n rezgésszáma a
($W_k - W_k$)/ h „Bohr-rezgésszámhoz”,¹⁵⁰ ugyanígy az elnyelésnek megfelelő
 $b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_{n-1}\dots}$ nő, amint ρ_n megközelíti ($W_k - W_k$)/ h -t. Látható tehát, hogy a Bohr-féle
rezgésszám-összefüggés nem pontosan, hanem csak nagy valószínűséggel érvényes
(természetesen nem az összes frekvencia fordul elő szükségképpen a ρ_n -ek között) és
csak akkor, ha t kicsiny és a ρ_n -ek egymáshoz közel esnek (ami igaz, ha a **H** üreg
nagy). A W_{kk} -k a folyamat bekövetkezésének gyakoriságát még tovább növelik.
Nemsokára azonosítjuk ezeket az átmeneti valószínűségekkel.

A $b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_{n+1}\dots}$ -ekre vonatkozó képleteinkből következik, hogy

$$|b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_{n+1}\dots}|^2 =$$

$$= \frac{2}{h^2} (\bar{M}_{n+1}) |W_{kk}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\rho_n - \frac{W_k - W_k}{h} \right) t}{\left(\rho_n - \frac{W_k - W_k}{h} \right)^2}, \quad 151$$

$$|b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_{n-1}\dots}|^2 =$$

$$= \frac{2}{h^2} M_n |W_{kk}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\rho_n - \frac{W_k - W_k}{h} \right) t}{\left(\rho_n - \frac{W_k - W_k}{h} \right)^2} \quad 151$$

és

$$|b_{kM_1M_2\dots}|^2 = 0,$$

$$\text{ha } kM_1M_2\dots \neq \begin{cases} k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots, \\ k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n \pm 1\dots \end{cases}$$

Ebből $k \neq \bar{k}$ esetén Θ_k -ra kapjuk, hogy

$$\Theta_k = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{h^2} (M_n + 1) |W_{kk}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\rho_n - \frac{W_k - W_k}{h} \right) t}{\left(\rho_n - \frac{W_k - W_k}{h} \right)^2} +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{h^2} M_n |W_{kk}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\rho_n - \frac{W_k - W_k}{h} \right) t}{\left(\rho_n - \frac{W_k - W_k}{h} \right)^2}.$$

(Az első $\sum_{n=1}^{\infty}$ a kibocsátásnak, a második pedig az elnyelésnek felel meg.) Ahhoz, hogy e Θ_k -kat zárt alakba írassuk, egyszerűsítő feltevéseket kell tennünk. Egyrészt \mathbf{H} -t igen nagyra választjuk ($V \rightarrow \infty$), másrészt \mathbf{H} karakterisztikus $\bar{\mathfrak{M}}_n$ rezgéseit statisztikusan kezeljük. E célból a fenti összegekben azokat a tagokat fogjuk össze, amelyekben ρ_n a ρ és $\rho + d\rho$ közé esik (W_{kk}^n kifejezését beírjuk és feltételezzük, hogy $d\rho \ll \rho$):

$$\frac{1}{4\pi^2 c^2 h \rho} \times$$

$$\times \left[\sum_{\rho \leq \rho_n \leq \rho + d\rho} \left| \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{m_v} (P_v^x \bar{\mathfrak{M}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kk} \right|^2 (\bar{M}_n + 1) \right] \times$$

$$\times \frac{1 - \cos 2\pi \left(\rho - \frac{W_k - W_k}{h} \right) t}{\left(\rho - \frac{W_k - W_k}{h} \right)^2}.$$

Ugyanezt kell elvégezni a második összegben, csak $\bar{M}_n + 1$ helyébe ott M_n , és $(W_k - W_k)/h$ helyébe $(W_k - W_k)/h$ kerül. A szögletes zárójelben álló kifejezést kell kiértékelni.

Nem az M_1, M_2, \dots értékeket szokás felsorolni, hanem az intenzitással, vagyis a spektrum ρ és $\rho + d\rho$ intervallumába és az egységnyi térfogatba eső $I(\rho)d\rho$ sugárzási energiával számolnak. Eszerint

$$\sum_{\rho \leq \rho_n \leq \rho + d\rho} h \rho_n \bar{M}_n \approx h \rho \sum_{\rho \leq \rho_n \leq \rho + d\rho} \bar{M}_n = VI(\rho)d\rho,$$

$$\sum_{\rho \leq \rho_n \leq \rho + d\rho} \bar{M}_n = \frac{VI(\rho)d\rho}{h\rho}.$$

A WEYL által levezetett általánosan igaz aszimptotikus képlet alapján (lásd a 140. jegyzet hivatkozását) a $\rho, \rho + d\rho$ intervallumba eső ρ_n -nek száma

$$\frac{8\pi V \rho^2}{c^2} d\rho,$$

s így

$$\sum_{\rho \leq \rho_n \leq \rho + d\rho} (\bar{M}_n + 1) \approx \frac{V \left(I(\rho) + \frac{8\pi h \rho^3}{c^3} \right)}{h\rho} d\rho.$$

Ha

$$\left| \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{m_v} (P_v^x \bar{\mathfrak{M}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kk} \right|^2$$

a ρ , $\rho + d\rho$ intervallumban a $W_{k\bar{k}}(\rho)$ átlagérték körül gyorsan fluktuál, akkor a szögletes zárójelben álló kifejezésre ezt kapjuk:

$$W_{k\bar{k}}(\rho) \frac{V \left(I(\rho) + \frac{8\pi h \rho^3}{c^3} \right)}{h\rho} d\rho,$$

illetőleg

$$W_{k\bar{k}}(\rho) \frac{VI(\rho)}{h\rho} d\rho.$$

Írjunk $v_{k\bar{k}}$ -t és $v_{\bar{k}k}$ -t a $(W_{\bar{k}} - W_k)/h$, illetőleg a $(W_k - W_{\bar{k}})/h$ helyébe, akkor összegeinkre kapjuk, hogy

$$\Theta_k = \frac{V^2}{4\pi^2 c^2 h^2} \int_0^\infty \left\{ \left(I(\rho) + \frac{8\pi h \rho^3}{c^3} \right) \frac{1 - \cos 2\pi(\rho - v_{k\bar{k}}) t}{(\rho - v_{k\bar{k}})^2} + \right. \\ \left. + I(\rho) \frac{1 - \cos 2\pi(\rho - v_{\bar{k}k}) t}{(\rho - v_{\bar{k}k})^2} \right\} \frac{W_{k\bar{k}}(\rho)}{\rho^2} d\rho.$$

Kicsiny t -kre az integrál nyilván t^2 nagyságrendű (hiszen $1 - \cos 2\pi ct$ ilyen), kivéve az integrálási tartomány ama részét, ahol a $\rho - v_{k\bar{k}}$ vagy a $\rho - v_{\bar{k}k}$ nevező kicsiny. Ebben olyan járulékok adódhatnak, amely t^2 -tel összehasonlítva nagy, s ha ez a helyzet, akkor e járulékok szolgáltatják Θ_k aszimptotikus kifejezését. Valóban, ez a helyzet, mert belátjuk, hogy t nagyságrendű járulékokat kapunk.

Tekintve, hogy $v_{k\bar{k}} = -v_{\bar{k}k} = (W_{\bar{k}} - W_k)/h$, azért ha $W_{\bar{k}} > W_k$, akkor csak az első tag, ha pedig $W_{\bar{k}} < W_k$, akkor csak a második tag nevezője lehet kicsiny, tehát az első vagy a második tag lesz lényeges, attól függően, hogy $W_{\bar{k}}$ nagyobb vagy kisebb, mint W_k . Továbbá, mivel a $v_{k\bar{k}}$ -tól, illetőleg a $v_{\bar{k}k}$ -tól távoli ρ -k az integrálokhoz csak t^2 nagyságrendű járulékokat adnak, a $\bar{v}_{k\bar{k}} = |W_{\bar{k}} - W_k|/h$ jelölést bevezetve az integrálok alól $I W_{k\bar{k}}(\bar{v}_{k\bar{k}})/\bar{v}_{k\bar{k}}^2$ kiemelhető; itt

$$I = I(\bar{v}_{k\bar{k}}) + \frac{8\pi h \bar{v}_{k\bar{k}}^3}{c^3},$$

illetőleg

$$I = I(\bar{v}_{k\bar{k}}).$$

Így

$$\Theta_k = \frac{VI W_{k\bar{k}}(\bar{v}_{k\bar{k}})}{4\pi^2 c^2 h^2 \bar{v}_{k\bar{k}}^2} \int_0^\infty \frac{1 - \cos 2\pi(\rho - \bar{v}_{k\bar{k}}) t}{(\rho - \bar{v}_{k\bar{k}})^2} d\rho.$$

Mivel ez ismét t^2 -es járulékhhoz vezet, az \int_0^∞ -t helyettesíthetjük $\int_{-\infty}^{+\infty}$ -lal. Bevezetve az új $x = 2\pi(\rho - \bar{v}_{k\bar{k}}) t$ változót, kapjuk, hogy

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 - \cos 2\pi(\rho - \bar{v}_{kk})t}{(\rho - \bar{v}_{kk})^2} d\rho = 2\pi t \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 - \cos x}{x^2} dx = 2\pi^2 t \cdot 1^{52}$$

Tehát végül

$$\Theta_k = \frac{VI W_{kk}(\bar{v}_{kk})}{2h^2 \bar{v}_{kk}^2} t,$$

amivel azt is bebizonyítottuk, hogy Θ_k t -nagyságrendű.

Ahhoz, hogy $W_{kk}(\bar{v}_{kk})$ -t kiértékeljük, olyan alakot kell találnunk a

$$\left| \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{m_v} (P_v^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x} (Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kk} \right|^2$$

kifejezésre, amely $\bar{\mathfrak{A}}_n$ -et nem tartalmazza. Ilyet úgy kaphatunk, ha $\bar{\mathfrak{A}}_n$ -et (amennyiben annak gyors ingadozásait tekintjük) állandó hosszúságú, rendezetlenül irányított vektorral helyettesítjük. Ez számvektor szorozva az 1 mátrixszal, hiszen a térben állandó, vagyis nem függ a Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z -től, állandó γ_n hosszúsága az

$$\iiint_{\mathbf{H}} [\bar{\mathfrak{A}}_n, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz = 4\pi c^2$$

normálási feltételből kapható, így

$$V \gamma_n^2 = 4\pi c^2, \quad \gamma_n^2 = \frac{4\pi c^2}{V}.$$

Átlagban $[\bar{\mathfrak{A}}_n, \bar{\mathfrak{A}}_n] = \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}^2 + \bar{\mathfrak{A}}_{n,y}^2 + \bar{\mathfrak{A}}_{n,z}^2 = \gamma_n^2 \cdot \frac{1}{3}$ -a ad járulékot $\bar{\mathfrak{A}}_{n,x}^2$ -hez, ez $\frac{1}{3} \gamma_n^2 = \frac{4\pi c^2}{3V}$. Ugyanez érvényes $\bar{\mathfrak{A}}_{n,y}$ -ra és $\bar{\mathfrak{A}}_{n,z}$ -re is. Következésképpen

$$W_{kk}(\rho) = \text{átl.} \left| \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{m_v} (P_v^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x} (Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kk} \right|^2 \approx \frac{4\pi c^2}{3V} \left(\left| \left(\sum_{v=1}^l \frac{e_v}{m_v} P_v^x \right)_{kk} \right|^2 + \dots \right).$$

Mínt hogy a \mathbf{H}_0 külön az \mathbf{S} rendszer energiája, egyenlő a kinetikus és a potenciális energia összegével:

$$\mathbf{H}_0 = \sum_{v=1}^l \frac{1}{2m_v} ((P_v^x)^2 + (P_v^y)^2 + (P_v^z)^2) + V(Q_1^x, Q_1^y, Q_1^z, \dots, Q_l^x, Q_l^y, Q_l^z).$$

Ekkor igaz, hogy¹⁵³

$$\mathbf{H}_0 Q_v^x - Q_v^x \mathbf{H}_0 = \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{m_v} P_v^x.$$

A \mathbf{H}_0 diagonális mátrix, melynek diagonális elemei W_1, W_2, \dots [$(\mathbf{H}_0)_{kj} = W_k \delta_{kj}$]. Ebből a mátrixelemekre következik, hogy

$$\begin{aligned} (P_v^x)_{k\bar{k}} &= \frac{2\pi i m_v}{h} (\mathbf{H}_0 Q_v^x - Q_v^x \mathbf{H}_0)_{k\bar{k}} = \\ &= \frac{2\pi i m_v}{h} (W_k - W_{\bar{k}}) (Q_v^x)_{k\bar{k}} = \pm 2i\pi m_v \bar{v}_{k\bar{k}} (Q_v^x)_{k\bar{k}}. \end{aligned}$$

Tehát

$$W_{k\bar{k}}(\rho) = \frac{16\pi^3 c^2}{3vh^2} \bar{v}_{k\bar{k}}^2 \left(\left| \left(\sum_{v=1}^l e_v Q_v^x \right)_{k\bar{k}} \right|^2 + \dots \right).$$

Ezt Θ_k -ba helyettesítve kapjuk, hogy

$$\Theta_k = \frac{8\pi^3}{3h^2} \left(\left| \left(\sum_{v=1}^l e_v Q_v^x \right)_{k\bar{k}} \right|^2 + \dots \right) \cdot I t.$$

Bevezetve a

$$W_{k\bar{k}} = \left| \left(\sum_{v=1}^l e_v Q_v^x \right)_{k\bar{k}} \right|^2 + \dots$$

mennyiséget, az eredmény a következőképpen értelmezhető: az S atom az alábbi átmeneteket (kvantumugrásokat) szenved el:

1. Átmenet a magasabb energiájú \bar{k} állapotba ($W_{\bar{k}} > W_k$). Az átmenetek száma másodpercenként:

$$\frac{8\pi^3}{3h^2} W_{k\bar{k}} I \left(\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right),$$

vagyis arányos a megfelelő $(W_{\bar{k}} - W_k)/h$ Bohr-rezgésszámú sugárzási tér intenzitásával.

2. Átmenet az alacsonyabb energiájú \bar{k} állapotba ($W_{\bar{k}} < W_k$). Az átmenetek száma másodpercenként:

$$\frac{8\pi^3}{3h^2} W_{k\bar{k}} I \left(\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right),$$

vagyis arányos a megfelelő $(W_k - W_{\bar{k}})/h$ Bohr-rezgésszámú sugárzási tér intenzitásával.

3. Átmenet ezenkívül az alacsonyabb energiájú \bar{k} állapotba ($W_{\bar{k}} < W_k$); az átmenetek száma másodpercenként:

$$\frac{64\pi^4}{3hc^3} W_{k\bar{k}} \left(\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right),$$

vagyis független a jelenlevő sugárzási tértől.

Az 1. a sugárzási térből történő elnyelésnek, a 2. a sugárzási tér által gerjesztett kibocsátásnak felel meg, a 3. spontán kibocsátást jelent, amelyet minden olyan atom elszív, amely még nem a legalacsonyabb energiájú stabilis stacionárius állapotban van.

E három átmenet mechanizmusát EINSTEIN már a kvantummechanika felállítására előtt termodinamikai megfontolások segítségével megtalálta.¹⁵⁴ A W_{kk} átmeneti valószínűség értéke azonban hiányzott. A

$$W_{kk} = \left| \left(\sum_{v=1}^l e_v Q_v^x \right)_{kk} \right|^2 + \left| \left(\sum_{v=1}^l e_v Q_v^y \right)_{kk} \right|^2 + \left| \left(\sum_{v=1}^l e_v Q_v^z \right)_{kk} \right|^2$$

kifejezés, mint már említettük, HEISENBERGTŐL származik. Ezt most DIRAC módszerével az általános elméletből vezettük le.

IV. AZ ELMÉLET DEDUKTÍV FELÉPÍTÉSE

1. A statisztikus elmélet alapjai

A III. fejezetben a kvantummechanika minden állítását sikerült (az ott E_2 -vel jelölt)

$$(E.) \quad V(\mathfrak{R}, \varphi) = (R\varphi, \varphi)$$

képletre visszavezetni. (Itt $V(\mathfrak{R}, \varphi)$ az \mathfrak{R} mennyiség várható értéke a φ állapotban, R pedig \mathfrak{R} operátora.) Az alábbiakban megmutatjuk, hogy maga ez a képlet miként vezethető le néhány általános kvalitatív feltevésből. Ezzel egyidőben a kvantummechanikának a III. fejezetben kiépített egész szerkezetét is ellenőrizzük. Mindezek előtt néhány megjegyzést kell tennünk.

A φ állapotban \mathfrak{R} várható értéke $\rho = (R\varphi, \varphi)$, ε^2 szórásnégyzete pedig az $(\mathfrak{R} - \rho)^2$ mennyiség várható értéke, vagyis $((R - \rho \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = \|R\varphi\|^2 - (R\varphi, \varphi)^2$ (ezeket mind E . alapján számítjuk ki, lásd a 130. jegyzetet). Ez utóbbi általában nagyobb zérusnál (és csak akkor zérus, ha $R\varphi = \rho\varphi$, lásd a III. 3. fejezetet), így \mathfrak{R} -nek statisztikus eloszlása van még az egyetlen φ állapotban is (ezt már ismételten hangsúlyoztuk). E statisztikus jelleg azonban még jobban kidomborodik, ha még azt sem tudjuk, hogy voltaképpen melyik állapottal van dolgunk, például amikor W_1, W_2, \dots valószínűséggel több $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotot kell a rendszer leírására használni ($w_1 \geq 0, w_2 \geq 0, w_1 + w_2 + \dots = 1$). Ekkor az \mathfrak{R} mennyiség várható értéke a valószínűségi számítás általános törvényei szerint

$$\rho' = \sum_n w_n \cdot (R\varphi_n, \varphi_n).$$

Általában érvényes, hogy $(R\varphi, \varphi) = \text{Sp}(P_{[\varphi]}R)$. Valóban, válasszuk meg a ψ_1, ψ_2, \dots teljes ortonormált rendszert úgy, hogy ψ_1 egyenlő legyen φ -vel (így ψ_2, ψ_3, \dots φ -re ortogonális), ekkor

$$P_{[\varphi]}\psi_n = \begin{cases} \varphi, & \text{ha } n=1, \\ 0, & \text{egyébként,} \end{cases}$$

így

$$\begin{aligned} \text{Sp}(P_{[\varphi]} \cdot R) &= \sum_{m, n} (P_{[\varphi]}\psi_n, \psi_m) (R\psi_m, \psi_n) = \\ &= \sum_m (\varphi, \psi_m) (R\psi_m, \varphi) = (R\varphi, \varphi). \end{aligned}$$

Így

$$\rho' = \text{Sp} \left(\left\{ \sum_n w_n P_{[\varphi_n]} \right\} \cdot R \right).$$

Az

$$U = \sum_n w_n P_{[\varphi_n]}$$

operátor definit, mivel $P_{[\varphi]}$ is az és $w_n \geq 0$, spurja pedig $\sum_n w_n = 1$, tekintve, hogy $\text{Sp } P_{[\varphi]} = 1$.

Ily módon U az állapotok előbb említett keverékét statisztikus szempontból kimerítően jellemzi:

$$\rho' = \text{Sp}(UR).$$

Hangsúlyozzuk, hogy a tiszta állapotok mellett az ilyen állapotkeverékeket sem szabad majd figyelmen kívül hagyni. Előbb azonban általánosabb kérdésekkel foglalkozunk.

Felejtjük el most az egész kvantummechanikát. Tekintsük az S rendszert,¹⁵⁵ amelyet a kísérletező számára a valóban mérhető mennyiségek és e mennyiségek között fennálló függvénykapcsolatok összessége jellemez. Minden mennyiséghez hozzáértjük a rá vonatkozó mérési utasítást és azt is, hogy értékét hogyan kell leolvasni, vagy kiszámítani a mérőberendezés jelzőrendszerének állásából. Ha \mathfrak{R} egy fizikai mennyiség és $f(x)$ tetszőleges függvény, akkor az $f(\mathfrak{R})$ mennyiség meghatározása a következő: először megmérjük \mathfrak{R} -et, legyen ennek értéke a . Az $f(\mathfrak{R})$ értéke, ekkor $f(a)$. Amint látjuk, minden $f(\mathfrak{R})$ mennyiség (\mathfrak{R} rögzített, $f(x)$ tetszőleges függvény) \mathfrak{R} -rel egyidőben mérhető. Ez az egyszerre mérhető mennyiségekre az első példa. Általában a két (vagy több) \mathfrak{R} , \mathfrak{S} mennyiséget egyszerre vagy egyidejűleg mérhetőnek nevezzük, ha van olyan berendezés, mely mindkettőjüket egyszerre méri meg, bár megfelelő értéküket a leolvasásból esetleg különbözőképpen kell kiszámítani. (A klasszikus mechanikában minden mennyiség egyszerre mérhető, amint azonban azt a III. 3. fejezetben beláttuk, a kvantummechanikában nem ez a helyzet.) Az ilyen mennyiségekre az $f(x, y)$ kétváltozós függvény segítségével definiálható az $f(\mathfrak{R}, \mathfrak{S})$ mennyiség is. Ezt is megmérjük, ha \mathfrak{R} -et és \mathfrak{S} -et egyszerre mérjük, s ha ez utóbbiak értéke a , illetőleg b , akkor $f(\mathfrak{R}, \mathfrak{S})$ értéke $f(a, b)$ lesz. Gondoljuk meg azonban, hogy $f(\mathfrak{R}, \mathfrak{S})$ képzése értelmét veszti, ha \mathfrak{R} és \mathfrak{S} nem mérhető egyszerre; nincs mód a mérési elrendezés megadására.

Nem csupán az egyetlen S objektumra vonatkozó fizikai mennyiségek vizsgálatát végezhetjük el azonban olyankor, amikor kétségek merülnek fel több mennyiség egyidejű mérhetőségével kapcsolatban. Ilyen esetben igen sok, S_1, \dots, S_N rendszerből álló statisztikus sokaságokat is vizsgálhatunk. Itt S -nek N számú modelljéről van szó, N nagy.¹⁵⁶ Az ilyen $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságban nem \mathfrak{R} értékét, hanem értékeinek elosztását mérjük meg, vagyis valamely $a' < a \leq a''$ (a', a'' adott $a' < a''$) intervallumra S_1, \dots, S_N közül azoknak a számát, amelyekben \mathfrak{R} értéke ebbe az

intervallumba esik. Ezt a számot N -nel osztva kapjuk meg a $w(a', a'') = w(a'') - w(a')$ valószínűségi függvényt.¹⁵⁷ Az ilyen sokaságok vizsgálatának lényeges előnyei a következők:

1. Még akkor is, ha az \mathfrak{R} mennyiség mérése az S rendszert lényeges mértékben megváltoztatja (a kvantummechanikában, az elemi folyamatok fizikájában valóban ez a helyzet, mert amint azt a III. 4. fejezetben beláttuk, a mérés kölcsönhatása a megfigyelt rendszerrel ilyen esetekben ugyanolyan nagyságrendű, mint maga a rendszer, vagy annak megfigyelt részei), az \mathfrak{R} valószínűségi eloszlásának statisztikus meghatározása az $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságban magát a sokaságot tetszőlegesen kevéssé változtatja meg, ha N elég nagy.

2. Még akkor is, ha a két (vagy több) \mathfrak{R} , \mathfrak{S} mennyiség az S rendszerben nem mérhető egyszerre, adott $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságban valószínűségi eloszlásai tetszőlegesen pontosan megmérhetők, ha N elég nagy.

Valóban, az N elemű sokaságban az \mathfrak{R} mennyiség értékeinek eloszlására vonatkozó statisztikus megfigyeléseket nem kell az összes S_1, \dots, S_N elemen végrehajtani, e célra elegendő bármely M elemű részsokaság ($M \leq N$), ha mind M , mind pedig N elég nagy, de M igen kicsiny N -hez képest.¹⁵⁸ Ekkor csak a sokaság M/N -ed részére vannak hatással a mérés miatt bekövetkező változások. E hatás tetszőlegesen kicsiny, ha M/N -et elég kicsinnyé választjuk, s ez még nagy M esetén is lehetséges, ha N elég nagy, s ezt állítottuk 1.-ben. A két (vagy több) \mathfrak{R} , \mathfrak{S} mennyiség egyidejű méréséhez két részsokaság kell, mondjuk $[S_1, \dots, S_M]$ és $[S_{M+1}, \dots, S_{2M}]$ ($2M \leq N$), s ezek közül az elsőt \mathfrak{R} , a másodikat \mathfrak{S} statisztikájának meghatározására használjuk fel. A két mérés egymást nem zavarja, bár mindkettőt ugyanazon $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságon hajtottuk végre, és a sokaságot a mérés tetszőlegesen kevéssé változtatta meg, ha $2M/N$ elég kicsiny, amely még nagy M esetén is lehetséges, ha N elég nagy, és ezt állítottuk 2.-ban.

Látható, hogy azért vezettük be a statisztikus sokaságokat, vagyis a valószínűségi módszereket, mert egyrészt a mérés a rendszert megzavarhatja, másrészt több mennyiség nem szükségképpen mérhető egyszerre. Az általános elméletnek e körülményekkel számolnia kell, hiszen, amire már korábban is gyanakodtak,¹⁵⁹ s amit a pontos elemzés is igazol, e körülmények megvalósulnak az elemi folyamatokban (lásd a III. 4. fejezetet). A statisztikus sokaságokkal e nehézségektől megszabadulunk, s az objektív leírás lehetővé válik (e leírás független az egyedi mérés kimenetelétől és attól, hogy adott állapotban egyszerre nem mérhető két mennyiség közül melyiket mérjük meg).

Az ilyen sokaságok esetén nem meglepő, hogy az \mathfrak{R} fizikai mennyiségnek nincs éles értéke, vagyis, hogy eloszlási függvénye nem csúcsosodik ki minden határon túl egyetlen a_0 érték körül,¹⁶⁰ hanem több érték vagy értékintervallum lehetséges és a szórásnégyzet nem tűnik el. E viselkedésnek azonban két különböző oka is lehet.

I. Sokaságunk S_1, \dots, S_N egyedi rendszerei különböző állapotokban lehetnek, s így a sokaságot ezek relatív gyakorisága határozza meg. Annak, hogy ebben az esetben a fizikai mennyiségekre nem kapunk éles értéket, az az oka, hogy információ hiányzik: nem tudjuk, hogy milyen állapoton végezzük a mérést, s ezért nem tudjuk az eredményt megjósolni.

II. Az S_1, \dots, S_N egyedi rendszerek valamennyien ugyanabban az állapotban vannak, azonban a természet törvényei nem kauzálisak. Ilyenkor a szórás oka nem az információ hiánya, hanem maga a természet, amely nem követi az „elégés okok” elvét.

Az **I.** eset jól ismert, míg a **II.** fontos és új. Megjegyezzük, hogy bár ez utóbbi eset lehetőségét először gyanakodva szemléljük, majd mégis objektív ismérvet fogunk találni, melynek alapján dönteni tudunk, hogy bekövetkezik-e vagy sem.

Úgy tűnik első pillanatban, hogy a **II.** eset megvalósulása, sőt értelmezhetősége ellen komoly érvek szólnak, ám úgy gondoljuk, hogy ezek az érvek nem állják meg a helyüket, s bizonyos nehézségekből (például a kvantummechanikában) nincs más kiút, mint a **II.** eset. Hozzálátunk tehát a **II.** lehetőség megvalósulásával kapcsolatos nehézségek megvizsgálásához.

Azt hozhatnánk fel **II.** ellen, hogy a természet egyáltalán nem sértheti meg az „elégés okok” elvét, vagyis a kauzalitást, mert ez nem egyéb, mint az azonosság definíciója. Más szóval: az a tétel, hogy két azonos objektum, S_1 és S_2 — tehát az S rendszer két azonos állapotú másolata — azonos marad az összes elképzelhető kölcsönhatás során, azért igaz, mert tautológia. Hiszen ha S_1 és S_2 különbözőképpen reagálhatna a kölcsönhatás során ugyanarra a hatásra (vagyis, ha az \mathfrak{R} mennyiség mérésekor különböző értékeket adnának), akkor nem neveztük volna őket azonosnak. Ezért az olyan $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságban, melyben \mathfrak{R} értékének van szórása, az egyes S_1, \dots, S_N rendszerek (definíció szerint) nem lehetnek ugyanabban az állapotban. (A kvantummechanika esetében ez a következőt jelentené: Mivel az \mathfrak{R} mennyiség mérése több olyan rendszeren, amelyek valamennyien a φ hullámfüggvénnyel jellemzett állapotban vannak, különböző értékeket szolgáltat (ha φ nem az \mathfrak{R} -nek megfelelő R operátor sajátfüggvénye),¹⁶¹ e rendszerek nem lehetnek egymással egyenlők, tehát a hullámfüggvénnyel történő leírás nem teljes. Következésképpen léteznek még további változók is, a „rejtett paraméterek”, amelyekről a III. 2. fejezetben már szóltunk. Rövidesen meglátjuk majd, hogy ez milyen nehézségeket jelent.) Az olyan igen nagy statisztikus sokaság esetén tehát, amelyben valamelyik \mathfrak{R} mennyiségnek van szórása, fenn kell állnia annak a lehetőségnek, hogy a sokaságot felbonthassuk több különböző módon elkészített részre (elemeinek különböző állapotai szerint). Ez annál is inkább kézenfekvő, mert ilyen felbontásra egyszerű módszer kínálkozik: nevezetesen felbonthatjuk \mathfrak{R} -nek a sokaság elemein felvett különböző értékei szerint. Így, miután minden $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \mathfrak{I}, \dots$ mennyiség szerint elvégeztük ezt a felbontást, vagy felosztást, egy valóban homogén sokaságot kapnánk, s e mennyiségnek már nem lenne szórása az egyes részsokaságokban.

Először is, a fenti mondatokban kifejezett állítások nem állják meg a helyüket, mert nem vettük figyelembe, hogy a mérés megváltoztatja a mért rendszert. Ha \mathfrak{R} -et az összes objektumon megmérjük (és most az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy \mathfrak{R} csak az a_1, a_2 két értéket veheti fel) és az S'_1, \dots, S'_{N_1} rendszeren az eredmény a_1 , az $S''_1, \dots, S''_{N-N_1}$ rendszerén pedig a_2 , akkor sem az $[S'_1, \dots, S'_{N_1}]$, sem pedig az $[S''_1, \dots, S''_{N-N_1}]$ sokaságon nem kapunk szórást (\mathfrak{R} értéke vagy a_1 , vagy a_2). Ez azonban nem az előbb említett felbontása az $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságnak, hiszen az

egyes rendszereket az \mathfrak{R} mérése megváltoztatja. Az 1. alapján viszont mód van arra, hogy \mathfrak{R} értékeinek eloszlását úgy határozzuk meg, hogy $[S_1, \dots, S_N]$ csak kicsit változzék meg (a mérést csak az S_1, \dots, S_M rendszeren végezzük el, M nagy, de M/N kicsiny). Ez az eljárás azonban nem vezet a kívánt felbontáshoz, mivel S_1, \dots, S_N legnagyobb részén (nevezetesen S_{N+1}, \dots, S_N esetében) nem bizonyosodunk meg arról, hogy \mathfrak{R} az egyes esetekben milyen értéket vesz fel. Most már látható, hogy a fenti megadott módszer nem alkalmas teljesen homogén sokaságok előállítására. Mérjük meg ugyanis az \mathfrak{S} mennyiséget is (legyen ennek is csak két értéke: b_1, b_2) az $[S'_1, \dots, S'_{N_1}]$ és az $[S''_1, \dots, S''_{N-N_1}]$ sokaságon. Legyen az eredmény b_1 az S''_1, \dots, S''_{N_1} és $S^V_1, \dots, S^V_{N_2}$, b_2 pedig $S^IV_1, \dots, S^IV_{N_1-N_{11}}$ és $S^IV_1, \dots, S^IV_{N_1-N_{12}}$ esetében. Így \mathfrak{S} -nek nincs szórása az $[S''_1, \dots, S''_{N_1}]$, $[S^IV_1, \dots, S^IV_{N_1-N_{11}}]$ és az $[S^V_1, \dots, S^V_{N_2}]$, $[S^IV_1, \dots, S^IV_{N_1-N_{12}}]$ sokaságokon (értéke állandó: b_1, b_2 és ismét b_1, b_2). Azonban, noha az első két sokaság $[S'_1, \dots, S'_{N_1}]$, a második kettő pedig $[S''_1, \dots, S''_{N-N_1}]$ része, amelyeken \mathfrak{R} -nek nem volt szórása, most már lehet, hogy szórása lesz, mert \mathfrak{S} mérése e sokaságok egyes rendszereit megváltoztatta. Most már látszik, hogy nem jutunk előre, mert minden lépés elrontja az előző eredményét,¹⁶² és az egymásutáni mérések megismétlésével sem tudunk rendet teremteni. Az atom esetén a fizikai világ határán vagyunk, és minden mérés a mért objektum nagyságrendjébe eső háborgatást jelent, amely magát az objektumot alapvetően megváltoztatja. Így e nehézségek gyökere a határozatlansági összefüggésekben rejlik.

Nincs tehát mód arra, hogy a szórásos sokaságokat tovább bontsuk (anélkül, hogy elemeiket megváltoztatnánk) és arra sem, hogy olyan homogén sokaságokig jussunk el, amelyeknél már nincs szórás. A legvégső sokaságok azok, amelyeket szokás szerint az egyes részecskékből felépítetteknek tekintünk; e részecskék mind azonosak és kauzálisan meghatározottak. Megpróbálhatjuk azonban fenntartani azt az elképzelést, hogy minden szórásos sokaság felosztható két (vagy több) egymástól és az eredeti sokaságtól különböző részre anélkül, hogy elemeiket meg kellene változtatni. Más szóval e felosztás olyan lenne, hogy az eredményül kapott két sokaság szuperpozíciója ismét előállítaná az eredeti sokaságot. Amint látjuk, az a törekvés, hogy a kauzalitást mint azonosságdefiníciót értelmezzük, olyan ténykérdéshez vezet, amelyre választ lehet és kell adni, s amelyre a válasz, elképzelhető, hogy nemleges. A kérdés a következő: lehetséges-e bármely olyan $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságot, amelyre létezik olyan \mathfrak{R} mennyiség, melynek van szórása, két (vagy több) egymástól és az eredetitől különböző sokaság szuperpozíciójaként reprezentálni? (Kettőnél több, mondjuk $n = 3, 4, \dots$ visszavezethető kettőre, ha az első és a további $n - 1$ szuperpozícióját tekintjük.)

Ha $[S_1, \dots, S_N]$ a keveréke (egyesítése) volna az $[S'_1, \dots, S'_p]$ és az $[S''_1, \dots, S''_q]$ sokaságoknak, akkor bármely \mathfrak{R} mennyiség $w_{\mathfrak{R}}(a)$ valószínűségi függvénye kifejezhető lenne a két részsokaság $w'_{\mathfrak{R}}(a)$ és $w''_{\mathfrak{R}}(a)$ valószínűségi függvényének segítségével:

(M₁.)

$$w_{\mathfrak{R}}(a) = \alpha w'_{\mathfrak{R}}(a) + \beta w''_{\mathfrak{R}}(a)$$

$$\alpha > 0, \quad \beta > 0, \quad \alpha + \beta = 1.$$

Itt $\alpha = P/N$, $\beta = Q/N$, ($N = P + Q$) az \mathfrak{R} -től független. Alapjában ez tisztán matematikai probléma: ha egy sokaságban léteznek $w_{\mathfrak{R}}(a)$ valószínűségi függvényű szórásos \mathfrak{R} mennyiségek (hogy $w_{\mathfrak{R}}(a)$ -ra ez mit jelent, arról a 160. jegyzetben szólunk), akkor létezik-e két másik olyan sokaság, hogy ha a megfelelő valószínűségi függvény $w'_{\mathfrak{R}}(a)$, illetőleg $w''_{\mathfrak{R}}(a)$, akkor \mathbf{M}_1 minden \mathfrak{R} -re érvényes? Ezt másként is megfogalmazhatjuk, ha a sokaságot nem az \mathfrak{R} mennyiségek $w_{\mathfrak{R}}(a)$ valószínűségi függvényével, hanem várható értékeivel jellemezzük:

$$V(\mathfrak{R}) = \int_{-\infty}^{+\infty} a \, dw_{\mathfrak{R}}(a).$$

A sokaság szórásmentes, ha minden \mathfrak{R} -re

$$V([\mathfrak{R} - V(\mathfrak{R})]^2) = V(\mathfrak{R}^2) - [V(\mathfrak{R})]^2$$

eltűnik (lásd a 160. jegyzetet). Vagyis

$$(\text{Dis}_1) \quad V(\mathfrak{R}^2) = [V(\mathfrak{R})]^2.$$

Kérdésünk most így hangzik: Ha a sokaság nem szórásmentes, akkor található-e olyan két másik sokaság $V'(\mathfrak{R})$ és $V''(\mathfrak{R})$ várható értékkel, hogy

$$V(\mathfrak{R}) \neq V'(\mathfrak{R}) \neq V''(\mathfrak{R})$$

és

$$(\text{M}_2) \quad V(\mathfrak{R}) = \alpha V'(\mathfrak{R}) + \beta V''(\mathfrak{R})$$

$$\alpha > 0, \quad \beta > 0, \quad \alpha + \beta = 1$$

minden \mathfrak{R} -re igaz legyen (α , β \mathfrak{R} -től független). Vegyük észre, hogy egyetlen \mathfrak{R} mennyiség esetén a $V(\mathfrak{R})$ szám nem helyettesíti a $w_{\mathfrak{R}}(a)$ függvényt, viszont ha az összes $V(\mathfrak{R})$ -et ismerjük, akkor ismerjük $w_{\mathfrak{R}}(a)$ -t is, és viszont. Valóban, ha $f_a(x)$ az

$$f_a(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } x \leq a, \\ 0, & \text{ha } x > a \end{cases}$$

függvény, akkor

$$w_{\mathfrak{R}}(a) = V(f_a(\mathfrak{R})).$$

E kérdés matematikai kezelése egyszerűbb, ha az $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságok helyett a megfelelő $V(\mathfrak{R})$ -eket tekintjük. Minden sokasághoz tartozik egy ilyen függvény; ez S -nek az \mathfrak{R} fizikai mennyiségein van értelmezve és értéke valós szám. E függvény kimerítően jellemzi a sokaságot valamennyi statisztikai tulajdonságával együtt (lásd a fenti eszmefuttatást az összefüggésről $V(\mathfrak{R})$ és $w_{\mathfrak{R}}(a)$ között). Természetesen ki kell még találni, hogy egy \mathfrak{R} függvény milyen tulajdonságokkal rendelkezék ahhoz, hogy $V(\mathfrak{R})$ a megfelelő sokaságé legyen. Mihelyt ezt megtettük, kimondhatjuk a következő definíciókat:

α) Az olyan \mathfrak{R} -függvényt, amely valamilyen $V(\mathfrak{R})$, szórásmentesnek nevezzük, ha kielégíti a Dis_1 feltételt.

β) Az olyan \mathfrak{R} -függvényt, amely valamilyen $V(\mathfrak{R})$, homogénnek vagy tisztának nevezünk, ha az \mathbf{M}_2 teljesüléséből következik, hogy

$$V(\mathfrak{R}) = V'(\mathfrak{R}) = V''(\mathfrak{R}).$$

E függvények fogalmából elég kézenfekvőnek látszik, és be is fogjuk bizonyítani, hogy minden szórásmentes $V(\mathfrak{R})$ függvény tiszta. Pillanatnyilag a kérdés azonban az, hogy fordítva, vajon minden tiszta $V(\mathfrak{R})$ -függvény szórásmentes-e?

Világos, hogy minden $V(\mathfrak{R})$ -függvénynek rendelkeznie kell az alábbi tulajdonságokkal:

A. Ha az \mathfrak{R} mennyiség azonosan 1 (vagyis „mérési utasítása” az, hogy nem kell mérést végezni, mert \mathfrak{R} értéke mindig 1), akkor $V(\mathfrak{R}) = 1$.

B. Bármely \mathfrak{R} -re és bármely valós számra $V(a\mathfrak{R}) = aV(\mathfrak{R})$.¹⁶³

C. Ha \mathfrak{R} természete szerint nemnegatív, például egy másik \mathfrak{S} mennyiség négyzete¹⁶³, akkor $V(\mathfrak{R}) \geq 0$.

D. Ha az $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ mennyiségek egyszerre mérhetők, akkor $V(\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots) = V(\mathfrak{R}) + V(\mathfrak{S}) + \dots$ (Egyszerre nem mérhető $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ esetén $\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots$ nincs értelmezve, lásd fentebb.)

Mindez következik a kérdéses mennyiségek meghatározásából (tehát mérési utasításaikból) és a várható értékek a megfelelően nagy statisztikus sokaságon végzett mérések eredményeinek aritmetikai átlagaként történő definíciójából. A **D**-t illetően meg kell jegyezni, hogy helyessége a következő valószínűségszámítási tételen alapul: összeg várható értéke az egyes tagok várható értékeinek az összege, attól függetlenül, hogy ezek között fennállnak-e valószínűségi összefüggések, vagy sem (ellentétben például a szorzat várható értékével). Az, hogy **D**-t csak egyszerre mérhető $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ esetén mondtuk ki, természetes, hiszen különben nincs az $\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots$ -nek értelme.

A kvantummechanika algoritmusa azonban tartalmaz még egy olyan műveletet, amely a most megvizsgáltnál általánosabb; nevezetesen két tetszőleges, nem feltétlenül egyszerre megfigyelhető mennyiség összeadását. E művelet azért lehetséges, mert az R és az S hermitikus operátor $R + S$ összege is hermitikus akkor is, ha R és S egymással nem cserélhető fel, míg például az RS szorzat csak akkor hermitikus, ha R és S felcserélhető. Bármely φ állapotban a várható értékek additívak: $(R\varphi, \varphi) + (S\varphi, \varphi) = ((R + S)\varphi, \varphi)$ (lásd **E**₂-öt a III. 1. fejezetben). Ugyanez érvényes akárhány tag összegére is. Ezt most beépítjük általános feltevéseink közé (egyelőre nem vonatkoztatva a kvantummechanikára).

E. Legyen $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ tetszőleges mennyiség. Ekkor létezik olyan további $\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots$ mennyiség (ez nem függ a $V(\mathfrak{R})$ függvény kiválasztásától), hogy $V(\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots) = V(\mathfrak{R}) + V(\mathfrak{S}) + \dots$.¹⁶⁴

Ha $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ egyszerre mérhető, akkor ennek (**D**. miatt) a közönséges értelemben vett összegnek kell lennie. Általában azonban az összeget **E**. implicit módon jellemzi és nem nyújt semmilyen módszert arra, hogy $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ mérési utasításából $\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots$ -re mérési utasítást alkossunk.¹⁶⁴

Meg kell továbbá jegyezni, hogy nemcsak a várható értékek függvényeit, hanem viszonylagos értékeket előállító függvényeket is meg akarunk engedni, vagyis **A**-t el

kívánjuk ejteni. Ha $V(1)$ (amely C . miatt nemnegatív) véges és nem zérus, akkor ennek nincs jelentősége, mivel a $V(\mathfrak{R})/V(1)$ függvényre minden kikötésünk teljesül. E kiterjesztést a $V(1) = \infty$ lehetőség kedvéért tesszük meg. Valóban, vannak esetek, amikor az igazi valószínűségek helyett jobb a relatív valószínűségekkel dolgozni. (A $V(1)$ a teljes valószínűségnek felel meg.) Ezt a legjobban a következő egyszerű példán bemutatni: Legyen a vizsgált rendszer egydimenziós részecske és legyen a statisztikus eloszlás olyan, hogy e részecske egyenlő valószínűséggel legyen megtalálható bárhol a végtelen intervallumon. Ekkor bármely véges intervallum valószínűsége zérus, azonban a helyek egyenlő valószínűségét nem így fejezzük ki, hanem úgy, hogy véges intervallumok valószínűségeinek aránya megegyezik a hosszúságuk arányával. Tekintve, hogy $0/0$ -nak nincs értelme, ezt csak úgy tudjuk kifejezni, hogy relatív valószínűség gyanánt az intervallum hosszát vezetjük be, ám ekkor a teljes relatív valószínűség nyilvánvalóan végtelen.

E megfontolások alapján a következő feltételekhez jutunk (A' . a C -nek, B' . pedig B -nek, D -nek és E -nek felel meg):

A' . Ha az \mathfrak{R} mennyiség természete szerint nemnegatív, például egy másik \mathfrak{E} mennyiség négyzete, akkor $V(\mathfrak{R}) \geq 0$.

B' . Ha \mathfrak{R} , \mathfrak{E}, \dots tetszőleges mennyiség és a, b, \dots valós szám, akkor $V(a\mathfrak{R} + b\mathfrak{E} + \dots) = aV(\mathfrak{R}) + bV(\mathfrak{E}) + \dots$

Hangsúlyozzuk a következőket:

1. Mivel csupán relatív várható értékekkel dolgozunk, a $V(\mathfrak{R})$ függvény a $cV(\mathfrak{R})$ függvénytől lényegében nem különbözik (c pozitív állandó).

2. $V(\mathfrak{R}) \equiv 0$ (minden \mathfrak{R} -re) nem nyújt információt, így e függvényt kizárjuk.

3. Abszolút, vagyis helyesen normált várható értékek akkor léteznek, ha $V(1) = 1$. A $V(1)$ mindenestre nemnegatív A' . miatt, és ha véges és nem 0, akkor 1 ($c = 1/V(1)$ segítségével ez helyesen normált várható értékhez vezet). Ha $V(1) = 0$, akkor 2 miatt — amint azt majd megmutatjuk — ez az eset elvetendő. Ha viszont $V(1) = \infty$, akkor csak lényegében nem normálható (relatív) statisztika lehetséges.

Vissza kell még térni az α) és a β) definícióhoz. Az 1 . miatt M_2 , a következő egyszerűbb feltételekkel helyettesítendő:

$$M_3, \quad V(\mathfrak{R}) = V'(\mathfrak{R}) + V''(\mathfrak{R}).$$

A Dis_1 esetén vegyük észre, hogy voltaképpen a $V(1) = 1$ esetről van szó. Ha ugyanis $V(1) = \infty$, akkor a szórásmentesség nem definiálható, ez ugyanis annyit tesz, hogy $V((\mathfrak{R} - \rho)^2) = 0$, ahol ρ \mathfrak{R} -nek abszolút várható értéke, vagyis $V(\mathfrak{R})/V(1)$, amelynek ∞/∞ esetén nincs értelme¹⁶⁵. Az α) és β) új alakja tehát a következő:

α') Az olyan \mathfrak{R} függvényt, amely valamilyen $V(\mathfrak{R})$ és amelyre $V(1) \neq 0$ és véges (ekkor 1 . miatt feltételezhetjük, hogy $V(1) = 1$), akkor nevezzük szórásmentesnek, ha teljesíti a Dis_1 feltételt.

β') Az olyan \mathfrak{R} függvényt, amely valamilyen $V(\mathfrak{R})$, homogénnek, vagy tisztának nevezzük, ha az M_2 teljesüléséből következik, hogy

$$V'(\mathfrak{R}) = c'V(\mathfrak{R}) \quad \text{és} \quad V''(\mathfrak{R}) = c''V(\mathfrak{R})$$

(c' , c'' állandó $c' + c'' = 1$ és A' . valamint 1 . és 2 . miatt $c' > 0$, $c'' > 0$).

Az A' , B' és α' , β' alapján most már módunk van arra, hogy a kauzális viselkedés kérdésében döntsünk, mielőtt ismerjük S fizikai mennyiségeit, és a köztük fennálló függvénykapcsolatokat. A következő szakaszban ezt tesszük meg a kvantummechanika keretein belül.

E szakasz befejezésekképpen még két megjegyzést teszünk.

Az első a $V(1)=0$ esetre vonatkozik. A B' -ből következik, hogy $V(c)=0$, így ha az \mathfrak{R} mennyiség korlátos, tehát $c' \leq \mathfrak{R} \leq c''$, akkor A' miatt $V(c'' - \mathfrak{R}) \geq 0$, $V(\mathfrak{R} - c') \geq 0$, s így B' folytán $V(c') \leq V(\mathfrak{R}) \leq V(c'')$, tehát $V(\mathfrak{R})=0$. Legyen most \mathfrak{R} tetszőleges és $f_1(x), f_2(x), \dots$ korlátos függvények olyan sorozata, amelyre

$$f_1(x) + f_2(x) + \dots = x.$$

(Ilyen például az

$$f_1(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad f_n(x) = \frac{\sin nx}{nx} - \frac{\sin (n-1)x}{(n-1)x}$$

$n=2, 3, \dots$ sorozat). Ekkor $V(f_n(\mathfrak{R}))=0$ ($n=1, 2, \dots$), s így B' miatt $V(\mathfrak{R})=0$. Következésképpen a 2. alapján a $V(1)=0$ esetet valóban ki kell zárni.

Másodszor, érdekes, hogy Dis_1 , vagyis hogy $V(\mathfrak{R}^2)=[V(\mathfrak{R})]^2$ jellemzi a szórásmentes esetet, noha ilyenkor a

$$(\text{Dis}_2) \quad V(f(\mathfrak{R})) = f(V(\mathfrak{R}))$$

összefüggésnek minden f -re fenn kell állnia, hiszen ez esetben $V(\mathfrak{R})$ nem más, mint \mathfrak{R} értéke és $V(f(\mathfrak{R}))$ meg $f(\mathfrak{R})$ értéke. A Dis_1 speciális esete Dis_2 -nek: legyen ugyanis ebben $f(x)=x^2$. Mégis, miért elég Dis_1 -et feltenni? A válasz a következő. Ha Dis_2 az $f(x)=x^2$ esetén érvényes, akkor minden f -re is az. Az x^2 -et bármely más folytonos és konvex függvénnyel is helyettesíthetnénk (az ilyen függvényre $f\left(\frac{x+y}{2}\right) < \frac{f(x)+f(y)}{2}$, ha $x \neq y$). Ennek bizonyítására nem térünk ki.

2. A statisztikus képletek bizonyítása

Mint tudjuk (lásd például a III. 5. fejezet gondolatmenetét), a kvantummechanikai rendszer minden fizikai mennyiségének megfelel egy hipermaximális hermitikus operátor. Kézenfekvő feltételezni, hogy e megfeleltetés egy-egyértelmű, vagyis hogy minden hipermaximális hermitikus operátornak megfelel egy fizikai mennyiség. (Ezt egyébként a III. 3. fejezetben fel is használtuk.) Ebben az esetben a következő szabályok érvényesek (lásd F.-et és L.-et a III. 5. fejezetben és a IV. 1. fejezet végén az okfejtést):

I. Ha az \mathfrak{R} mennyiség operátora R , akkor az $f(\mathfrak{R})$ mennyiség operátora $f(R)$.

II. Ha az $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ mennyiség operátora rendre R, S, \dots akkor az $\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots$ mennyiség operátora $R + S + \dots$ ($\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ egyidejű mérhetőségét nem tettük fel, ezzel kapcsolatban lásd korábbi gondolatmenetünket).

Az A', B', α', β' , I. és II. képezi további gondolatmenetünk matematikai alapját.

Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszer, az R operátor helyett tekintsük annak $a_{\mu\nu} = (R\varphi_\mu, \varphi_\nu)$ mátrixát. Tekintsük az alábbi mátrixok hermitikus operátorait:

$$e_{\mu\nu}^{(n)} = \begin{cases} 1, & \text{ha } \mu = \nu = n, \\ 0, & \text{egyébként,} \end{cases}$$

$$f_{\mu\nu}^{(mn)} = \begin{cases} 1, & \text{ha } \mu = m, \nu = n, \\ 1, & \text{ha } \nu = m, \mu = n, \\ 0, & \text{egyébként,} \end{cases}$$

$$g_{\mu\nu}^{(mn)} = \begin{cases} i, & \text{ha } \mu = m, \nu = n, \\ -i, & \text{ha } \mu = n, \nu = m, \\ 0, & \text{egyébként.} \end{cases}$$

Ezek operátorai rendre a következők:

$$P_{[\varphi_n]}, \quad P\left[\frac{\varphi_m + \varphi_n}{\sqrt{2}}\right] - P\left[\frac{\varphi_m - \varphi_n}{\sqrt{2}}\right], \quad P\left[\frac{\varphi_m + i\varphi_n}{\sqrt{2}}\right] - P\left[\frac{\varphi_m - i\varphi_n}{\sqrt{2}}\right],$$

legyenek az ezeknek megfelelő mennyiségek $\mathbf{U}^{(n)}, \mathfrak{B}^{(mn)}, \mathfrak{B}^{(mn)}$. Nyilvánvaló ($a_{nm} = \bar{a}_{mn}$ miatt), hogy

$$a_{\mu\nu} = \sum_n a_{nn} e_{\mu\nu}^{(n)} + \sum_{\substack{m,n \\ m < n}} \operatorname{Re} a_{mn} f_{\mu\nu}^{(mn)} + \sum_{\substack{m,n \\ m < n}} \operatorname{Im} a_{mn} g_{\mu\nu}^{(mn)},$$

tehát

$$\mathfrak{R} = \sum_n a_{nn} \mathbf{U}^{(n)} + \sum_{\substack{m,n \\ m < n}} \operatorname{Re} a_{mn} \mathfrak{B}^{(mn)} + \sum_{\substack{m,n \\ m < n}} \operatorname{Im} a_{mn} \mathfrak{B}^{(mn)},$$

továbbá **II.** és **B'**. miatt

$$V(\mathfrak{R}) = \sum_n a_{nn} V(\mathbf{U}^{(n)}) + \sum_{\substack{m,n \\ m < n}} \operatorname{Re} a_{mn} V(\mathfrak{B}^{(mn)}) + \sum_{\substack{m,n \\ m < n}} \operatorname{Im} a_{mn} V(\mathfrak{B}^{(mn)}).$$

Ily módon a

$$\mu_{nn} = V(\mathbf{U}^{(n)}),$$

$$\left. \begin{aligned} \mu_{mn} &= \frac{1}{2} V(\mathfrak{B}^{(mn)}) + \frac{i}{2} V(\mathfrak{B}^{(mn)}), \\ \mu_{nm} &= \frac{1}{2} V(\mathfrak{B}^{(mn)}) - \frac{i}{2} V(\mathfrak{B}^{(mn)}) \end{aligned} \right\} (m < n)$$

jelölésekkel

$$V(\mathfrak{R}) = \sum_{m,n} \mu_{nm} a_{mn}.$$

Tekintve, hogy $\mu_{nm} = \bar{\mu}_{mn}$, definiálható az U hermitikus operátor, amelyre $(U\varphi_m, \varphi_n) = \mu_{mn}$ ¹⁶⁶ és a fenti egyenlet jobb oldala ekkor $\text{Sp}(UR)$, így a (lásd a II. 11. fejezetet)

$$(\text{Sp}) \quad V(\mathfrak{R}) = \text{Sp}(UR)$$

képletet kapjuk. Itt U az R -től független hermitikus operátor,¹⁶⁷ amelyet tehát maga a sokaság határoz meg.

A II. folytán U bármely kiválasztása mellett **Sp.** teljesíti **B'**-t. Így csak azt kell meghatározni, hogy **A'**, milyen korlátozásokat szab ki U -ra.

Ha $\|\varphi\| = 1$ és φ különben tetszőleges, akkor a $P_{[\varphi]}$ -hez tartozó \mathfrak{R} mennyiségre $V(\mathfrak{R}) \geq 0$, a $P_{[\varphi]}^2 = P_{[\varphi]}$ és **I.**, valamint az **A'** összefüggés miatt. Következésképpen $\text{Sp}(UP_{[\varphi]}) = (U\varphi, \varphi) \geq 0$. Tetszőleges $f \neq 0$ esetén φ helyébe $f/\|f\|$ -t írva: $(U\varphi, \varphi) = (Uf, f)/\|f\|^2$, tehát $(Uf, f) \geq 0$, ami viszont $f = 0$ esetén triviális. Így U definit, ami **A'** következménye, ám ez **A'**-nek egyben elégséges feltétele is.

Valóban: **A'** csupán annyit állít, hogy $V(\mathfrak{E}^2) \geq 0$, hiszen ha \mathfrak{R} csak pozitív értékeket vehet fel, akkor $f(x) = |x|$ esetén $f(\mathfrak{R}) = \mathfrak{R}$ és mivel $(g(x))^2 = f(x)$, ha $g(x) = \sqrt{x}$, azért $(g(\mathfrak{R}))^2 = f(\mathfrak{R})$, $\mathfrak{R} = \mathfrak{E}^2$, ahol $\mathfrak{E} = g(\mathfrak{R})$ ¹⁶⁸. Így csak a következőt kell bizonyítani: ha \mathfrak{E} operátora S , akkor $\text{Sp}(US^2) \geq 0$. Ám S^2 definit:

$$(S^2 f, f) = (Sf, Sf) \geq 0.$$

Tehát A -t és B -t írva U és S^2 helyébe, a feladat a következő tétel bizonyítására vezethető vissza: ha A és B hermitikus és definit, akkor $\text{Sp}(AB) \geq 0$. Ezt azonban a definit operátorokra vonatkozó általános tétel segítségével a II. 11. fejezetben bebizonyítottuk (lásd a 114. jejezetet).¹⁶⁹

Teljesen meghatároztuk tehát a $V(\mathfrak{R})$ függvényeket, ezek mindegyikének egy definit és hermitikus U operátor felel meg, a kapcsolatot (**Sp**) szolgáltatja. Az U -t a tekintett sokaság statisztikus operátorának nevezzük.

Ennek fényében könnyű most már megvizsgálni a IV. 1. fejezet **1.**, **2.** és **3.** megjegyzését. Ezek a következőt mondják ki:

1. A viszonylagos valószínűségek és várható értékek szempontjából U és cU (c pozitív állandó) egymástól nem különbözik lényegesen.

2. $U = 0$ nem szolgáltat információt és ezért kirekesztendő.

3. Abszolút (vagyis helyesen normált) valószínűségeket és várható értékeket kapunk, ha $\text{Sp} U = 1$. Ha $\text{Sp} U$ véges, akkor $c = 1/\text{Sp} U$ segítségével U normálható (**1.** folytán). (U definit volta folytán $\text{Sp} U \geq 0$, ám voltaképpen $\text{Sp} U > 0$, hiszen $\text{Sp} U = 0$ következtében $U = 0$, ahogy azt a IV. 1. fejezet végén kimutattuk az általános esetben, esetünkben ez a II. 11. fejezet nyomán is következik és ezt **2.** alapján kizártuk.) Csak végtelen $\text{Sp} U$ esetén van dolgunk valóban relatív valószínűségekkel és várható értékekkel.

Végül meg kell vizsgálni α -t és β -t (lásd a IV. 1. fejezetet), vagyis fel kell kutatnunk a szórásmentes és a homogén esetnek megfelelő U -kat.

Először a szórásmentes sokaságokat tekintjük. Ekkor fel kell tételezni, hogy U helyesen van normálva (lásd IV. 1.) és hogy minden \mathfrak{R} -re $V(\mathfrak{R}^2) = (V(\mathfrak{R}))^2$, vagyis, hogy $\text{Sp}(UR^2) = (\text{Sp}(UR))^2$. Ha $R = P_{[\varphi]}$, akkor $R^2 = R = P_{[\varphi]}$, $\text{Sp}(UP_{[\varphi]}) = (U\varphi, \varphi)$, így ebben az esetben $(U\varphi, \varphi) = (U\varphi, \varphi)^2$, vagyis $(U\varphi, \varphi)$ zérussal, vagy eggyel egyenlő. Legyen $\|\varphi'\| = \|\varphi''\| = 1$. Lehetséges φ -t folytonosan úgy változtatni, hogy φ' -ből φ'' -be menjen át és közben $\|\varphi\|$ maradjon egy.¹⁷⁰ Ennek során $(U\varphi, \varphi)$ is folytonosan változik, s mivel értéke vagy zérus, vagy egy, állandó marad, tehát $(U\varphi', \varphi') = (U\varphi'', \varphi'')$. Következésképpen $(U\varphi, \varphi)$ vagy mindig zérus, vagy mindig egy, tehát $U=0$ vagy $U=1$. Az $U=0$ -t 2. miatt kizárjuk, $U=1$ viszont nem normálható ($\text{Sp } 1 = \text{a tér dimenziószáma} = \infty$), és ahogy az közvetlenül is látható, $U=1$ nem szórásmentes. Következésképpen nem létezik szórásmentes sokaság.

Térjünk rá a homogén esetre. A β) és Sp . miatt U homogén, ha az

$$U = V + W$$

(U, V, W definit és hermitikus) egyenlőségéből következik, hogy $V = c'U$, $W = c''U$.¹⁷¹ Azt állítjuk, hogy ez a tulajdonság akkor és csak akkor valósul meg, ha $U = P_{[\varphi]}$ ($\|\varphi\| = 1$).

Először rendelkezék U a mondott tulajdonsággal. Tekintve, hogy $U \neq 0$, van olyan f_0 , amelyre $Uf_0 \neq 0$, s így $f_0 \neq 0$, következésképpen $(Uf_0, f_0) > 0$ (lásd II. 5. fejezet 19. Tételét). Képezzük az alábbi két hermitikus operátort:

$$Vf = \frac{(f, Uf_0)}{(Uf_0, f_0)} \cdot Uf_0, \quad Wf = Uf - \frac{(f, Uf_0)}{(Uf_0, f_0)} \cdot Uf_0,$$

ekkor

$$(Vf, f) = \frac{|(f, Uf_0)|^2}{(Uf_0, f_0)} \geq 0,$$

$$(Wf, f) = \frac{(Uf, f)(Uf_0, f_0) - |(f, Uf_0)|^2}{(Uf_0, f_0)} \geq 0$$

(lásd a II. 5. fejezet 19. Tételét), vagyis V és W definit és $U = V + W$. Így $V = c'U$ és mivel $Vf_0 = Uf_0 \neq 0$, $c' = 1$, vagyis $U = V$. Legyen most $\varphi = Uf_0 / \|Uf_0\|$ ($\|\varphi\| = 1$) és

$$c = \frac{\|Uf_0\|^2}{(Uf_0, f_0)}$$

($c > 0$). Ekkor $Uf = Vf = c(f, \varphi)\varphi = cP_{[\varphi]}f$, vagyis $U = cP_{[\varphi]}$, tehát 1. folytán U lényegében $P_{[\varphi]}$ -vel egyenlő.

Fordítva, legyen $U = P_{[\varphi]}$ ($\|\varphi\| = 1$). Ha $U = V + W$, ahol V és W definit, akkor $Uf = 0$ következtében

$$0 \leq (Vf, f) \leq (Vf, f) + (Wf, f) = (Uf, f) = 0,$$

$(Vf, f) = 0$, tehát $Vf = 0$ (lásd a fentieket). Másrészt az $(f, \varphi) = 0$ egyenletből következik, hogy $Uf = P_{[\varphi]}f = 0$, s így az is, hogy $Vf = 0$, ezért bármely g -re

$(f, Vg) = (Vf, g) = 0$. Vagyis, ami ortogonális φ -re, az ortogonális Vg -re is, következésképpen $Vg = c_g \cdot \varphi$ (c_g a g -től függő szám), $g = \varphi$ esetén tehát $V\varphi = c' \cdot \varphi$. Bármely f az $(f, \varphi) \cdot \varphi + f'$ alakba írható, ahol f' ortogonális φ -re. Így

$$Vf = (f, \varphi) \cdot V\varphi + Vf' = (f, \varphi) \cdot c' \varphi = c' P_{[\varphi]} f = c' Uf.$$

Tehát $V = c'U$, $W = U - V = (1 - c')U$, és a bizonyítást ezzel befejeztük.

Így a homogén sokaságok az $U = P_{[\varphi]}$ esetnek felelnek meg, $\|\varphi\| = 1$, s ekkor \mathbf{Sp} átmege a III. 1. \mathbf{E}_2 képletébe:

$$(\mathbf{E}_2) \quad V(\mathfrak{R}) = Sp(P_{[\varphi]}R) = (R\varphi, \varphi).$$

Vegyük észre, hogy $V(1) = Sp(P_{[\varphi]}) = 1$ (mert $P_{[\varphi]}$ az egydimenziós $[\varphi]$ -hez tartozik, ugyanez magából \mathbf{E}_2 -ből is következik), vagyis U jelenlegi alakja helyesen van normálva. Végül azt is megmondhatjuk, hogy $P_{[\varphi]}$ és $P_{[\psi]}$ mikor jellemzi ugyanazt a statisztikát, vagyis, mikor igaz, hogy $P_{[\varphi]} = cP_{[\psi]}$ (c pozitív állandó). Mivel $Sp(P_{[\varphi]}) = Sp(P_{[\psi]}) = 1$, így $c = 1$, $P_{[\varphi]} = P_{[\psi]}$, tehát $\varphi = a\psi$. A $\|\varphi\| = \|\psi\| = 1$ következtében $|a| = 1$. Ez világos módon elégséges is.

Mindezt összevéve a következőket mondhatjuk: nem létezik szórásmentes sokaság. Homogén sokaságok léteznek, ezekre és csakis ezekre $U = P_{[\varphi]}$, $\|\varphi\| = 1$. Az ilyen U -kra \mathbf{Sp} az \mathbf{E}_2 összefüggésbe megy át, a normálás helyes és U nem változik, ha φ -t $a\varphi$ -vel helyettesítjük (a állandó, $|a| = 1$), φ minden más megváltoztatása esetén viszont lényegesen megváltozik (lásd I-et). A homogén sokaságok ezért a kvantummechanika állapotainak felelnek meg úgy, ahogy ezeket már korábban jellemeztük: φ a Hilbert-tér eleme, $\|\varphi\| = 1$ és φ -t egységnyi abszolút értékű tényezővel szorozva ugyanazt az állapotot kapjuk (lásd például a II. 2. fejezetet), és a statisztikai állítást \mathbf{E}_2 tartalmazza.¹⁷²

Ezeket az eredményeket a tisztán kvalitatív \mathbf{A}' , \mathbf{B}' , α , I. és II. feltételekből vezettük le.

Így feltételeink körén belül oly döntésre jutottunk, amely a kauzalitást tagadja, hiszen minden sokaságnak, még a homogénnek is, van szórása.

Hátra van még a III. 2. fejezetben felvetett rejtett paraméterek kérdésének megvizsgálása. A kérdés tehát az, hogy a φ hullámfüggvényekkel jellemzett homogén sokaságoknak nem azért van-e szórása, mert az ilyen φ nem igazi állapot, hanem ezeknek keveréke, és a valódi állapotok ismeretéhez a φ hullámfüggvény adatain kívül még további adatokra is szükség van (ezek lennének a rejtett paraméterek). Ezek együtt már mindent kauzálisan határoznak meg, s így szórásmentes sokaságokat adnak. A homogén sokaság ($U = P_{[\varphi]}$, $\|\varphi\| = 1$) statisztikája, így az őt alkotó igazi állapotokra vett átlagként adódnék. Ezt az átlagolást az ezen állapotokban szereplő rejtett paraméterek tartományaira kell elvégezni. Ez azonban két oknál fogva is lehetetlen. Először is azért, mert a kérdéses homogén sokaság definíciójával ellentétben két különböző sokaság keverékéként lenne előállítható.¹⁷³ Másodsor, mert az „igazi” állapotoknak megfelelő szórásmentes sokaságok (melyekben minden rendszer ugyanabban az „igazi” állapotban van) nem léteznek. Vegyük észre, hogy nem kell a rejtett paraméterek mechanizmusába jobban belemélyednünk, hiszen most már tudjuk, hogy a kvantummechanika

bebizonyított eredményeit ezek segítségével nem lehet levezetni; valójában az is ki van zárva, hogy ugyanazok a fizikai mennyiségek ugyanazokkal a függvénykapcsolatokkal létezenek. (I. és II. érvényes legyen), ha a hullámfüggvény mellett még más változók, vagyis a rejtett paraméterek is léteznének.

Az sem lenne elegendő, ha a kvantummechanika operátorainak megfelelő fizikai mennyiségek mellett még más, eddig még fel nem fedezett mennyiségek is léteznének, mert a kvantummechanika által felvetett összefüggések (vagyis I. és II.) a már ismert mennyiségekre érvényüket vesztenék. Ezért — noha azt gyakran feltételezik — az elemi folyamatok statisztikustól különböző leírásának lehetősége nem a kvantummechanika átértelmezésének a kérdése, mert ez csak úgy lenne lehetséges, ha a kvantummechanika jelenlegi rendszere hibás eredményeket adna.

Még egy gondolatról érdemes itt említést tennünk. A határozatlansági összefüggések az első pillantásra a relativitáselmélet egyik alapfeltevésére hasonlítanak, tudniillik arra, hogy elvileg lehetetlen két, egymástól r távolságra levő pontban bekövetkező esemény egyidejűségét r/c nagyságrendű időintervallumnál pontosabban megállapítani (c a fény sebessége). A határozatlansági összefüggések szerint az anyagi pont helyzetét a fázistérben elvileg lehetetlen $(h/4\pi)^3$ nagyságú térfogatnál pontosabban megadni.¹⁷⁴ E két feltevés között azonban alapvető különbség van. A relativitáselmélet ugyan kétségbe vonja a távoli egyidejűség objektív, pontos mérhetőségének lehetőségét, az azonban lehetséges, hogy Galilei-féle vonatkoztatási rendszert bevezetve olyan koordináta-rendszert vegyünk fel, amelyben az egyidejűséget definiálni tudjuk e fogalomról alkotott normális elképzeléseinkkel összhangban. A távoli egyidejűség ilyen definíciójának csak azért nem tulajdonítunk objektív értelmet, mert e koordináta-rendszer végtelen sokféleképpen választható meg, így végtelen sok definíciót kapunk a távoli egyidejűsége, s ezek mindegyike egyformán jó. Így, noha a mérés lehetetlen, végtelen sok lehetséges elméleti definíciónk van. A kvantummechanikában más a helyzet. Itt a φ hullámfüggvényű rendszert a fázistér pontjainak segítségével lehetetlen leírni, még akkor is, ha új (feltételes, meg nem figyelt) koordinátákat, rejtett paramétereket vezetünk be, ezek ugyanis szórásmentes sokaságokhoz vezetnének. Így tehát nemcsak a mérés lehetetlen, hanem az ésszerű elméleti definíció is, vagyis nincs olyan definíció, melyet bár a kísérlet nem erősít meg, de legalább nem mond neki ellent. A mérés elvi lehetetlensége az egyik esetben abból ered, hogy a kérdéses fogalmat végtelen sokféleképpen, a közvetlen tapasztalatnak, vagy az elmélet alapfeltevéseinek ellent nem mondó módon lehet definiálni, míg a másik esetben ilyen definíció egyáltalán nem lehetséges.

Összefoglalásképpen a kauzalitás helyzetét a modern fizikában így jellemezhetjük: A makroszkopikus esetben nincs olyan kísérlet, mely azt alátámasztaná, és ilyen nem is gondolható ki, hiszen a világban nagyban megmutatkozó (vagyis szabad szemmel megfigyelhető) kauzális rend oka nem egyéb, mint a „nagy számok törvénye”, s e rend teljesen független attól, hogy az elemi folyamatokon uralkodó természettörvények kauzálisak-e, vagy sem.¹⁷⁵ Annak, hogy a makroszkopikusan azonos testek azonos viselkedést mutatnak, nincs sok köze a kauzalitáshoz: ezek tulajdonképpen egyáltalán nem azonosak, hiszen atomjaik állapotát meghatározó

koordináták szinte sohasem esnek pontosan egybe, és a megfigyelés makroszkopikus módszere során e koordináták kiátlagolódnak (ezek itt „rejtett” paraméterek). E koordináták száma azonban igen nagy (1 gramm anyagra körülbelül 10^{25}), s ezért a fenti átlagolásban a valószínűségszámítás jól ismert törvényei miatt minden szórás erősen lecsökken. (Ez természetesen csak az általános esetben igaz, megfelelő különleges körülmények között — ilyen például a *Brown*-mozgás és a nem stabilis állapotok — e látszólagos kauzalitás eltűnik.) A kauzalitás kérdését igazán csak az atomban, az elemi folyamatokban lehetne eldönteni, itt azonban minden ellene szól. Az egyetlen létező formális elmélet, amely többé-kevésbé kielégítően rendszerezi és összegezi tapasztalatainkat e területen: a kvantummechanika, amely viszont kényszerítő logikai ellentmondásban van a kauzalitással. Természetesen túlzás lenne azt állítani, hogy a kauzalitást ezennel elintéztük: a kvantummechanikának a jelenlegi formájában számos komoly hiányossága van, és még az is előfordulhat, hogy hibás, bár ez az utóbbi lehetőség nagyon valószínűtlen annak fényében, hogy az általános problémák kvalitatív magyarázatában és a speciális problémák kvantitatív megoldásában milyen átütő sikerekhez vezetett. Annak ellenére, hogy a kísérletekkel a kvantummechanika jól egyezik és a világ egy minőségileg új oldalát tárta fel, azt nem mondhatjuk az elméletről, hogy a tapasztalat bebizonyította, hanem csak annyit, hogy a tapasztalat legjobb ismert összegezése. Ám, ha még oly elővigyázatosak is vagyunk, s e kételyeket szem előtt is tartjuk, mégis azt mondhatjuk, hogy jelenleg nincs alkalom és ok arra, hogy a kauzalitás kérdését a természetben feszegezzük, erre ugyanis semmilyen kísérlet nem utal. A makroszkopikus kísérletek e kérdés eldöntésére elvileg alkalmatlanok, az elemi folyamatokkal kapcsolatos tapasztalatokkal összeférő egyetlen elmélet, a kvantummechanika viszont a kauzalitásnak ellene szól.

Felhívjuk a figyelmet arra, hogy itt az emberiség ősi gondolkodásmódjával és nem logikai szükségszerűséggel állunk szemben (erre utal az is, hogy egyáltalán lehetséges volt statisztikus elméletet kiépíteni), s a kérdés vizsgálatakor nincs okunk arra, hogy e begyökeredzett gondolkodásmódhoz ragaszkodjunk. Ilyen körülmények között bölcs dolog-e a kauzalitás kedvéért egy ésszerű fizikai elméletről lemondani?

3. A kísérletek tanulságai

Az előző szakaszban megtanultuk, hogy a kvalitatív alapfeltevéseinkkel összeférő legáltalánosabb statisztikus sokaságot az *Sp*. törvény szerint egy definit *U* operátor jellemzi. Azokat a nevezetes sokaságokat, amelyeket homogénnek neveztünk, az $U = P_{[\varphi]}$ ($\|\varphi\| = 1$) írja le, s mivel ezek voltaképpen az *S* rendszer állapotai (amelyeket tehát nem lehet tovább felbontani), azért ezeket állapotoknak is nevezzük (nevezetesen $U = P_{[\varphi]}$ a φ állapot) a továbbiakban.

Ha *U* spektruma tisztán diszkrét, sajátértékei w_1, w_2, \dots , sajátfüggvényei pedig $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (ezek teljes ortonormált rendszert alkotnak), akkor (a II. 8. fejezet alapján)

$$U = \sum_n w_n P_{[\varphi_n]}.$$

Mivel U definit, azért $w_n \geq 0$ minden n -re (valóban, $U\varphi_n = w_n\varphi_n$ folytán $(U\varphi_n, \varphi_n) = w_n$, s így w_n nemnegatív) és $\sum_n w_n = \sum_n (U\varphi_n, \varphi_n) = \text{Sp } U$ (lásd még a IV. 1.

fejezet elejét), tehát ha U normálása helyes, akkor $\sum_n w_n = 1$. A IV. I. fejezet elején tett megjegyzéseink alapján U -t a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotokból a megfelelő relatív w_1, w_2, \dots súlyokkal alkotott szuperpozícióként foghatjuk fel, s ha U normálása helyes, akkor e relatív súlyok egyben abszolút súlyok is.

Ha azonban U normálása helyes, vagyis $\text{Sp } U = 1$, akkor U spektruma tisztán diszkrét (II. 11. fejezet folytán, lásd még a 115. jegyzetet). Ugyanez igaz akkor is, ha $\text{Sp } U$ véges. (A végtelen $\text{Sp } U$ határesetként tekinthető, ennek taglalásába nem bocsátkozunk.) Így e valóban érdekes esetben a megfigyelt sokaság voltaképpen páronként ortogonális állapotok szuperpozíciójaként állítható elő. Az általános sokaságokat keverékeknek nevezzük (szemben a homogén sokaságokkal, amelyek az állapotok).

Ha U sajátértékei egyszeresek, vagyis w_1, w_2, \dots egymástól különbözik, akkor $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ egységnyi abszolút értékű állandó tényezőtől eltekintve egyértelműen meg van határozva. Ugyanígy egyértelműen meg vannak határozva a $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$ projektorok és — sorrendtől eltekintve — a w_1, w_2, \dots súlyok is. Ilyen esetben tehát egyértelműen leszögezhető, hogy milyen (páronként ortogonális) állapotokból képződik az U keverék. Ha U sajátértékei többszörösek (elfajultak), akkor a helyzet egészen más. Azt, hogy $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ pontosan miként választható ki, a II. 8. fejezetben vizsgáltuk meg. Ez végtelen sokféleképpen hajtható végre, s ezek egymástól mind különböznek (noha w_1, w_2, \dots egyértelműen meg van határozva). A w_1, w_2, \dots közül legyenek az egymástól különbözők: w', w'', \dots . Képezzük U sajátfüggvényeinek a $w = w', w'', \dots$ súlyokhoz tartozó zárt lineáris $\mathfrak{M}_{w'}, \mathfrak{M}_{w''}, \dots$ sokaságait (vagyis az $Uf = wf$ megoldásainak halmazát). Ezután a következőképpen járunk el. Az $\mathfrak{M}_{w'}, \mathfrak{M}_{w''}, \dots$ mindegyikéből kiválasztunk egy, az illető sokaságot kiegészítő tetszőleges ortonormált rendszert, legyenek ezek rendre $\chi_1, \chi_2, \dots; \chi_1', \chi_2', \dots, \dots$. Így $\chi_1, \chi_2, \dots; \chi_1', \chi_2', \dots; \dots$ lesz a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszer a megfelelő $w', w'', \dots, w'', w'', \dots, \dots$ súlyokkal. Mihelyt \mathfrak{M}_w egynél több dimenziós, vagyis van többszörös sajátérték, akkor a megfelelő χ_1, χ_2, \dots már nem lesz — az egységnyi abszolút értékű állandó tényezőtől eltekintve sem — meghatározott (χ_1 például \mathfrak{M}_w tetszőleges normált eleme lehet). Ilyenkor tehát az állapotok maguk is többértelműek.

Ez a helyzet így jellemezhető: ha χ_1, χ_2, \dots véges vagy végtelen ortonormált rendszert alkotnak, s belőlük olyan keveréket készítünk, melyben mindegyikük súlya egyforma (tehát a relatív súlyok $1, 1, \dots$), akkor e keverék csak a χ_1, χ_2, \dots által kiegészített zárt lineáris sokaságtól függ. Valóban,

$$U = P_{[\chi_1]} + P_{[\chi_2]} + \dots = P_{[\mathfrak{M}]}$$

Ha χ_1, χ_2, \dots véges számú, mondjuk s elemből áll, akkor U -t \mathfrak{M} valamennyi normált elemének, vagyis állapotának keverékékként foghatjuk fel. Ezek a következő alakúak:

$$\chi = x_1\chi_1 + x_2\chi_2 + \dots + x_s\chi_s, |x_1|^2 + \dots + |x_s|^2 = 1.$$

Legyen $x_1 = u_1 + iv_1, \dots, x_s = u_s + iv_s$ és jelöljük az $u_1^2 + v_1^2 + \dots + u_s^2 + v_s^2 = 1, 2s - 1$ dimenziós egységgömb (ez az $|x_1|^2 + \dots + |x_s|^2 = 1$ feltétel) felületét k -val, felületelemét pedig $d0$ -val. Ekkor, ha

$$U' = \int \dots \int_k P_{[\chi]} d0,$$

akkor

$$\begin{aligned} (U' f, g) &= \int \dots \int_k (P_{[\chi]} f, g) d0 = \int \dots \int_k (f, \chi) (g, \chi) d0 = \\ &= \int \dots \int_k (f, \sum_{\mu=1}^s (u_\mu + iv_\mu)\chi_\mu) (g, \sum_{\mu=1}^s (u_\mu + iv_\mu)\chi_\mu) d0 = \\ &= \int \dots \int_k \sum_{\mu, \nu}^s (f, \chi_\mu) \overline{(g, \chi_\mu)} (u_\mu - iv_\mu) (u_\nu + iv_\nu) d0 = \\ &= \sum_{\mu, \nu=1}^s (f, \chi_\mu) \overline{(g, \chi_\nu)} \int \dots \int_k [(u_\mu u_\nu + v_\mu v_\nu + i(u_\mu v_\nu - u_\nu v_\mu))] d0. \end{aligned}$$

Így a szimmetria miatt minden olyan integrál, amelyben $u_\mu v_\nu, u_\nu v_\mu$ és $u_\mu u_\nu, v_\mu v_\nu$ szerepel, $\mu \neq \nu$ esetén eltűnik,¹⁷⁶ viszont a $\mu = \nu$ esetben ezek értéke $C/2s$, ($C > 0$), s így

$$\begin{aligned} (U' f, g) &= \frac{C}{s} \sum_{\mu=1}^s (f, \chi_\mu) \overline{(g, \chi_\mu)} = \\ &= \frac{C}{s} \sum_{\mu=1}^s (P_{[\chi_\mu]} f, g) = \left(\left[\frac{C}{s} \sum_{\mu=1}^s P_{[\chi_\mu]} \right] f, g \right), \end{aligned}$$

tehát

$$U' = \frac{C}{s} \sum_{\mu=1}^s P_{[\chi_\mu]} = \frac{C}{s} U,$$

vagyis U' nem különbözik lényegesen az U -tól.

A kvantummechanikai statisztika jellegére vonatkozó eme eredményeink jelentősége igen nagy, ezért megismételjük:

1. Egymásra ortogonális állapotok egyforma súlyú keverékében az állapotok többé nem határozhatók meg. Ugyanez a keverék más egymásra ortogonális állapotok egyforma súlyokkal vett keverékével is előállítható.

2. Ha a komponensek száma véges, akkor az így kapott keverék a komponensek lineáris kombinációjaként előálló állapotok keverékével azonos.

Legegyszerűbb példa erre a következő: (az egymásra ortogonális) φ és ψ 1 : 1 arányú keveréke ugyanaz, mint például

$$\frac{\varphi + \psi}{\sqrt{2}}, \quad \frac{\varphi - \psi}{\sqrt{2}}$$

1:1 arányú keveréke, vagy az összes $x\varphi + y\psi$ keveréke ($|x|^2 + |y|^2 = 1$). Ha két nem ortogonális φ -t és ψ -t keverünk össze (nem feltétlenül 1 : 1 arányban), akkor sem tudjuk a végső keverék arányát meghatározni, mivel ezt ortogonális állapotok összekeverésével is megkaphattuk volna.

A keverékek természetére vonatkozó további vizsgálatainkat az V. 2. fejezet termodinamikai megfontolásai után folytatjuk.

A IV. 2. fejezetben az **Sp.** képlet utasítást ad arra, hogy az R operátorú \mathfrak{R} mennyiség várható értékét miként kell kiszámítani az U statisztikus operátorral rendelkező keverékre: ez nem lesz más, mint $\text{Sp}(UR)$. Annak valószínűsége tehát, hogy \mathfrak{R} -nek a értéke az $a' < a \leq a''$ (a', a'' adott, $a' \leq a''$) intervallumba esik, a III. 1. vagy III. 5. fejezet alapján úgy számítható ki, hogy képezzük az $F(\mathfrak{R})$ mennyiséget az

$$F(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } a' < x \leq a'' \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases}$$

függvény segítségével, s a kérdéses valószínűség $F(\mathfrak{R})$ várható értéke. Az $F(\mathfrak{R})$ operátora (a IV. 2. fejezetben található **I.** szerint) $F(R)$ és ha $E(\lambda)$ az R -hez tartozó egységfelbontás, akkor, amint azt már több ízben is kiszámítottuk, $F(R) = E(a'') - E(a')$, s a kívánt valószínűség $w(a', a'') = \text{Sp}[U(E(a'') - E(a'))]$. Következésképpen \mathfrak{R} statisztikáját a $w(a) = \text{Sp}[UE(a)]$ függvény írja le (lásd a IV. 1. fejezetet; az állapotokra, vagyis ha $U = P_{[\varphi]}$, $w(a) = \text{Sp}[P_{[\varphi]}E(a)] = (E(a)\varphi, \varphi)$). Természetesen, ha U normálása nem helyes, akkor e valószínűség csak relatív.

Arra a kérdésre, hogy az R operátorú \mathfrak{R} mennyiség az U statisztikus operátorú keveréken mikor veszi fel biztosan a λ^* értéket, $w(a)$ segítségével közvetlenül válaszolhatunk: $a < \lambda^*$ -ra $w(a) = 0$, $a \geq \lambda^*$ esetén pedig $w(a) = 1$, illetőleg, ha U normálása nem helyes, akkor $w(a) = V(1) = \text{Sp}U$ kell, hogy teljesüljön. Más szóval $\text{Sp}[UE(a)] = 0$, ha $a < \lambda^*$ és $\text{Sp}[U(1 - E(a))] = 0$, ha $a \geq \lambda^*$.¹⁷⁷ Ám a definit A és B operátorokra $\text{Sp}(AB) = 0$ következtében $AB = 0$ (lásd a II. 11. fejezetet), s így $UE(a) = 0$, ha $a < \lambda^*$ és $UE(a) = U$, ha $a \geq \lambda^*$, vagy ami ugyanaz, $E(a)U = 0$, illetőleg $E(a)U = U$, hiszen a szorzat hermitikus volta miatt a tényezőknak egymással felcserélhetőknél kell lenniük. Ha tehát $f = Ug$, akkor

$$E(a)f = \begin{cases} f, & \text{ha } a \geq \lambda^*, \\ 0, & \text{ha } a < \lambda^* \end{cases}$$

és a II. 8. fejezet gondolatmenete alapján ez azt jelenti, hogy $Rf = \lambda^*f$, vagyis $RUg = \lambda^*Ug$ minden g -re. Következésképpen a végső feltétel ez: $RU = \lambda^*U$. Más

szóval, ha $Rh = \lambda^*h$ megoldásaiból alkotott zárt lineáris sokaságot \mathfrak{M} -mel jelöljük, Uf minden f -re \mathfrak{M} -hez tartozik.

Ugyanezt az eredményt kaptuk volna meg a szórás, vagyis $(\mathfrak{R} - \lambda^*)^2$ (esetleg relatív) várható értékének eltűnéséből.

A III. 3. fejezetben választ adtunk a következő kérdésekre (az alábbiakban az $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ fizikai mennyiség operátora rendre R, S, \dots):

1. Mikor mérhető \mathfrak{R} abszolút pontosan? Válasz: ha R -nek spektruma tisztán diszkrét.

2. Mikor mérhető \mathfrak{R} és \mathfrak{S} egyszerre és abszolút pontosan? Válasz: ha mind R , mind pedig S spektruma tisztán diszkrét, és felcserélhető.

3. Mikor mérhető több mennyiség, $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ egyszerre és abszolút pontosan? Válasz: ha R, S, \dots mindegyikének spektruma tisztán diszkrét, és mind felcserélhető egymással.

4. Mikor mérhető több mennyiség, $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ egyszerre és tetszőleges pontossággal? Válasz: ha R, S, \dots mind felcserélhető egymással.

Ebben az esetben a Compton—Simons-kísérletből leszűrhető alábbi elvet használtuk:

(M.) Ha az S rendszeren megmérjük az \mathfrak{R} mennyiséget kétszer egymás után, akkor eredményül ugyanazt az értéket kapjuk. Még akkor is ez a helyzet, ha S eredeti állapotában \mathfrak{R} szórása nem zérus és \mathfrak{R} mérése megváltoztatja S állapotát.

A III. 3. fejezetben részletesen megvizsgáltuk M . fizikai jelentését. Az 1.—4. válaszaiban még a következő feltevések játszanak szerepet: a III. 3. fejezetben található és az állapotokra vonatkozó E_2 statisztikus képlet, a III. 3. fejezet F . feltevése, mely szerint, ha \mathfrak{R} operátora R , akkor $F(\mathfrak{R})$ -é $F(R)$ és az a feltevés, mely szerint $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ operátora $R + S$, ha az (egyszerre mérhető) \mathfrak{R} és \mathfrak{S} mennyiség operátora, R illetőleg S .

E három feltevés ismét rendelkezésünkre áll (az első a IV. 2. fejezet Sp . képletéből következik, a másik kettő a IV. 2. fejezet I. és II. szabályainak felel meg), M -et is helyesnek kell elfogadjuk, megbizonyosodtunk ugyanis arról, hogy nélkülözhetetlen a kvantummechanika fogalmi rendszerében. Így 1.—4. III. 3. fejezetben adott bizonyításai most is érvényesek, s így a válaszok is helyesek.

A III. 5. fejezetben azokat a fizikai mennyiségeket vizsgáltuk meg, melyek értéke csak 0 vagy 1 lehet. Ezek egyértelműen feleltethetők meg a tulajdonságoknak. Valóban, ha adva van az \mathfrak{C} tulajdonság, akkor a neki megfelelő mennyiséget a következőképpen határozhatjuk meg: mérése abból áll, hogy meghatározzuk, \mathfrak{C} teljesül-e, vagy sem, s ennek megfelelően értéke 1, illetőleg 0. Fordítva, ha a mennyiség van adva, akkor \mathfrak{C} a következő tulajdonság: a kérdéses mennyiség értéke 1 (tehát nem 0). Az F -ből következett (lásd 1.-et a IV. 2. fejezetben), hogy a megfelelő operátorok a projektorok. Annak valószínűsége tehát, hogy \mathfrak{C} teljesül, a fent meghatározott mennyiség várható értékével egyenlő. A III. 5. fejezetben ezt csak állapotokra számítottuk ki (vagyis, ha $U = P_{[\varphi]}, \|\varphi\| = 1$), azonban általában is meghatározható Sp . alapján: az eredmény $Sp(UE)$. (Ez relatív; az abszolút valószínűséget csak akkor kapjuk meg, ha U normálása helyes, vagyis, ha $Sp U = 1$.)

Így megbizonyosodtunk 1.–4. helyességéről, s így a belőlük III. 5.-ben levezetett α)– ζ) állítások is érvényesek. Természetesen észre kell vennünk, hogy ott α) csak az állapotok esetére adott információt, itt azonban tetszőleges keverékre kiterjesztettük:

α') Az \mathfrak{C} tulajdonság az U statisztikus operátorú keverékben a

$$\text{Sp}(UE), \text{illetőleg a } \text{Sp}[U(1-E)]$$

valószínűséggel teljesül, vagy nem teljesül. (Ezek relatív valószínűségek; csak akkor abszolútak, ha U megfelelőképpen normált, vagyis ha $\text{Sp } U = 1$.)

Legyen $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ operátora R_1, \dots, R_l és a megfelelő egységfelbontások $E_1(\lambda), \dots, E_l(\lambda)$, legyen továbbá l intervallum adva $I_1: \lambda'_1 < \lambda \leq \lambda''_1, \dots, I_l: \lambda'_l < \lambda \leq \lambda''_l$. Ha $E_1(I_1) = E_1(\lambda''_1) - E_1(\lambda'_1), \dots, E_l(I_l) = E_l(\lambda''_l) - E_l(\lambda'_l)$, akkor a következő tulajdonságoknak: „ \mathfrak{R}_1 értéke I_1 -be esik”, „ \mathfrak{R}_l értéke I_l -be esik”, rendre az $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ projektorok fognak megfelelni (lásd ζ -t). Ekkor annak, hogy e tulajdonságok egyszerre dönthetők el, $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ felcserélhetősége a szükséges és elégséges feltétele (lásd γ -t), egyidejű teljesülésüknek projektora pedig $E = E_1(I_1) \dots E_l(I_l)$ (lásd ϵ -t). Az utóbbi valószínűsége $\text{Sp}(UE)$ (lásd α' -t).

Járjuk be most a fordított utat. Tegyük fel, hogy nem ismerjük S állapotát, azonban bizonyos méréseket végeztünk S -en és ismerjük ezek eredményeit. A valóságban mindig ez történik, hiszen S állapotára csak a mérések eredményeiből következtethetünk. Pontosabban az állapot csupán elméleti konstrukció, és csak a mérések eredményei állnak a rendelkezésünkre. A fizikának az a feladata, hogy összefüggéseket állapítson meg elmúlt és eljövendő mérések eredményei között. Kétségtelen, hogy ezt mindig az „állapot” segédfogalom bevezetésével valósítjuk meg, azonban a fizikai elméletnek arra kell választ adni, hogy korábbi mérésekből miként kell a jelenlegi állapotra, s abból a későbbi mérések eredményeire következtetni. Eddig csak a kérdés második részével foglalkoztunk, most figyelmünket az első részre fordítjuk.

Még akkor is, ha a korábbi mérések nem voltak elégségesek a jelenlegi állapot egyértelmű meghatározásához, e mérésekből bizonyos körülmények között következtetni tudunk arra, hogy egyes állapotok milyen valószínűséggel vannak jelen. (Ez a kauzális elméletekben, például a klasszikus mechanikában éppúgy érvényes, mint a kvantummechanikában.) Tulajdonképpen a feladat a következő: adva vannak bizonyos mérési eredmények, olyan keveréket kell találnunk, amelynek ugyanolyan a statisztikája, mint amilyenre az olyan S rendszer esetében számítunk, amelyről csak annyit tudunk, hogy az adott méréseket rajta az adott eredményekkel elvégezték. Természetesen még pontosabbnak kell lennünk, és meg kell mondanunk, mit értünk azon, hogy S -ről „csak ennyit tudunk”, és nem többet és hogy miként vezet ez statisztikára.

Mindenesetre a statisztikával való kapcsolatnak a következőnek kell lennie: Ha sok, S'_1, \dots, S'_M rendszeren (ezek S másolatai) e mérések az adott eredményeket szolgáltatják, akkor az $[S'_1, \dots, S'_M]$ sokaság az összes statisztikus tulajdonságát tekintve egybeesik a mérések eredményeinek megfelelő keverékkel. Az, hogy a mérések eredményei mindegyik S'_1, \dots, S'_M esetén ugyanazok, M alapján annak

tulajdonítható, hogy eredetileg egy nagy $[S_1, \dots, S_N]$ sokaság volt adva, s ezen végrehajtottuk a méréseket, majd azokat az elemeket, melyeken a kívánt eredmények adódtak, új sokaságba gyűjtöttük össze. Ez a sokaság az $[S'_1, \dots, S'_M]$. Természetesen minden attól függ, hogy miként választottuk ki az $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságot. Ez a kezdeti sokaság mintegy az S rendszer egyes állapotainak *a priori* valószínűségeit adja meg. A helyzet jól ismert az általános valószínűségelméletből: ahhoz, hogy a mérések eredményeiből az állapotra, vagyis az okozatból az okra tudjunk következtetni, más szóval, hogy ki tudjuk számítani az *a posteriori* valószínűségeket, ismernünk kell az *a priori* valószínűségeket. Ezeket általában sokféleképpen választhatjuk meg, s ennek megfelelően feladatunkat nem lehet egyértelműen megoldani. Látni fogjuk azonban, hogy a kvantummechanika különleges feltételei mellett a kezdeti $[S_1, \dots, S_N]$ sokaság egy bizonyos megválasztása különösen célravezető.

Egész más a helyzet, ha a rendelkezésre álló mérési eredmények elégségesek ahhoz, hogy S állapotát teljesen meghatározzuk. Ekkor minden kérdésre egyértelmű választ kell tudnunk adni. Nemsokára meglátjuk majd, hogy ez miként adódik.

Végül még megemlíjtük a következőt. Ahelyett, hogy azt mondjuk, hogy bizonyos mérési eredmények ismertek, azt is mondhatjuk, hogy S -et megvizsgáltuk egy bizonyos \mathcal{C} tulajdonságra nézve, s azt találtuk, hogy \mathcal{C} teljesül. Az $(\alpha) - (\zeta)$ alapján már tudjuk, hogy e két kijelentés miként kapcsolódik egymáshoz: ha például a (egyszerre megállapítható) mérési eredmények a rendelkezésünkre állanak, s eszerint az $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ mennyiség értéke a megfelelő I_1, \dots, I_l intervallumba esik, akkor \mathcal{C} projektora (a korábban használt szimbólumokkal) a következő: $E = E_1(I_1) \dots E_l(I_l)$.

Ily módon az S -ről kapott információk mindig bizonyos \mathcal{C} tulajdonság teljesülését jelentik, s e tulajdonságot formálisan az E projektor jellemzi. Vizsgáljuk meg most az ekvivalens $[S'_1, \dots, S'_M]$ sokaság U , illetve az eredeti $[S_1, \dots, S_N]$ sokaság U_0 statisztikus operátorát. Mi a matematikai összefüggés E , U és U_0 között?

Az \mathcal{M} miatt \mathcal{C} teljesül az $[S'_1, \dots, S'_M]$ sokaságra, vagyis az \mathcal{C} -nek megfelelő mennyiség értéke 1. Ez azt jelenti, amint azt e szakasz elején beláttuk, hogy $EU = U$, más szóval, hogy Uf minden f -re \mathfrak{M} eleme, itt \mathfrak{M} az olyan f -ek halmaza, amelyekre $Ef = f$, vagyis az E -hez tartozó zárt lineáris sokaság.

Az $EU = U$ helyett írható, hogy $UE = U$, $U(1 - E) = 0$, vagyis $Ug = 0$, ha $g = (1 - E)f$, f tetszőleges, más szóval minden olyan g -re, mely az $1 - E$ -hez tartozó zárt lineáris sokaság, azaz $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ eleme. Ily módon $Uf = 0$, ha f az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ eleme, ha pedig f az \mathfrak{M} eleme, akkor Uf is az. Az U -ról semmi továbbit nem mondhatunk.

Ez az U -t (lényegében, tehát állandó tényezőtől eltekintve) csak akkor határozza meg, ha \mathfrak{M} 0- vagy 1-dimenziós. Valóban, ha $\mathfrak{M} = [0]$, akkor $U = 0$, ami a IV. 2. fejezet 1. megjegyzése alapján lehetetlen, ha pedig $\mathfrak{M} = [\varphi]$ ($\varphi \neq 0$, tehát $\|\varphi\| = 1$ vehető), $U\varphi = c\varphi$, s így \mathfrak{M} minden f -elemére (hiszen ezek mind a $a\varphi$ alakúak) $Uf = cf$. Így általában $Uf = UEf = cEf$, $U = cE = cP_{[\varphi]}$, s tekintve, hogy $c > 0$ (lévén U definit és nem zérus), lényegében véve $U = E = P_{[\varphi]}$. Kettő vagy kettőnél magasabb

dimenziójú \mathfrak{M} esetén M -ből kiválasztható két ortonormált elem, φ és ψ . Ekkor $P_{[\varphi]}$ és $P_{[\psi]}$ két lényegesen különböző olyan U , mely feltételünket kielégíti. Ily módon $E=0$ lehetetlen, az $E=P_{[\varphi]}(\|\varphi\|=1)$ esetén $U=E=P_{[\varphi]}$, különben pedig U többértékű.

Az, hogy $E=0$ esetén egyáltalán nem található U , megrázó lenne akkor, amikor egy S ilyen \mathfrak{C} tulajdonsággal rendelkezne. Ez azonban η miatt ki van zárva: ilyen sohasem teljesülhet, valószínűsége mindig zérus. Az egydimenziós \mathfrak{M} , vagyis az $E=P_{[\varphi]}(\|\varphi\|=1)$ eset U -t egyértelműen meghatározza és rögzíti a φ állapotot. Az ilyen mérés, amennyiben eredménye igenlő, S állapotát kimerítően meghatározza, s ez az állapot éppen φ .¹⁷⁸ Minden egyéb mérés nem teljes, és így az állapot egyértelmű meghatározására nem alkalmas.

Az általános esetben így megyünk tovább: nevezzük az \mathfrak{C} -nek megfelelő mennyiséget is \mathfrak{C} -nek. Megmérjük \mathfrak{C} -t az U_0 -hoz tartozó egész $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságon. Ezután összegyűjtjük mindazon elemeket, melyekre az eredmény 1, így kapjuk az U -nak megfelelő $[S'_1, \dots, S'_M]$ sokaságot. Az \mathfrak{C} mérését sokféleképpen elvégezhetjük, megmérhetünk például valamilyen más \mathfrak{R} mennyiséget is, melynek \mathfrak{C} ismert függvénye: $\mathfrak{C} = f(\mathfrak{R})$. A következőkre gondolunk. Legyen az \mathfrak{M} -et kifeszítő ortonormált rendszer $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, az $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ megfelelő rendszere pedig ψ_1, ψ_2, \dots . Ekkor $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ az $\mathfrak{M} + (\mathfrak{R} - \mathfrak{M})$ -et feszíti ki, tehát teljes.

Legyen $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ egymástól különböző valós számok sorozata és határozzuk meg az R operátort az

$$R\left(\sum_n x_n \varphi_n + \sum_n y_n \psi_n\right) = \sum_n \lambda_n x_n \varphi_n + \sum_n \mu_n y_n \psi_n$$

egyenlettel. Világos, hogy R tisztán diszkrét spektruma $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$, a $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ megfelelő sajátfüggvényekkel és mindegyik sajátérték egyszerűes. Ha $F(x)$ olyan függvény, hogy

$$F(\lambda_\mu) = 1, \quad F(\mu_n) = 0,$$

akkor $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ esetén $F(R)$ sajátértéke 1, tehát \mathfrak{M} tetszőleges f elemére is az, ψ_1, ψ_2, \dots esetén viszont $F(R)$ sajátértéke 0, és minden $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$ -hez tartozó elemre is 0 lesz a sajátérték. Következésképpen $E = F(R)$ és ha \mathfrak{R} -hez tartozik R , akkor $\mathfrak{C} = F(\mathfrak{R})$. Így \mathfrak{C} mérése \mathfrak{R} méréseként fogható fel.

Kiszámíthatjuk most már, hogy miként függ össze U_0 és U . Az \mathfrak{R} mérése értelmében a rendszer $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ közül valamelyik állapotban van, attól függően, hogy $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ közül melyik értéket kaptuk meg mérési eredmény gyanánt. A megfelelő valószínűségek a következők:

$$\text{Sp}(U_0 P_{[\varphi_1]}) = (U_0 \varphi_1, \varphi_1), \quad \text{Sp}(U_0 P_{[\varphi_2]}) = (U_0 \varphi_2, \varphi_2), \dots,$$

$$\text{Sp}(U_0 P_{[\psi_1]}) = (U_0 \psi_1, \psi_1), \quad \text{Sp}(U_0 P_{[\psi_2]}) = (U_0 \psi_2, \psi_2), \dots,$$

(lásd a III. 3. fejezet megállapításait, ezeknek érvényességét beláttuk). Más szóval az U_0 sokaság fenti hányadai mennek át e mérés során a $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$,

$P_{[\psi_1]}, P_{[\psi_2]}, \dots$ sokaságokba. Az U sokaság az első csoport leválasztásával adódik, hiszen \mathfrak{E} az 1 értéket akkor veszi fel, ha \mathfrak{R} értéke $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ közül kerül ki. Így

$$U = \sum_n (U_0 \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}.$$

Ám mindegyik $P_{[\varphi_n]}$ felcserélhető R -rel, s így R -nek U -val is felcserélhetőnek kell lennie. Más szóval, ha U nem cserélhető fel minden olyan R -rel, amely a fent leírt módon áll elő, akkor bizonyos mérési eljárásokat (nevezetesen azokat, amelyek a megfelelő \mathfrak{R} -től is függenek) el kell hagyni akkor, amikor U -t U_0 -ból előállítjuk. Így már többet tudunk U -ról annál, hogy csupán \mathfrak{E} mérésével állítottuk elő. Az U azonban ismereteinknek csupán ezt az állapotát tükrözi, s így igyekszünk a következő feltételhez ragaszkodni: olyan U -kat fogunk használni, amelyeknél \mathfrak{E} -nek egyetlen mérési eljárását sem kell kizárni. Lássuk most már, hogy létezik-e ilyen U , s milyen az alakja!

Mint láttuk, U -nak a fenti módon előállított valamennyi R -rel felcserélhetőnek kell lennie. Ebből következik, hogy $RU\varphi_n = UR\varphi_n = U\lambda_n\varphi = \lambda_n U\varphi$, vagyis $U\varphi_n$ az R sajátfüggvénye λ_n sajátértékkel, tehát $U\varphi_n = a_n\varphi_n$, így speciálisan $U\varphi_1 = a_1\varphi_1$ is igaz. Ám \mathfrak{R} -nek bármely olyan φ eleméhez, amelyre $\|\varphi\|=1$, megválasztható $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ úgy, hogy $\varphi_1 = \varphi$ teljesüljön és így minden ilyen φU -nak sajátfüggvénye. Itt minden φ ugyanahhoz a sajátértékhez tartozik: ha viszont φ és ψ különböző sajátértékhez tartozna, akkor egymásra ortogonálisaknak kellene lenniük. Továbbá $\frac{\varphi + \psi}{\sqrt{2}}$ is sajátfüggvény, és mivel

$$\left(\frac{\varphi + \psi}{\sqrt{2}}, \varphi\right) = \frac{(\varphi, \varphi)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \left(\frac{\varphi + \psi}{\sqrt{2}}, \psi\right) = \frac{(\psi, \psi)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

ezért ez nem ortogonális sem φ -re, sem pedig ψ -re, s így ugyanahhoz a sajátértékhez kell tartoznia, amelyhez mind φ , mind pedig ψ hozzátartozik, ez azonban lehetetlen, hiszen ezek különböző sajátértékhez tartoznak. Következésképp $U\varphi = a\varphi$, ahol a állandó. Világos, hogy a $\|\varphi\|=1$ feltételt el lehet hagyni. Így \mathfrak{R} -nek minden f elemére $Uf = af$. Tehát $UEg = aEg$ minden g -re, s így $UE = aE$, mivel azonban $U = UE$, azért $U = aE$. Az U és E definit és nem zérus, így $a > 0$, tehát lényegében $U = E$.

Ez az U azonban ténylegesen megoldja a felvetett problémát, minden R -re, tehát minden $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ rendszerre, ha U_0 -t megfelelőképpen választjuk meg. Ha $U_0 = 1$, akkor

$$\sum_n (U_0 \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]} = \sum_n (\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]} = \sum_n P_{[\varphi_n]} = P_{\mathfrak{R}} = E = U.$$

Így az $E = U$ összefüggés megalapozott a korábban vázolt program értelmében.

Az U_0 -t is meghatározhatjuk, ha feltesszük, hogy univerzális, vagyis E -től és R -től független. Ekkor a kívánt eredményt akkor és csak akkor kapjuk meg, ha $U_0 = 1$. Valóban,

$$(U\varphi_m, \varphi_m) = (E\varphi_m, \varphi_m) = (\varphi_m, \varphi_m) = 1,$$

$$\begin{aligned} (U\varphi_m, \varphi_m) &= \sum_n (U_0\varphi_n, \varphi_n) (P_{[\varphi_n]} \varphi_m, \varphi_m) = \\ &= \sum_n (U_0\varphi_n, \varphi_n) |(\varphi_n, \varphi_m)|^2 = (U_0\varphi_m, \varphi_m). \end{aligned}$$

Tehát $(U_0\varphi_m, \varphi_m) = 1$. Az \mathfrak{M} -nek tetszőleges φ eleme ($\|\varphi\| = 1$) választható φ_1 gyanánt, így $(U_0\varphi, \varphi) = 1$, s ebből következik \mathfrak{M} tetszőleges f elemére, hogy $(U_0f, f) = (f, f)$. Lévé \mathfrak{M} tetszőleges, ez minden f -re igaz, így $U_0 = 1$.

Tekintsünk két, nem feltétlenül egyszerre eldönthető \mathfrak{C} és \mathfrak{F} tulajdonságot. Mi annak valószínűsége, hogy egy olyan S rendszeren, amelyben az \mathfrak{C} tulajdonság teljesülését éppen igazoltuk, egy ezt azonnal követő mérésben az \mathfrak{F} tulajdonság teljesülését figyeljük meg? A fentiek szerint ennek valószínűsége $\text{Sp}(EF) = \sum(EF)$ (E és F \mathfrak{C} -nek, illetőleg \mathfrak{F} -nek operátora, a bal oldal azért igaz, mert $U = E$, a jobb oldal pedig azért, mert $E^2 = E$, $F^2 = F$, lásd a II. 11. fejezetet). E valószínűségek relatívek, így \mathfrak{C} rögzítettnek, \mathfrak{F} pedig változóknak tekintendő; ha $\text{Sp}(E) = \sum(E)$, ami \mathfrak{M} dimenziósszáma, s ez véges, akkor e számmal osztva normalizálhatunk.

Az \mathfrak{C} és \mathfrak{F} helyett fizikai mennyiségeket is vizsgálhatunk. Legyen $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_j$ egyszerre mérhető mennyiségrendszer és $\mathfrak{S}_1, \dots, \mathfrak{S}_i$ hasonlóképpen. (Nem kell, hogy együtt is ilyen rendszert alkossanak.) Legyenek a megfelelő operátorok R_1, \dots, R_j , illetőleg S_1, \dots, S_i és a megfelelő egységfelbontások $E_1(\lambda), \dots, E_j(\lambda)$, ill. $F_1(\lambda), \dots, F_i(\lambda)$. A megfelelő intervallumok legyenek $I_1: \lambda'_1 < \lambda \leq \lambda''_1, \dots, I_j: \lambda'_j < \lambda \leq \lambda''_j, J_1: \mu'_1 < \lambda < \mu''_1, \dots, J_i: \mu'_i < \lambda \leq \mu''_i$, és legyen $E_1(I_1) = E_1(\lambda''_1) - E_1(\lambda'_1), \dots, E_j(I_j) = E_j(\lambda''_j) - E_j(\lambda'_j), F_1(J_1) = F_1(\mu''_1) - F_1(\mu'_1), \dots, F_i(J_i) = F_i(\mu''_i) - F_i(\mu'_i)$. A kérdés a következő: ha az $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_j$ mennyiségeket megmértük az S rendszeren, s értékeik a megfelelő I_1, \dots, I_j intervallumba estek, akkor az $\mathfrak{S}_1, \dots, \mathfrak{S}_i$ mennyiségeknek egy — ezt rögvést követő — mérésénél mi annak a valószínűsége, hogy ezek értékei a megfelelő J_1, \dots, J_i intervallumba esnek? Világos, hogy $E = E_1(I_1) \dots E_j(I_j), F = F_1(J_1) \dots F_i(J_i)$ vizsgálandó meg. A kérdéses valószínűség (lásd ϵ -t és ξ -t):

$$\begin{aligned} \text{Sp}(E_1(I_1) \dots E_j(I_j) \cdot F_1(J_1) \dots F_i(J_i)) = \\ = \sum(E_1(I_1) \dots E_j(I_j) \cdot (F_1(J_1) \dots F_i(J_i))). \end{aligned}$$

Végezetül foglalkozunk még az $U_0 = 1$ általános kiindulási sokasággal. Ebből úgy kaptuk U -t, hogy \mathfrak{R} mérésével két részre bontottuk fel. Ha nem bontottuk volna fel, vagyis megmértük volna \mathfrak{R} -et mindegyik elemen, s ezeket ismét egy sokaságba egyesítettük volna, akkor újra $U_0 = 1$ lett volna az eredmény. Ez közvetlenül

könnyen kiszámítható, vagy az $E = 1$ választással bebizonyítható. Ekkor μ_1, μ_2, \dots és ψ_1, ψ_2, \dots nem játszanak szerepet és a $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ sajátértékekhez tartozó $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes rendszert alkot. Ezért, noha \mathfrak{R} mérése bizonyos körülmények között megváltoztatja az egyes elemeket, e változásoknak egymást pontosan ki kell egyenlíteniük, mert az egész sokaság nem változik meg. Mi több, $U_0 = 1$ esetén e tulajdonság jellemző. Ugyanis minden teljes ortonormált $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszere

$$U_0 = \sum_{n=1}^{\infty} (U_0 \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]},$$

így U_0 felcserélhető $P_{[\varphi_n]}$ -gyel, hiszen mindegyik $P_{[\varphi_n]}$ -nel felcserélhető. Ily módon U_0 minden $P_{[\varphi]}$ -vel ($|\varphi| = 1$) felcserélhető. Ezért

$$U_0 \varphi = U_0 P_{[\varphi]} \varphi = P_{[\varphi]} U_0 \varphi = (U_0 \varphi, \varphi) \varphi,$$

vagyis φ sajátfüggvénye U_0 -nak. Ebből következik, hogy $U_0 = 1$, mégpedig pontosan úgy, ahogy korábban a megfelelő összefüggésből azt kaptuk, hogy $U = E$ (ott \mathfrak{M} és E szerepelt \mathfrak{R} és 1 helyett).

Az $U_0 = 1$ esetben az összes lehetséges állapot a lehető legnagyobb fokú egyensúlyban van és semmilyen mérési eljárás ezt nem képes megbontani. Bármely teljes ortonormált $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszere

$$U_0 = 1 = \sum_{n=1}^{\infty} P_{[\varphi_n]},$$

vagyis a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotokra $1 : 1 : 1 : \dots$ relatív súlyú szuperpozícióról van szó. Ebből kitűnik, hogy $U_0 = 1$ a régebbi kvantummechanikában annak a szokásos termodinamikai feltevésnek felel meg, mely szerint az egyszerű kvantumpályák *a priori* valószínűsége egyenlő. Ez fontos szerepet fog játszani termodinamikai megfontolásainkban, melyekkel a következő szakaszokban foglalkozunk.

V. ÁLTALÁNOS MEGGONDOLÁSOK

1. A mérés és a reverzibilitás

Mi történik az U statisztikus operátorú keverékkel, ha az R operátorú \mathfrak{R} mennyiséget megmérjük rajta? (E mérésen azt értjük, hogy a sokaság minden elemén megmérjük \mathfrak{R} -et, s az így megmért elemeket ismét sokaságba egyesítjük.) E kérdésre — amennyire az csak lehetséges — egyértelmű választ adhatunk.

Először legyen R spektruma egyszeres és tisztán diszkrét. Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvények teljes ortonormált rendszere, $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ a megfelelő sajátérték (ezek a feltevés szerint egymástól különbözőek). A mérés után a helyzet a következő: az eredeti sokaság $(U\varphi_n, \varphi_n)$ hányadában \mathfrak{R} értéke λ_n ($n=1, 2, \dots$). E hányad így olyan sokaságot alkot, melyben \mathfrak{R} értéke biztosan λ_n (lásd **M.**-et a IV. 3. fejezetben), vagyis a (helyesen normált) $P_{[\varphi_n]}$ statisztikus operátorú φ_n állapotban van. Ezeket az alsokaságokat egybefoglalva

$$U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$$

statisztikus operátorú keveréket kapunk.

Legyen ezután R ismét tisztán diszkrét spektrumú, $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \lambda_1, \lambda_2, \dots$ jelentse ugyanazt, mint előbb, de ne tegyük fel, hogy minden λ_n sajátérték egyszeres, más szóval a λ_n -ek között lehetnek egyenlők is. Ekkor \mathfrak{R} mérési eljárása nincs egyértelműen definiálva (ugyanaz volt a helyzet például a IV. 3. fejezetben \mathfrak{E} -vel). Valóban, legyen μ_1, μ_2, \dots egymástól különböző valós számok sorozata és $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ megfelelő operátora legyen S , a megfelelő mennyiség pedig \mathfrak{S} . Ha $F(x)$ oly függvény, amelyre

$$F(\mu_n) = \lambda_n,$$

akkor $F(S) = R$, tehát $F(\mathfrak{S}) = \mathfrak{R}$, így \mathfrak{S} mérése \mathfrak{R} méréseként is felfogható. Ez U -t a fenti U' -be viszi át. Az U' független a (teljesen tetszőleges) μ_1, μ_2, \dots számoktól, de nem független a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszertől. A $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ azonban még sincs egyértelműen meghatározva, R sajátértékeinek többszörös volta miatt. A IV. 2. fejezetben már lerögzítettük (a II. 8. fejezet alapján), hogy mit mondhatunk a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszerről. Legyen $\lambda', \lambda'' \dots$ a $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ sajátértékek közül a különbözők sorozata, és legyen $\mathfrak{R}_{\lambda'}, \mathfrak{R}_{\lambda''}, \dots$ rendre az $Rf = \lambda'f, Rf = \lambda''f, Rf = \lambda'''f, \dots$ egyenlet megoldásainak halmaza. Végül legyen $\chi'_1, \chi'_2, \dots, \chi''_1, \chi''_2, \dots; \dots$ rendre az $\mathfrak{R}_{\lambda'}, \mathfrak{R}_{\lambda''}, \dots$ halmazokat kifesztítő ortonormált rendszer. Ekkor a

legáltalánosabb $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszer $\chi'_1, \chi'_2, \dots, \chi''_1, \chi''_2, \dots, \dots$. Az U' függhet \mathfrak{E} megválasztásától, vagyis a mérőberendezéstől, és általános alakja a következő:

$$U' = \sum_n (U\chi'_n, \chi'_n) P_{[\chi'_n]} + \sum_n (U\chi''_n, \chi''_n) P_{[\chi''_n]} + \dots$$

E kifejezés azonban csak bizonyos esetekben egyértelmű.

Határozzuk meg ezt az esetet. Minden tagnak külön egyértelműnek kell lennie, vagyis ha \mathfrak{M}_λ az $Rf = \lambda f$ egyenlet megoldásainak halmaza (λ tetszőleges), a

$$\sum_n (U\chi'_n, \chi'_n) P_{[\chi'_n]}$$

összeg értékének az \mathfrak{M}_λ -t kifeszítő valamennyi χ_1, χ_2, \dots ortonormált rendszerre ugyanannak kell lennie. Ezt az összeget V -vel jelölve és a IV. 3. fejezet megállapításait (melyekben U_0, U, \mathfrak{M} az U -val, V -vel és \mathfrak{M}_λ -val helyettesítendő) szó szerint megismételve azt kapjuk, hogy $V = c_\lambda P_{\mathfrak{M}_\lambda}$ (c_λ nemnegatív állandó) és ez egyenértékű azzal, hogy $(Uf, f) = c_\lambda (f, f)$ az \mathfrak{M}_λ -nak minden f elemére. Az ilyen f -ek azonban $P_{\mathfrak{M}_\lambda} g$ alakúak tetszőleges g -vel, így a követelményünk

$$(UP_{\mathfrak{M}_\lambda} g, P_{\mathfrak{M}_\lambda} g) = c_\lambda (P_{\mathfrak{M}_\lambda} g, P_{\mathfrak{M}_\lambda} g),$$

vagyis

$$(P_{\mathfrak{M}_\lambda} UP_{\mathfrak{M}_\lambda} g, g) = c_\lambda (P_{\mathfrak{M}_\lambda} g, g),$$

tehát

$$P_{\mathfrak{M}_\lambda} UP_{\mathfrak{M}_\lambda} = c_\lambda P_{\mathfrak{M}_\lambda},$$

az R -nek minden λ sajátértékére. Ha ez az U -t erősen megszorító feltétel nem elégül ki, akkor az \mathfrak{M} mérésére szolgáló különböző berendezések U -t más-más U' -be transzformálják át. (Az V. 4.-ben termodinamikai alapon néhány megállapítást teszünk majd \mathfrak{M} tetszőleges mérésének eredményére vonatkozóan.)

Végül R spektruma ne legyen tisztán diszkrét. Ekkor a III. 3. fejezet (vagy a IV. 3. fejezetben található kritérium) miatt \mathfrak{M} nem mérhető abszolút pontosan. Az \mathfrak{M} korlátolt pontosságú mérései (ahogy azt az említett esetben megtárgyaltuk) egyenértékűek tisztán diszkrét spektrumú mennyiségek mérésével.

A kísérletek vagy mérések nemfolytonos, nemkauzális és pillanatszerű hatásával szemben az időtől függő *Schrödinger*-egyenlet az anyagi rendszer más jellegű folyamatát írja le, nevezetesen azt, hogy a teljes energia ismeretében miként változik a rendszer folytonosan és kauzálisan az időben. A φ állapotra ez az egyenlet azt állítja, hogy

$$(T_1) \quad \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t = -\frac{2\pi i}{h} H\varphi_t,$$

ahol H az energiaoperátor.

A φ_t állapot $U_t = P_{[\varphi_t]}$ statisztikus operátorára ebből az következik, hogy

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} U_t\right)f = \frac{\partial}{\partial t} (U_t f) = \frac{\partial}{\partial t} ((f, \varphi_t) \cdot \varphi_t) =$$

$$\begin{aligned}
&= \left(f, \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t \right) \cdot \varphi_t + (f, \varphi_t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t = \\
&= - \left(f, \frac{2\pi i}{h} H \varphi_t \right) \cdot \varphi_t - (f, \varphi_t) \frac{2\pi i}{h} H \varphi_t = \\
&= \frac{2\pi i}{h} ((Hf, \varphi_t) \cdot \varphi_t - (f, \varphi_t) H \varphi_t) = \\
&= \frac{2\pi i}{h} (U_t H - H U_t) f,
\end{aligned}$$

vagyis

$$(T_2) \quad \frac{\partial}{\partial t} U_t = \frac{2\pi i}{h} (U_t H - H U_t).$$

Ha U_t nem állapot, hanem mondjuk a

$$P_{[\varphi_t^{(1)}]}, \quad P_{[\varphi_t^{(2)}]},$$

állapotoknak a megfelelő w_1, w_2, \dots súlyokkal vett keveréke, akkor U_t változása az egyes

$$P_{[\varphi_t^{(1)}]}, \quad P_{[\varphi_t^{(2)}]}$$

állapotok változásaiból tevődik össze. A megfelelő T_2 egyenleteket összeadva látszik, hogy T_2 az ilyen U_t -re is igaz. Mivel minden U ilyen keverék, vagy ilyen keverék határesete (például minden olyan U , amelyre $\text{Sp } U$ véges, ilyen keverék), megkövetelhetjük T_2 általános érvényességét.

A T_2 -ben H még függhet t -től, csakúgy, mint a T_1 . Schrödinger-féle differenciál-egyenletben. Ha nem ez a helyzet, akkor még explicit megoldásokat is megadhatunk; a T_1 -re akkor, mint tudjuk,

$$(T_1) \quad \varphi_t = e^{-\frac{2\pi i}{h} tH} \varphi_0,$$

T_2 -re pedig

$$(T_2) \quad U_t = e^{-\frac{2\pi i}{h} tH} U_0 e^{\frac{2\pi i}{h} tH}.$$

(Könnyen igazolható, hogy ezek megoldások, s az is, hogy egymás következményei. Az is nyilvánvaló, hogy rögzített φ_0 , illetőleg U_0 mellett csak egyetlen megoldás létezik: a T_1 , T_2 differenciálegyenletek t -ben elsőrendűek.)

Ily módon az S rendszerben, vagy az $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságban két alapvetően különböző jellegű folyamat játszódhat le. Az első a mérések okozta tetszőleges változás, amelyet az

$$(1) \quad U \rightarrow U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$$

képlet ad meg (itt $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszer). A második az idő múltával lejátszódó változás, ezt a

$$(2) \quad U \rightarrow U_t = e^{-\frac{2\pi i}{h} tH} U e^{\frac{2\pi i}{h} tH}$$

képlet szolgáltatja (t az idő, H pedig a t -től független energiaoperátor). Ha H függ t -től, akkor a vizsgált időintervallumot olyan kicsiny részintervallumokra osztjuk fel, amelyekben H nem, vagy csak alig változik, és e részintervallumokra egyenként alkalmazzuk (2.)-öt. A végeredményt szuperpozíció adja meg.

Most részletesebben elemeznünk kell kétféle folyamat természetét és viszonyát egymáshoz.

Először is meg kell jegyezni, hogy H időfüggését **2.** magába foglalja (az ott leírt módon), s így azt várhatnánk, hogy **2.** alkalmas a mérés okozta változás leírására is. Valóban, a fizikai hatás nem lehet egyéb, mint bizonyos energiacsatolás átmeneti bekapcsolása a megfigyelt rendszerbe, vagyis (a megfigyelő által előírt) megfelelő időfüggés bekapcsolása H -ba. Miért van akkor az **1.** folyamatra szükség a mérések jellemzésekor? Ennek oka a következő: a mérés során nem tudjuk az S rendszert magában vizsgálni, hanem ahhoz, hogy kölcsönhatását az M mérőberendezéssel megkaphassuk, az $S+M$ rendszert kell szemügyre vennünk. A mérés elméleti szempontból $S+M$ -re vonatkozó állítás, amely azt adja meg, hogy S állapota milyen kapcsolatban van M állapotainak bizonyos jellemzőivel (nevezetesen a megfigyelő által leolvasott bizonyos mutató állásával). Az, hogy a megfigyelőt beleértjük M -be vagy sem, eléggé a tetszésünkre van bízva, csupán azt jelenti, hogy S állapotának és M mutatójának kapcsolatát S állapotának és a megfigyelő szemében vagy agyában lejátszódó kémiai folyamatnak (mely során a megfigyelő észlel) kapcsolatával helyettesítjük. Ezt alaposabban a VI. 1. fejezetben vizsgáljuk meg. Mindenesetre **2.**-nek csak $S+M$ esetében van fontos szerepe. Meg kell természetesen mutatnunk, hogy ez S vonatkozásában ugyanazt az eredményt szolgáltatja, mintha **1.**-et közvetlenül alkalmaznánk S -re. Ha ez sikerrel jár, akkor elértük, hogy a fizikai világot egységes kvantummechanikai alapon tudjuk vizsgálni. Ezt a kérdést a VI. 3. fejezetben vizsgáljuk meg.

Másodszor, meg kell jegyezni **1.**-gyel kapcsolatban: ismételten megmutattuk, hogy az **1.** értelmében vett mérésnek pillanatszerűnek kell lennie, vagyis azt olyan rövid idő alatt kell végrehajtani, amely során U -nak a **2.** által megadott változása még jelentéktelen. (Ha ezt úgy kívánjuk helyesbíteni, hogy **2.** alapján kiszámítjuk a megváltozott U_t -t, akkor sem kapunk semmit, mert ahhoz, hogy valamilyen U_t -t alkalmazzunk, ismernünk kell t -t, a mérés pillanatát pontosan, vagyis a mérés időtartamának rövidnek kell lennie.) Itt elvi kérdés merül fel, hiszen jól ismert, hogy a klasszikus mechanikában van olyan mennyiség, nevezetesen az energia, amely az idő kanonikus konjugáltja.¹⁸⁰ Így várható, hogy az idő—energia kanonikus konjugált párra a Descartes-féle koordináta—impulzus párra vonatkozó határozatlansági relációhoz hasonló összefüggésnek kell fennállnia.¹⁸¹ Megjegyezzük, hogy a speciális relativitás elmélete messzevezető analógiára vet fényt: a három térkoordináta és az idő négyesvektort alkot csakúgy, mint a három impulzuskom-

ponens és az energia. Az ilyen határozatlansági összefüggés azt jelenti, hogy az energiának nagyon pontos mérése nem vihető végbe nagyon rövid idő alatt. Valóban, az várható, hogy az energia ε mérési hibája és a τ időtartam között

$$\varepsilon\tau \sim h$$

alakú összefüggés érvényes. A III. 4. fejezetben a p -re és a q -ra elmondotthoz hasonló fizikai gondolatmenet valóban erre az eredményre vezet. Anélkül, hogy a részletekbe mennénk, tekintsük a fénykvantum esetét. Ennek ε energiabizonytalansága a Bohr-féle rezgésszámfeltétel miatt $h\Delta\nu$, tehát a rezgésszám-bizonytalanság h -szorososa. Ám, ahogy arra a 137. jegyzetben rámutattunk, $\Delta\nu$ a legjobb esetben az időtartam reciproka $1/\tau$, vagyis $\varepsilon \geq h/\tau$, s ahhoz, hogy az egész τ időintervallumban a fénykvantum monokromatikus legyen, a mérésnek legalább τ ideig kell tartania. A fénykvantum esete jellemző, hiszen az atomi energiaszinteket rendszerint a megfelelő spektrumvonalak frekvenciáiból állapítják meg. Mivel az energia így viselkedik, lehetséges, hogy van összefüggés más \mathfrak{R} mennyiség mérési pontossága és a mérés időtartama között. Jogosult-e hát az a feltevésünk, hogy a mérések pillanatszerűek?

Mindenekelőtt el kell ismernünk, hogy ez az ellenvetés lényeges nehézségre mutat rá, amely a kvantummechanika legfőbb nehézsége, s ez éppen a nemrelativisztikus jelleg, mely kitünteti a t időt az x , y , z koordinátákkal szemben, s így feltételezi az objektív egyidejűség fogalmát. Míg minden más mennyiséget (például a t -hez a Lorentz-transzformációkon keresztül szorosan kapcsolódó x , y , z koordinátákat is) operátorok reprezentálnak, az időnek a közönséges t számparaméter felel meg ugyanúgy, mint a klasszikus mechanikában. Vagy másként fogalmazva, a kétrészecskés rendszer hullámfüggvénye $2 \times 3 = 6$ térkoordinátától, de csak egy t időtől függ, noha a Lorentz-transzformáció miatt két idő lenne kívánatos. Lehet, hogy a kvantummechanika eme nemrelativisztikus jellegével van összefüggésben az, hogy a mérések minimális időtartamának természetes törvényét figyelmen kívül hagyhatjuk. E magyarázat, noha lehetséges, ám nem szerencsés!

A probléma részletesebb vizsgálata azonban azt mutatja, hogy a helyzet nem ennyire rossz. Nem arra van tulajdonképpen szükségünk ugyanis, hogy t megváltozása kicsiny legyen, hanem arra, hogy az $(U\varphi_n, \varphi_n)$ valószínűségek kiszámítását kevésbé befolyásolja, tehát hogy

$$U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]},$$

akár U , akár

$$U_t = e^{-\frac{2\pi i}{h} tH} U e^{\frac{2\pi i}{h} tH}$$

segítségével legyen képezhető. Tekintve, hogy

$$\begin{aligned} (U_t\varphi_n, \varphi_n) &= (e^{-\frac{2\pi i}{h} tH} U e^{\frac{2\pi i}{h} tH} \varphi_n, \varphi_n) = \\ &= (U e^{\frac{2\pi i}{h} tH} \varphi_n, e^{-\frac{2\pi i}{h} tH} \varphi_n), \end{aligned}$$

ez akkor lehetséges, ha a megfelelő perturbációs energiával megváltoztatott H olyan, hogy

$$e^{\frac{2\pi i}{h} tH} \varphi_n$$

a φ_n -től csak egységnyi abszolút értékű állandó szorzóban különbözik. Más szóval a φ_n állapotnak 2 . hatása alatt lényegében változatlanul kell maradnia, vagyis φ_n stacionárius állapot, tehát $H\varphi_n = \varphi_n$ -nek valós állandószorosa. Ez azt jelenti, hogy φ_n a H sajátfüggvénye. Első pillantásra nem tűnik kézenfekvőnek, hogy a H operátor úgy változik meg, hogy R sajátfüggvényei egyben H -nak is sajátfüggvényei, tehát stacionárius állapotok lesznek (vagyis, hogy H és R felcserélhető egymással). Pedig tulajdonképpen ez a helyzet, és még az is belátható, hogy a tipikus mérőberendezések célja H -t éppen így változtatni meg.

Valójában bármely mérés eredményeképpen vagy fénykvantum, vagy tömeggel rendelkező részecske bocsátódik ki bizonyos irányban, bizonyos energiával. E jellemzőkkel, tehát az impulzussal a részecske a mérés eredményét fejezi ki, vagy pedig egy tömegpont (például egy mutató egy skálában) nyugalomba jut s *Descartes*-koordinátái szolgáltatják a mérés eredményét. A fénykvantumok esetében, a III. 6. fejezet szóhasználatával élve, a kívánt mérés így azzal egyenértékű, hogy felsoroljuk az M_1, M_2, \dots értékeket, nevezetesen $M_n=1$ és a többi pedig zérus. Mozgó (kirepülő) tömegpontra a mérés a P^x, P^y, P^z impulzuskomponensek megállapításával egyenértékű, a nyugalomban levő tömegpontnál (a mutatónál) az x, y, z *Descartes*-koordinátákat, illetve a Q^x, Q^y, Q^z operátorok értékeit kell rögzíteni. A mérés azonban csak akkor ér véget, ha a fénykvantum, vagy a tömegpont kiszabadul, vagyis ha a fénykvantumot többé nem fenyegeti az elnyelődés veszélye, a tömegpontot már nem térítik el potenciálok, s ha a mutató valóban nyugalomba jut, amelyhez nagy tömeg szükséges.¹⁸² (Ez utóbbi a határozatlansági összefüggések miatt biztosan szükséges, hiszen a sebességnek közel zérusnak, szórásának tehát kicsinynek kell lennie, bár az impulzus szórása, amely a sebesség szórásának a tömegszerese, nagy a koordináták kicsiny szórása miatt. A mutatók általában makroszkopikus testek, tehát óriásiak.) A H energiaoperátor a fénykvantum esetében

$$\sum_{n=1}^{\infty} h\rho_n \cdot M_n + \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} W_{kj}^n \left(\sqrt{M_n+1} \begin{pmatrix} k \rightarrow j \\ M_n \rightarrow M_n+1 \end{pmatrix} + \sqrt{M_n} \begin{pmatrix} k \rightarrow j \\ M_n \rightarrow M_n-1 \end{pmatrix} \right),$$

míg a tömegpontos példában H a következő:

$$\frac{(P^x)^2 + (P^y)^2 + (P^z)^2}{2m} + V(Q^x, Q^y, Q^z)$$

(m a tömeg, V pedig a potenciális energia). Kritériumaink szerint a W_{kj}^n -eknek el kell tűnniük, illetőleg V -nek állandónak, vagy pedig m -nek igen nagyra kell lennie.

Mindez valóban oda hat, hogy P^x, P^y, P^z illetőleg Q^x, Q^y, Q^z az így előálló H -val felcserélhető legyen.

Végül megemlítjük még, hogy az, amikor a valóban érdekes állapotok (itt $\varphi_1, \varphi_2, \dots$) stacionáriussá válnak, az elméleti fizikában másutt is fontos szerepet játszik. Az a feltevés, hogy a kémiai reakciók félbeszakíthatók („megmérgezhető”) — erre a fizikai kémia gondolat kísérleteiben sokszor van szükség —, ilyen jellegű.¹⁸³

Az **1.** és a **2.** folyamat egymástól lényegesen különbözik. Nem érdekes, hogy mindkettő egyértelmű, azaz kauzális, hiszen a keverékek statisztikus tulajdonságai-val dolgozva nem meglepő, hogy minden változás még akkor is statisztikus, ha a valószínűségeken és a várható értékeken kauzális változást okoz. Tulajdonképpen pontosan ennél az oknál fogva vezetjük be a statisztikus sokaságokat és a valószínűségeket. Az azonban igenis fontos, hogy **2.** az U -ban jelenlevő statisztikus bizonytalanságot nem növeli, **1.** azonban igen. A **2.** az állapotokat állapotokba viszi át:

a $P_{[\varphi]}$ állapot $P_{[e^{-\frac{2\pi i}{h} t H}]}-be$ megy át,

az **1.** viszont az állapotokat keverékekbe is átviheti. Ebben az értelemben tehát az állapotok **1.** szerinti fejlődése statisztikus, míg a **2.** szerinti kauzális.

Továbbá rögzített H és t mellett **2.** minden U -ra egyszerűen unitér transzformáció: $U_t = A U A^{-1}$, ahol

$$A = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H}$$

unitér. Más szóval $Uf = g$ következtében $U_t(Af) = Ag$, tehát U_t az U -ból a Hilbert-térnek A -val történő unitér transzformálása során áll elő, ez izomorfizmus, mely az alapvető geometriai viszonyokat változatlanul hagyja (lásd az I. 4. fejezetben lefektetett elveket). E transzformáció megfordítható, hiszen csak A -t kell A^{-1} -gyel helyettesíteni, ami lehetséges, mivel A , illetve A^{-1} tetszőleges unitér operátornak tekinthető, H és t messzemenően szabad megválasztása miatt. Éppúgy, mint a klasszikus mechanika esetében tehát **2.** nem tükrözi a valóságos világ egyik legfontosabb és legszembeötlőbb tulajdonságát, az irreverzibilitást, azt, hogy a „jövő” és „múlt” időirányok között alapvető különbség van.

Az **1.** alapvetően más tulajdonságú. Az

$$U \rightarrow U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$$

átmenet nem fordítható meg minden további nélkül. Nemsokára látni fogjuk, hogy általában valóban irreverzibilis abban az értelemben, hogy adott U' -ből a hozzá tartozó U -ra nem lehet az **1.** és **2.** folyamatok ismételt alkalmazásával általában visszatérni.

Olyan ponthoz érkeztünk tehát, ahol termodinamikai módszert kívánatos gyümölcsöztetni a vizsgálatainkban, mert egyedül ez teszi lehetővé, hogy helyesen értelmezzük azt a különbséget **1.** és **2.** között, amelybe a reverzibilitás kérdései bejátszanak.

2. Termodinamikai megfontolások

A kvantummechanikai sokaságok termodinamikáját két szempontból vizsgáljuk meg. Tegyük fel először, hogy érvényes a termodinamika két főtétele, vagyis, hogy első- és másodfajú örökmozgó nem létezik (ez az energia, illetőleg az entrópiátétel).¹⁸⁴ Számítsuk ki ennek alapján a sokaságok entrópiáját. Ennek során a fenomenológiai termodinamika szokásos módszereit alkalmazzuk, a kvantummechanika csak azért játszik szerepet, mert megfontolásaink olyan objektumokra vonatkoznak, amelyeknek viselkedését a kvantummechanika törvényei kormányozzák (mind sokaságainkat, mind pedig azok U statisztikus operátorát). Először a két főtétele érvényesnek fogadjuk el, s azokat a kvantummechanikára csak később bizonyítjuk be. Ám, majd csak az entrópiátétellel kell foglalkoznunk, mert az energiatétel mindig igaz. Megmutatjuk, hogy az 1. és a 2. folyamat sohasem csökkenti az általunk kiszámított entrópiát. E sorrend természetellenesnek tűnhet, ezt azonban az indokolja, hogy előbb a fenomenológikus termodinamikai tárgyalás során olyan áttekintést kapunk a problémáról, amelyre a második típusú megfontolásainknál szükség lesz.

Kezdjük tehát a fenomenológiával, mellyel a klasszikus termodinamika egy jól ismert paradoxonát is meg tudjuk majd oldani. Először is hangsúlyozzuk, hogy „ideális kísérleteink” különleges volta, az, hogy tulajdonképpen végrehajthatatlannak, nem csökkenti a belőlük levonható következtetések súlyát. A fenomenológiai termodinamika értelmében minden elképzelhető folyamat, hacsak a termodinamika két alaptörvényének nem mond ellent, igaz tanulságot szolgáltat.

Célunk az U statisztikus operátorú $[S_1, \dots, S_N]$ sokaság entrópiáját meghatározni. Feltételezzük, hogy az U helyesen normált, vagyis $\text{Sp } U = 1$. A klasszikus statisztikus mechanika szóhasználatával élve *Gibbs*-féle sokasággal dolgozunk: a statisztikát és termodinamikát tehát nem egyetlen, nagyon bonyolult, sok (azonban csak hiányosan ismert) szabadsági fokú mechanikai rendszer (kölcsonható) komponenseire alkalmazzuk,¹⁸⁵ hanem nagyszámú (egymással azonos) mechanikai rendszer sokaságára. E mechanikai rendszerek szabadsági fokainak száma tetszőlegesen nagy, és egymástól tökéletesen el vannak szigetelve, s így egymással nem hatnak kölcsön.¹⁸⁶ Az S_1, \dots, S_N rendszer egymástól tökéletesen el van szigetelve, továbbá e rendszerekre a valószínűségszámítás szokásos számlálási módszereit alkalmazzuk, s így magától értődik, hogy a szokásos statisztikát kell használni és az ettől eltérő *Bose—Einstein*-féle, valamint a *Fermi—Dirac*-féle statisztika, amely viszont egymástól megkülönböztethetetlen, egymással kölcsönható részecskék bizonyos sokaságaira alkalmazható (nevezetesen fénykvantumokra vagy elektronokra és protonokra, lásd a III. 6. fejezetet és különösen a 147. jegyzetet), a problémánkba nem játszik bele.

Az ilyen $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságok kezelésére az *EINSTEIN* által bevezetett módszer a következő:¹⁸⁷ Az S_1, \dots, S_N rendszerek rendre a K_1, \dots, K_N dobozba vannak bezárva, e dobozok fala a rendszereket érő valamennyi többi hatás számára áthatolhatatlan, ami megengedhető, minthogy a rendszerek nem hatnak kölcsön. Továbbá, minden doboz tömege olyan nagyon nagy, hogy rá S_1, \dots, S_N lehetséges

állapot- (tehát energia- és tömeg-) változásainak alig van hatása. A végrehajtandó ideális kísérletben így sebességük is elég kicsiny ahhoz, hogy a számításokat nemrelativisztikusan lehessen elvégezni. E dobozokat ezután a nagyon nagy \bar{K} dobozba zárjuk be (a \bar{K} doboz V térfogata K_1, \dots, K_N térfogatának összegénél sokkal nagyobb). Egyszerűség kedvéért semmilyen erőter se legyen \bar{K} -ban (nevezetesen gravitációs erőter sem és legyen \bar{K} olyan nagy, hogy K_1, \dots, K_N tömegének se legyen hatása). A K_1, \dots, K_N (ezekbe van rendre S_1, \dots, S_N bezárva) így a nagy \bar{K} tartályba bezárt gáz molekuláinak tekinthető. Ha most \bar{K} -t T hőmérsékletű nagyon nagy hőtartállyal kapcsoljuk össze, akkor \bar{K} falának molekulái hőmozgásba kezdenek, impulzust adnak át K_1, \dots, K_N közül a közelükben tartózkodóknak, ezek meg a többinek adnak tovább impulzust. Nemsokára valamennyi K_1, \dots, K_N mozgásba jön és ütközések során \bar{K} falának (igazi) molekuláival és egymással impulzust fognak cserélni. A stacionárius egyensúlyi mozgásállapot akkor jön létre, ha K_1, \dots, K_N felveszi a T hőmérsékletű fal molekuláinak hőmozgásával egyensúlyt tartó sebességeloszlást. Ez a K_1, \dots, K_N „molekulából” álló T hőmérsékletű gáz *Maxwell*-féle sebességeloszlása lesz.¹⁸⁸ Ekkor azt mondhatjuk, hogy az $[S_1, \dots, S_N]$ gáz felvette a T hőmérsékletet. A rövidség kedvéért az U statisztikus operátorú $[S_1, \dots, S_N]$ sokaságot U -sokaságnak és a $[S_1, \dots, S_N]$ gázt U -gáznak fogjuk nevezni.

Azért foglalkozunk ilyen gázzal, mert meg kell határoznunk az U -sokaság és a V -sokaság entrópiakülönbségét (U és V definit operátorok, a megfelelő sokaság $[S_1, \dots, S_N]$, illetve $[S'_1, \dots, S'_N]$, $\text{Sp } U = 1$, $\text{Sp } V = 1$). Ekkor — definíció szerint — olyan reverzibilis átalakulást kell találnunk, amely során az első sokaság a másodikba megy át.¹⁸⁹ E transzformációt legkönnyebben az U - és V -gázok segítségével találhatjuk meg. Más szóval azt állítjuk, hogy az U - és V -gázok entrópiakülönbsége megegyezik az U - és V -sokaság entrópiakülönbségével, ha ezeket tetszőleges, de egyforma T hőmérsékleten vizsgáljuk. Ha T majdnem pontosan zérus, akkor ez nyilvánvalóan tetszőleges pontossággal igaz, hiszen az U -sokaság és az U -gáz között a különbség 0 hőmérsékleten eltűnik, hiszen az utóbbi K_1, \dots, K_N dobozainak ekkor nincs saját mozgásuk, és K_1, \dots, K_N , \bar{K} jelenléte nyugalomban termodinamikai szempontból lényegtelen (ugyanígy V -re). Célhoz érünk tehát, ha megmutatjuk, hogy T adott változásakor az U -gáz entrópiája ugyanannyival változik meg, mint a V -gázé. A T_1 -ről T_2 -re felmelegített gáz entrópiaváltozása a gáz kalorikus állapotegyenletétől, pontosabban fajhőjétől függ.¹⁹⁰ Természetesen nem szabad feltételeznünk, hogy a gáz ideális, ha — mint esetünkben is — a T_1 -et 0-hoz közeleink választjuk.¹⁹¹ Másrésztől biztos, hogy az U - és a V -gáz állapotegyenlete és fajhője megegyezik, mert a kinetikus elmélet miatt a K_1, \dots, K_N dobozok dominálnak és teljesen elfedik a bennük levő S_1, \dots, S_N , illetve S'_1, \dots, S'_N rendszereket. E melegítés során az U és V között a különbség elhanyagolható és a két entrópiakülönbség egybeesik, ahogy azt állítottuk. A továbbiakban tehát csak az U - és V -gázokat hasonlítjuk össze és a T hőmérsékletet olyan nagyra választjuk, hogy a két gáz ideálisnak legyen tekinthető.¹⁹² Ily módon a kinetikus viselkedést kézben tartjuk, s az igazi feladathoz hozzáláthatunk: az U -gázt reverzibilis módon át kell vinni a V -gázba. Eközben azonban az előbb vizsgált

folyamatokkal szemben K_1, \dots, K_N belsejében levő S_1, \dots, S_N rendszereket kell szemügyre vennünk, s e dobozokat „fel kell nyitnunk”.

Most megmutatjuk, hogy minden $U = P_{[\varphi]}$ állapot entrópiája ugyanaz, vagyis a $P_{[\varphi]}$ sokaságot a $P_{[\psi]}$ sokaságba átvivő reverzibilis transzformáció hőenergia felszabadulása vagy elnyelődése nélkül megy végbe (mechanikai energia természetesen keletkezik vagy elhasználódik, ha az energia várhatóértéke más $P_{[\psi]}$ -ben, mint $P_{[\varphi]}$ -ben, lásd a 189. jegyzetet). Valóban, még az előbb vizsgált gázokra sem kell hivatkoznunk. Ez az átalakítás zérus hőmérsékleten, tehát magukon a sokaságokon is végrehajtható. Megjegyezzük továbbá, hogy mihelyt ezt bebizonyítottuk, az U -sokaságok entrópiáját lehetséges lesz úgy normálni, hogy az állapotok entrópiája zérus legyen.

Még azt sem kell megkövetelnünk, hogy a $P_{[\varphi]}$ -t $P_{[\psi]}$ -be átvivő, fent jelzett transzformáció reverzibilis legyen. Ha ugyanis nem az, akkor az entrópiakülönbség nem lehet kisebb, mint a 189. jegyzetben megadott kifejezés (lásd a 185. jegyzetet is), tehát nem lehet negatív. A $P_{[\varphi]}$ és $P_{[\psi]}$ felcserélése azt mutatja, hogy nem lehet pozitív sem, tehát az entrópiakülönbség zérus.

A legegyszerűbb átmenet az időtől függő *Schrödinger*-féle differenciálegyenletre, vagyis a 2. folyamatra hivatkozva kapható. Olyan H operátort és t számot kell találni, hogy az

$$e^{-\frac{2\pi i}{h} tH}$$

unitér operátor a φ -t ψ -be vigye át. Ekkor t másodperc alatt $P_{[\varphi]}$ magától $P_{[\psi]}$ -be fog átmenni. A folyamat megfordítható és hőről egyáltalán nem esett szó (lásd az V. 1. fejezetet). A H energiaoperátorok lehetséges alakjára vonatkozó feltevéseket azonban szeretnénk elkerülni. Arra törekszünk, hogy csak az 1.-t, vagyis mérési folyamatokat alkalmazzunk. A legegyszerűbb ilyen mérés olyan \mathfrak{R} mennyiség mérése lenne a $P_{[\varphi]}$ sokaságon, amelynek R operátora tisztán diszkrét spektrumú, a $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ sajátértékek egyszerűek és ψ a ψ_1, ψ_2, \dots sajátfüggvények valamelyike, mondjuk $\psi_1 = \psi$. Ez a mérés φ -t a ψ_1, ψ_2, \dots állapotok olyan keverékébe viszi át, amelyben $\psi_1 = \psi$ a többi ψ_n -nel együtt lesz jelen. E folyamat azonban nem felel meg, mert $\psi_1 = \psi$ csak a $|(\varphi, \psi)|^2$ valószínűséggel fordul elő, míg az $1 - |(\varphi, \psi)|^2$ hányad másféle állapotokba megy át. Egymásra ortogonális φ és ψ esetén az utóbbi hányad lesz az átmenet teljes eredménye. Egy másfajta kísérlet azonban megfelel majd a céljainknak. Különböző méréseket igen sokszor megismételve $P_{[\varphi]}$ -t olyan sokaságba visszük át, mely $P_{[\psi]}$ -től tetszőlegesen kevésbé különbözik. Fenti megfontolásunk alapján lényegtelen, hogy ezek az operátorok lehetnek irreverzibilisek is.

Tegyük fel, hogy φ ortogonális ψ -re, ha ugyanis nem az, akkor választható olyan χ ($|\chi| = 1$), mely mindkettőre ortogonális, és először φ -ből χ -be, majd χ -ből ψ -be megyünk át. Legyen $k = 1, 2, \dots$ tetszőleges egész szám és legyen

$$\psi^{(v)} = \cos \frac{\pi v}{2k} \varphi + \sin \frac{\pi v}{2k} \psi \quad (v = 0, 1, \dots, k),$$

világos, hogy $\psi^{(0)} = \varphi$, $\psi^{(k)} = \psi$ és $\|\psi^{(v)}\| = 1$. A $\psi^{(v)}$ -ket olyan teljes ortonormált $\psi_1^{(v)}, \psi_2^{(v)}, \dots$ rendszerré egészítjük ki, amelyre $\psi_1^{(v)} = \psi^{(v)}$. Legyen $R^{(v)}$ olyan tisztán diszkrét spektrumú operátor, amelynek $\lambda_1^{(v)}, \lambda_2^{(v)}, \dots$ sajátértékei egyszeresek és amelynek $\psi_1^{(v)}, \psi_2^{(v)}, \dots$ a sajátfüggvénye. Legyen $\mathfrak{R}^{(v)}$ a megfelelő mennyiség. Vegyük észre, hogy

$$\begin{aligned} (\psi^{(v-1)}, \psi^{(v)}) &= \cos \frac{\pi(v-1)}{2k} \cos \frac{\pi v}{2k} + \\ &+ \sin \frac{\pi(v-1)}{2k} \sin \frac{\pi v}{2k} = \cos \left(\frac{\pi v}{2k} - \frac{\pi(v-1)}{2k} \right) = \cos \frac{\pi}{2k}. \end{aligned}$$

Az $U^{(0)} = P_{[\psi^{(0)}]} = P_{[\varphi]}$ sokaságon megmérjük az $\mathfrak{R}^{(1)}$ mennyiséget; az eredmény $U^{(1)}$. Ezután $\mathfrak{R}^{(2)}$ -t mérjük meg $U^{(1)}$ -en, az eredmény $U^{(2)}$, és így tovább. Végül az $\mathfrak{R}^{(k)}$ mennyiséget mérjük meg $U^{(k-1)}$ -en, s az eredmény $U^{(k)}$ lesz. Könnyen be lehet bizonyítani, hogy elég nagy k esetén $U^{(k)}$ tetszőlegesen megközelíti a $P_{[\psi^{(k)}]} = P_{[\psi]}$ sokaságot. Ha $\mathfrak{R}^{(v)}$ -t $\psi^{(v-1)}$ -en mérjük meg, akkor az

$$|(\psi^{(v-1)}, \psi^{(v)})|^2 = \left(\cos \frac{\pi}{2k} \right)^2$$

hányad $\psi^{(v)}$ -be megy át. Így az $\mathfrak{R}^{(1)}, \mathfrak{R}^{(2)}, \dots, \mathfrak{R}^{(k)}$ mennyiségeket egymás után mérve a $\psi^{(0)} = \varphi$ állapotból a $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(k-1)}$ állapotokon át legalább a $\left(\cos \frac{\pi}{2k} \right)^{2k}$ hányad megy át a $\psi = \psi^{(k)}$ állapotba. Mivel $\left(\cos \frac{\pi}{2k} \right)^{2k} \rightarrow 1$, ha $k \rightarrow \infty$, végeredményként szinte kizárólag ψ adódik, ha k elég nagy. A pontos bizonyítás a következő: Az 1. folyamat a spurt nem változtatja meg, és mivel $\text{Sp } U^{(0)} = \text{Sp } P_{[\varphi]} = 1$, azért $\text{Sp } U^{(1)} = \text{Sp } U^{(2)} = \dots = \text{Sp } U^{(k)} = 1$. Másrészt

$$\begin{aligned} (U^{(v)} f, f) &= \sum_n (U^{(v-1)} \psi_n^{(v)}, \psi_n^{(v)}) (P_{[\psi_n^{(v)}]} f, f) = \\ &= \sum_n (U^{(v-1)} \psi_n^{(v)}, \psi_n^{(v)}) |(\psi_n^{(v)}, f)|^2. \end{aligned}$$

Így, ha $v = 1, \dots, k-1$ és $f = \psi_1^{(v+1)} = \psi^{(v+1)}$, illetőleg, ha $v = k$, és $f = \psi_1^{(k)} = \psi^{(k)} = \psi$, akkor

$$\begin{aligned} (U^{(v)} \psi^{(v+1)}, \psi^{(v+1)}) &\geq (U^{(v-1)} \psi^{(v)}, \psi^{(v)}) \times \\ &\times |(\psi^{(v)}, \psi^{(v+1)})|^2 = \left(\cos \frac{\pi}{2k} \right)^2 (U^{(v-1)} \psi^{(v)}, \psi^{(v)}), \end{aligned}$$

$$(U^{(k)} \psi^{(k)}, \psi^{(k)}) = (U^{(k-1)} \psi^{(k)}, \psi^{(k)}),$$

továbbá:

$$(U^{(0)}\psi^{(1)}, \psi^{(1)}) = (P_{[\psi^{(0)}]} \psi^{(1)}, \psi^{(1)}) = |(\psi^{(0)}, \psi^{(1)})|^2 = \left(\cos \frac{\pi}{2k}\right)^2,$$

tehát

$$(U^{(k)} \psi, \psi) \geq \left(\cos \frac{\pi}{2k}\right)^{2k}.$$

Tekintve, hogy $\text{Sp } U^{(k)}$ és $\left(\cos \frac{\pi}{2k}\right)^{2k} \rightarrow 1$, ha $k \rightarrow \infty$, alkalmazhatjuk a II. 11. fejezetben kapott eredményünket: $U^{(k)}$ a $P_{[\psi]}$ -hez tart. Így célunkat elértük.

A következő kérdés, amit meg kell vizsgálnunk az, hogy meddig alkalmazhatjuk a fenomenologikus termodinamika egyes fő eszközeit, az „ideális kísérleteket” a kvantummechanikai rendszereknél: nevezetesen az úgynevezett félig áteresztő falakat.

A fenomenologikus termodinamikában a következő tétel érvényes: ha I és II az S rendszer két különböző állapota, akkor szabad olyan falat feltételezni, amely áteresztő az I, és nem áteresztő a II számára.¹⁹³ Ez, hogy úgy mondjuk, a különbség termodinamikai definíciója, s így annak is definíciója, hogy két rendszer egyenlő egymással. Mennyire engedhető meg ilyen feltételezés a kvantummechanikában?

Először is megmutatjuk, hogy ha $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ ortonormált rendszer, akkor létezik olyan félig áteresztő fal, amely az S rendszert akadálytalanul átengedi, ha az a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotok valamelyikében van, és változtatás nélkül visszaveri, ha az a ψ_1, ψ_2, \dots állapotok valamelyikében van. Másféle állapotban levő rendszer viszont megváltozhat, ha e fallal ütközik.

Feltehető, hogy a $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ rendszer teljes, különben további χ_1, χ_2, \dots segítségével azzá tehető, s ezeket hozzácsaphatjuk a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotokhoz. Választható olyan R operátor, melynek spektruma tisztán diszkrét, a $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ sajátértékei egyszeresek és $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ a megfelelő sajátfüggvények. Legyen $\lambda_n < 0$ és $\mu_n > 0$ minden n-re és legyen \mathfrak{R} az R-hez tartozó mennyiség. A falon most ablakokat készítünk. Az ablakot a következőképpen definiáljuk: gázunk $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_N$ molekuláit (ismét $T > 0$ hőmérsékletű U-gázt vizsgálunk) az ablak megállítja, a dobozt felnyitja s az \mathfrak{R} mennyiséget megméri a dobozban található rendszeren. Ezután a dobozt ismét lezárja és attól függően, hogy \mathfrak{R} mért értéke negatív vagy pozitív, változatlan impulzussal átengedi, vagy visszaveri. Világos, hogy ez a szerkezet eleget tesz a kívánalmainknak. A kérdés csak az, hogy milyen változást okoz a sokaságon az ilyen ütközés és hogy e fal a termodinamika Maxwell-féle démonának milyen közeli rokona.¹⁹⁴

Először is meg kell jegyezni, hogy mivel a mérés (bizonyos körülmények között) az S rendszer állapotát és esetleg az energia várható értékét megváltoztatja, ezt a mechanikai energiakülönbséget a termodinamika első törvénye értelmében a mérés aktusában fedezni vagy abszorbeálni kell (ezt például kinyújtható és összenyomható rugó, vagy más hasonló beszereléssel lehet elérni). Itt tisztán automatikusan

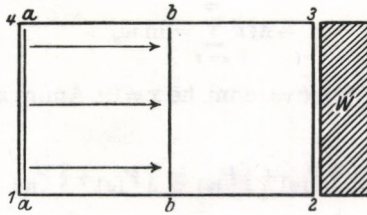
működő mérőberendezésről van szó és mechanikai (nem pedig hő-) energia adódik át, az entrópia biztosan nem változik meg, s most csak ez érdekel bennünket. (Ha S a $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ állapotok valamelyikében van, akkor \mathfrak{R} mérése S -et nem változtatja meg és a mérőberendezésben sem változik meg semmi.)

A következő pont már kétségesebb. Berendezésünk kétségtelenül hasonlít a *Maxwell*-démonra, tehát olyan falra, amely a jobbról jövő molekulákat átengedi, a balról jövőket meg visszaveri. Ha ilyen fal gázzal töltött tartályt választ középen ketté, akkor nemsokára az egész gáz a bal oldalra áramlik, tehát a térfogatot entrópiafogyasztás nélkül megfeleztük. Ez a gáz entrópiájának nem kompenzált növekedését jelentené, tehát a termodinamika második törvénye miatt ilyen fal nem létezhet. A mi félig átteresztő falunk azonban ettől a termodinamikailag elfogadhatatlan faltól lényegesen különbözik, mert a K_1, \dots, K_N molekuláknak csupán a belső tulajdonságaira (tehát a bezárt S_1, \dots, S_N rendszerek állapotaira) van tekintettel, a külsőkre (vagyis például, hogy balról vagy jobbról jöttek-e) pedig nem. Ez azonban a döntő körülmény. E kérdés alapos elemzését SZILÁRD LEÓ kutatásai tették lehetővé, aki tisztázta a félig átteresztő fal és a *Maxwell*-démon természetét, valamint az intelligens lény termodinamikai rendszerekbe történő beleavatkozásának a szerepét. E kérdésbe nem merülhetünk bele mélyebben, az olvasó különben is találhat idevágó anyagot a 194. jegyzet hivatkozásában.

A fenti gondolatmenet azt mutatja, hogy az S rendszer φ és ψ állapota félig átteresztő fallal szétválasztható, ha φ ortogonális ψ -re. Ennek megmutatjuk most a fordítottját is, ha φ nem ortogonális ψ -re, akkor az ilyen félig átteresztő fal feltételezése ellentmond a termodinamika második főtételének. Más szóval, félig átteresztő fallal történő szétválaszthatóságnak $(\varphi, \psi) = 0$ a szükséges és elégséges feltétele, szemben a klasszikus mechanikával, ahol $\varphi \neq \psi$ a feltétel (φ -t és ψ -t írunk a korábbi I és II helyett). Ez a klasszikus termodinamika egy régi paradoxonjára vet fényt. Nevezetesen, a félig átteresztő falakkal dolgozva a folytonosság kényelmetlenül elvész a következő esetben: egymástól tetszőlegesen kevéssé különböző állapotok egymástól teljesen szétválaszthatók, a tökéletesen egyenlőek pedig nem. A mi esetünkben az átmenet már folytonos. Belátjuk ugyanis, hogy százszázalékos szétválasztás csak akkor lehetséges, ha $(\varphi, \psi) = 0$, s növekvő (φ, ψ) -vel a helyzet folyamatosan romlik. Végül, amikor (φ, ψ) eléri a maximumot, vagyis ha $|(\varphi, \psi)| = 1$ (ekkor $\|\varphi\| = \|\psi\| = 1$, így $|(\varphi, \psi)| = 1$ miatt $\varphi = c\psi$ és $|c| = 1$), akkor a φ és a ψ állapotok azonosakká válnak, s a szétválasztás lehetetlen lesz.

E szakasz utolsó eredményére, az U -sokaság entrópiájára e gondolatmenetben szükség lesz. Persze ezt az eredményt saját magának a levezetésekor nem használjuk majd fel.

Tegyük fel hát, hogy van oly félig átteresztő fal, mely φ -t és ψ -t szétválasztja. Be fogjuk bizonyítani, hogy $(\varphi, \psi) = 0$. Tekintsük az $\frac{1}{2}(P_{[\varphi]} + P_{[\psi]})$ -gázt (ebben $N/2$ rendszer a φ , $N/2$ pedig a ψ állapotban van; az operátor spurja 1), és válasszuk meg V -t (tehát \bar{K} térfogatát) és T -t úgy, hogy a gáz ideális legyen. Legyen \bar{K} hosszanti metszete 12341, amint az a 3. ábrán látható. Behelyezzük az egyik végén a félig átteresztő falat, majd eltoljuk a bb középső helyzetbe. A T hőmérsékletű nagy W hőtartállyal összekapcsoljuk a tartály 23 túlsó végét, hogy a gáz hőmérsékletét



3. ábra

rögzítsük. E folyamat során a φ molekulákkal semmi sem történik, a ψ molekulákat azonban a fal **K** jobb felébe tolja át (bb és 23 közé). Az $\frac{1}{2}(P_{[\varphi]} + P_{[\psi]})$ -gáz a $P_{[\varphi]}$ -gáz és a $P_{[\psi]}$ -gáz $1 : 1$ arányú keveréke. Az előzővel semmi sem történik, az utóbbi azonban eredeti térfogatának felére izotermikusan összenyomódik. Az ideális gáz állapot-egyenletéből következik, hogy e folyamatban $\frac{N}{2} \kappa T \ln 2$ nagyságú mechanikai

munkát kell végezni ($N/2$ a $P_{[\psi]}$ -gáz molekuláinak száma, κ a Boltzmann-állandó),¹⁹⁵ és mivel a gáz energiája (az izotermia miatt) nem változik meg,¹⁹⁶ ezt az energiát a W hőtartály nyeli el. A hőtartály entrópiaváltozása tehát $Q/T = N\kappa \frac{1}{2} \ln 2$ (lásd a 186. jegyzetet).

E folyamat végén bb -től balra az eredeti $P_{[\varphi]}$ -gáz fele, vagyis $N/4$ molekula van. A bb -től jobbra viszont az eredeti $P_{[\varphi]}$ -gáz fele, vagyis $N/4$ molekula és az egész $P_{[\psi]}$ -gáz, vagyis $N/2$ molekula; tehát egy $\frac{1}{3} P_{[\varphi]} + \frac{2}{3} P_{[\psi]}$ -gáz $3N/4$ molekulája lesz jelen. E gázokat összenyomjuk, illetőleg kiterjesztjük $V/4$, illetőleg $3V/4$ térfogatra. Ennek során $\frac{N}{4} \kappa T \ln 2$, illetőleg $\frac{3N}{4} \kappa T \ln 2$ nagyságú mechanikai munkát ad le, illetőleg

vesz fel a hőtartályt (lásd a 195. jegyzetet). A hőtartály entrópiánövekedése $N\kappa \frac{1}{4} \ln 2$, illetőleg $-N\kappa \frac{3}{4} \ln \frac{3}{2}$, vagyis összesen

$$N\kappa \left(\frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{4} \ln 2 - \frac{3}{4} \ln \frac{3}{2} \right) = N\kappa \frac{3}{4} \ln \frac{4}{3}$$

Végül is $N/4$ molekulányi $P_{[\varphi]}$ -gáz lesz a $V/4$, $3N/4$ molekulányi $(\frac{1}{3} P_{[\varphi]} + \frac{2}{3} P_{[\psi]})$ gáz lesz a $3V/4$ térfogatban. Eredetileg N molekulányi $(\frac{1}{2} P_{[\varphi]} + P_{[\psi]})$ -gáz volt a V térfogatban, vagy ha tetszik, $N/4$ molekulányi $(\frac{1}{2} P_{[\varphi]} + P_{[\psi]})$ -gáz volt a $V/4$ és $3N/4$ molekulányi ugyanolyan, vagyis $(\frac{1}{2} P_{[\varphi]} + P_{[\psi]})$ -gáz volt a $3V/4$ térfogatban. Az egész folyamat végeredményeként az $N/4$ molekula a $V/4$ térfogatban $(\frac{1}{2} P_{[\varphi]} + \frac{1}{2} P_{[\psi]})$ -gázból átváltozott $P_{[\varphi]}$ gázzá, a $3N/4$ molekula a $3V/4$ térfogatban pedig $(\frac{1}{2} P_{[\varphi]} + \frac{1}{2} P_{[\psi]})$ -gázból átváltozott $(\frac{1}{3} P_{[\varphi]} + \frac{2}{3} P_{[\psi]})$ -gázzá és W entrópiája nagyobb lett $N\kappa \frac{3}{4} \ln \frac{4}{3}$ -dal. Tekintve, hogy a folyamat reverzibilis, a teljes entrópiaváltozásnak el kell tűnnie, tehát a két gáz entrópiaváltozásának W entrópiaváltozását ki kell egyenlítenie. Fel kell tehát kutatnunk a gázok entrópiaváltozását.

Amint azt be fogjuk látni, az M molekulájú U -gáz entrópiája $-M\kappa \text{Sp}(U \ln U)$, ha az ugyanolyan térfogatú és hőmérsékletű $P_{[x]}$ -gáz entrópiáját zérusnak vesszük (lásd korábban). Ha tehát U spektruma tisztán diszkrét, sajátértéke pedig w_1, w_2, \dots akkor ez a következő:

$$-M\kappa \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n,$$

(így $x \ln x$ -et zérussal kell egyenlővé tenni, ha $x = 0$). Amint az könnyen kiszámítható, a

$$P_{[\varphi]}, \frac{1}{2} P_{[\varphi]} + \frac{1}{2} P_{[\psi]} \text{ és } \frac{1}{3} P_{[\varphi]} + \frac{2}{3} P_{[\psi]}$$

sajátértékrendszere rendre

$$1, 0; \frac{1+\alpha}{2}, \frac{1-\alpha}{2}, 0; \frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{6}, \frac{3-\sqrt{1+8\alpha^2}}{6}, 0$$

(ahol $\alpha = |(\varphi, \psi)|$, $0 \leq \alpha \leq 1$), a zérus végtelenszeres, a többi egyszeres sajátérték.¹⁹⁷ Ezért a gáz entrópiája a

$$\begin{aligned} & -\frac{N}{4}\kappa \cdot 0 - \frac{3N}{4}\kappa \left(\frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{6} \ln \frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{6} + \right. \\ & \quad \left. + \frac{3-\sqrt{1+8\alpha^2}}{6} \ln \frac{3-\sqrt{1+8\alpha^2}}{6} \right) + \\ & \quad + N\kappa \cdot \left(\frac{1+\alpha}{2} \ln \frac{1+\alpha}{2} + \frac{1-\alpha}{2} \ln \frac{1-\alpha}{2} \right) \end{aligned}$$

mennyiséggel változik meg. Ehhez W -nek $N\kappa \frac{2}{3} \ln \frac{4}{3}$ entrópiainövekedését hozzáadva zérust kell kapnunk. Az $N\kappa/4$ -gyel osztva azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & -\frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{2} \ln \frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{6} - \frac{3-\sqrt{1+8\alpha^2}}{2} \ln \frac{3-\sqrt{1+8\alpha^2}}{6} + \\ & \quad + 2(1+\alpha) \ln \frac{1+\alpha}{2} + 2(1-\alpha) \ln \frac{1-\alpha}{2} + 3 \ln \frac{4}{3} = 0, \end{aligned}$$

és $0 \leq \alpha \leq 1$.

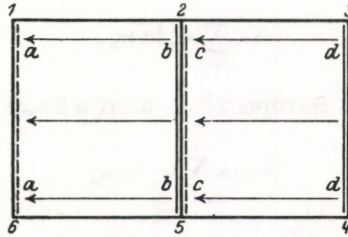
Können belátható, hogy a bal oldal 0-tól $3 \ln \frac{4}{3}$ -ig monoton nő, amint α 0-tól 1-ig növekszik,¹⁹⁸ ezért α szükségképpen zérus ($\alpha \neq 0$ esetén a leírttal ellentétes folyamat csökkentené az entrópiát a második főtétellel ellentétben). Így bebizonyítottuk, hogy $(\varphi, \psi) = 0$.

Eme előkészítés után rátérhetünk a V térfogatú, T hőmérsékletű, N molekulányi U -gáz entrópiájának, pontosabban az ugyanilyen jellemzőjű $P_{[\varphi]}$ -gázhoz képest számított entrópiatöbbletének meghatározására. Korábbi megjegyzéseink és a fent megadott normálás értelmében ez az N egyedi rendszerből álló U -sokaság entrópiája. Legyen $\text{Sp}U = 1$, mint korábban.

Az U -nak w_1, w_2, \dots spektruma, mint tudjuk, tisztán diszkrét, $w_1 \geq 0, w_2 \geq 0, \dots$, $w_1 + w_2 + \dots = 1$. Legyenek $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ a megfelelő sajátfüggvények. Ekkor

$$U = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{[\varphi_n]}$$

(lásd a IV. 3. fejezetet). Következésképpen U -gázunk $w_1 N, w_2 N, \dots$ molekulányi $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$ -gáz keveréke, és ezek térfogata a közös V . Legyen T és V ismét olyan, hogy a gázok ideálisak legyenek és legyen \mathbb{K} négyszögletes keresztmetsetű. Most a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ molekulákat egymástól a következő reverzibilis beavatkozásokkal tojguk szétválasztani (lásd a 4. ábrát). Először is egy ugyanolyan \mathbb{K} (12561) dobozt helyezünk \mathbb{K} (23452) mellé, és a 25 közös falat két egymás melletti fallal



4. ábra

pótoljuk. Ezek közül az egyik (25) legyen rögzített és félig áteresztő: φ_1 számára átlátszó, $\varphi_2, \varphi_3, \dots$ számára nem, a másik (bb) legyen mozgatható, de közönséges, teljesen áthatolhatatlan. 34 közelében még egy dd félig áteresztő falat helyezünk el, ez legyen $\varphi_2, \varphi_3, \dots$ számára átlátszó és φ_1 számára nem. Ezután bb -t és dd -t úgy tojguk el az aa és cc helyzetbe (tehát 16-hoz és 25-höz közel), hogy a köztük levő távolság közben állandó maradjon. Így a $\varphi_2, \varphi_3, \dots$ molekulákkal semmi sem történt, a φ_1 molekulákat viszont a mozgó bb és dd falak közé kényszerítettük. Mivel a falak távolsága állandó (a gáz nyomása ellenében), munkát nem végeztünk és hő sem termelődik. Végül a 25 és cc falat a merev, teljesen áthatolhatatlan új 25 fallal pótoljuk és aa -t kivesszük, így visszaállítottuk a \mathbb{K} és \mathbb{K}' dobozt. A következő változás történt: az összes φ_1 molekula \mathbb{K}' -ben van, tehát ezeket reverzibilisen, munkavégzés, hőtermelés és hőmérséklet-változás nélkül átvittük \mathbb{K} -ból az ugyanolyan méretű \mathbb{K}' dobozba.¹⁹⁹

Ugyanilyen módon leválaszthatjuk a $\varphi_2, \varphi_3, \dots$ molekulákat a \mathbb{K} -val egybeváog $\mathbb{K}'', \mathbb{K}''', \dots$ dobozokba. Így végül $w_1 N, w_2 N, \dots$ molekulányi $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$ -gázhoz jutunk, ezek térfogata a közös V . Ezeket most izotermikusan összenyomjuk rendre a $w_1 V, w_2 V, \dots$ térfogatra. Ehhez rendre $w_1 N \kappa \cdot T \ln w_1, w_2 N \kappa \cdot T \ln w_2, \dots$ hőmennyiség szükséges (ezek mindegyike negatív!), amit egy T hőmérsékletű hőtartályból fedezünk, hogy a folyamat reverzibilis legyen. (Az egyes gázok összenyomásához szükséges munka a fenti értékek mínusz egyszerese.) E folyamatban az entrópiánövekedés tehát

$$\sum_{n=1}^{\infty} w_n N \kappa \cdot \ln w_n.$$

Végül a $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$ -gázokat mind áttranszformáljuk a $P_{[\varphi]}$ -gázba (ez reverzibilis a korábbiak szerint, φ tetszőleges). Ekkor $w_1 V, w_2 V, \dots$ térfogatú, $w_1 N, w_2 N, \dots$ molekulányi $P_{[\varphi]}$ -gázunk van. Ezek mind azonosak, sűrűségük N/V , így reverzibilisen összekeverhetők. Ilyen módon N molekulányi V térfogatú gázt kapunk, hiszen

$$\sum_{n=1}^{\infty} w_n = 1.$$

Következésképpen végrehajtottuk a kívánt reverzibilis folyamatot, az entrópia-növekmény

$$N\kappa \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n,$$

s mivel a végállapotban az entrópia zérus, azért a kezdeti állapotban értéke

$$-N\kappa \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n$$

volt.

Az U sajátfüggvényei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, sajátértékei pedig w_1, w_2, \dots . Az $U \ln U$ sajátfüggvényei ugyanazok, sajátértékei pedig $w_1 \ln w_1, w_2 \ln w_2, \dots$. Következésképpen

$$\text{Sp}(U \ln U) = \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n.$$

Vegyük észre, hogy $w_n \ln w_n \leq 0$, hiszen $0 \leq w_n \leq 1$, és zérus, ha $w_n = 0$ vagy 1 . A $w_n \ln w_n$ -t zérusnak kell venni, ha $w_n = 0$, ez abból következik, hogy az eltűnő w_n esetet a fenti megfontolásainkban egyáltalán nem vettük figyelembe. Folytonossági megfontolással is erre a következtetésre jutunk.

Az N azonos rendszerből álló U sokaság entrópiája tehát $-N\kappa \text{Sp}(U \ln U)$. A $w_n \ln w_n$ -re vonatkozó fenti okoskodás miatt ez sohasem negatív, és akkor zérus, ha w_n zérus vagy 1 . Mivel $\text{Sp} U = 1$, csak egyetlen w_n lehet 1 , a többieknek el kell tűnniük, ekkor azonban $U = P_{[\varphi]}$. Az állapotok entrópiája tehát zérus, a keveréké pedig pozitív.

3. Az egyensúly és a reverzibilitás problémái

Most már be tudjuk bizonyítani az V. 1. fejezet ama állítását, mely szerint a mérés folyamata irreverzibilis. Ha például U állapot, vagyis ha $U = P_{[\varphi]}$, akkor ez a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvénnyel rendelkező R operátorú \mathfrak{R} mennyiség mérésekor az

$$U' = \sum_{n=1}^{\infty} (P_{[\varphi]} \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]} = \sum_{n=1}^{\infty} |(\varphi, \varphi_n)|^2 P_{[\varphi_n]}$$

sokaságba fog átmenni és ha U' nem állapot, az entrópia megnőtt (U entrópiája 0 , U' -é pedig pozitív), tehát a folyamat irreverzibilis. Ha U' is állapot, akkor

valamelyik $P_{[\varphi_n]}$ -nel egyenlő, és mivel a φ_n -ek a sajátfüggvényei, következik, hogy minden $|(\varphi, \varphi_n)|^2 = 0$, kivéve egyet, amely viszont egy. Más szóval φ ortogonális φ_n -re, ha $n \neq \bar{n}$, és $\varphi = c\varphi_{\bar{n}}$, ahol $|c| = 1$, tehát $P_{[\varphi]} = P_{[\varphi_n]}$, $U = U'$. Ily módon az állapoton minden mérés irreverzibilis, kivéve, ha a mért mennyiség értéke az állapotban éles (vagyis sajátérték), ebben az esetben a mérés az állapotot nem változtatja meg. Amint látható, a nem kauzális viselkedés így módon egyértelműen bizonyos termodinamikai folyamatokkal jár együtt.

Most teljes általánosságban vizsgáljuk meg az 1. folyamatot:

$$U \rightarrow U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$$

folyamán az entrópia nő.

Az U entrópiája $-N\kappa \text{Sp}(U \ln U)$. Ha U sajátértékei w_1, w_2, \dots , sajátfüggvényei pedig ψ_1, ψ_2, \dots , akkor

$$-N\kappa \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n = -N\kappa \sum_{n=1}^{\infty} (U\psi_n, \psi_n) \ln (U\psi_n, \psi_n).$$

Az U' sajátértéke $(U\varphi_1, \varphi_1), (U\varphi_2, \varphi_2), \dots$, tehát entrópiája:

$$-N\kappa \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) \ln (U\varphi_n, \varphi_n).$$

Következésképpen U entrópiája U' -énál nagyobb, egyenlő vele, vagy kisebb aszerint, hogy

$$* \quad \sum_{n=1}^{\infty} (U\psi_n, \psi_n) \ln (U\psi_n, \psi_n) \cong \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) \ln (U\varphi_n, \varphi_n).$$

Most megmutatjuk, hogy *-ban mindig \cong érvényes. Eszerint az $U \rightarrow U'$ nem csökkenti az entrópiát. Ez termodinamikai szempontból világos, azonban további céljaink szempontjából fontos, hogy e tényt tisztán matematikailag bizonyítsuk be. Úgy járunk el, hogy U -t és a ψ_1, ψ_2, \dots sajátfüggvényeket rögzítjük és $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ befutja majd az összes teljes ortonormált rendszert.

A folytonosság okából elég olyan $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszerekre korlátozódunk, amelyekben csak véges számú φ_n különbözik a megfelelő ψ_n -től. Legyen például $\varphi_n = \psi_n$, ha $n > M$, ekkor $n < M$ esetén φ_n az olyan ψ_n -ek lineáris kombinációi, amelyekre $n < M$, és fordítva, tehát

$$\psi_m = \sum_{n=1}^{\infty} x_{mn} \varphi_n \quad (m=1, \dots, M),$$

és az M -dimenziós $[x_{mn}]$ mátrix nyilvánvalóan unitér; $(U\varphi_m, \varphi_m) = w_m$, és amint az könnyen kiszámítható,

$$(U\psi_m, \psi_m) = \sum_{n=1}^N w_n |x_{mn}|^2 \quad (m=1, \dots, M),$$

tehát a

$$\sum_{m=1}^M w_m \ln w_m \cong \sum_{m=1}^M \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}|^2 \right) \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}|^2 \right)$$

egyenlőtlenséget kell bebizonyítani. Mivel a jobb oldal folytonos függvénye az M^2 számú korlátos x_{mn} változónak, azért van maximuma, és fel is veszi maximális értékét ($[x_{mn}]$ unitér). Mivel

$$x_{mn} = \begin{cases} 1, & \text{ha } m=n, \\ 0, & \text{ha } m \neq n \end{cases}$$

esetén az egyenlőség érvényes, meg kell mutatnunk, hogy a mondott maximum ennél a x_{mn} -nél van.

Legyen a maximum helye x_{mn}^0 ($m, n=1, \dots, M$). Ha az $[x_{mn}^0]$ mátrixot az

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & \dots & 0 \\ -\beta & \bar{\alpha} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

unitér mátrixszal megszorozzuk, akkor az $[x'_{mn}]$ mátrixot kapjuk, amely ismét unitér, tehát x_{mn} megengedett komplexus. Legyen $\alpha = \sqrt{1 - \varepsilon^2}$, $\beta = \Theta \varepsilon$ (ε valós, $|\Theta| = 1$). Az ε legyen kicsiny és számításainkban csak az 1, ε , ε^2 rendű tagokat őrizzük meg, az ε^3 , ε^4, \dots tagokat elhanyagoljuk. Így $\alpha = 1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2$, és az új $[x'_{mn}]$ mátrixban

$$x'_{1n} \approx (1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2) x_{1n}^0 + \Theta \varepsilon x_{2n}^0,$$

$$x'_{2n} \approx -\Theta \varepsilon x_{1n}^0 + (1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2) x_{2n}^0,$$

$$x'_{mn} \approx x_{mn}^0, \quad (m \geq 3).$$

Így

$$\sum_{n=1}^M w_n |x'_{1n}|^2 \approx \sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2 + \sum_{n=1}^M 2w_n \operatorname{Re} (\Theta x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) \cdot \varepsilon +$$

$$+ \sum_{n=1}^M w_n (-|x_{1n}^0|^2 + |x_{2n}^0|^2) \cdot \varepsilon^2,$$

$$\sum_{n=1}^M w_n |x'_{2n}|^2 \approx \sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2 - \sum_{n=1}^M 2w_n \operatorname{Re} (\Theta x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) \cdot \varepsilon -$$

$$- \sum_{n=1}^M w_n (-|x_{1n}^0|^2 + |x_{2n}^0|^2) \cdot \varepsilon,$$

$$\sum_{n=1}^M w_n |x'_{mn}|^2 = \sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2, \quad (m \geq 3).$$

E kifejezéseket az $f(x) = x \ln x$ függvénybe helyettesítve, figyelembe véve, hogy

$$f'(x) = \ln x + 1, \quad f''(x) = \frac{1}{x},$$

és összeadva a kapott kifejezéseket kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & \sum_{m=1}^M \left(\sum_{n=1}^M w_n |x'_{mn}|^2 \right) \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x'_{mn}|^2 \right) \approx \\ & \approx \sum_{m=1}^M \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2 \right) \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2 \right) + \\ & + \left(\ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2 \right) - \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right) \right) \times \\ & \quad \times \sum_{n=1}^M 2w_n \operatorname{Re} (\Theta \bar{x}_{2n}^0) \cdot \varepsilon + \\ & + \left[- \left(\ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2 \right) - \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right) \right) \times \right. \\ & \quad \times \left(\left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2 \right) - \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right) \right) + \\ & \quad + \frac{1}{2} \frac{1}{\sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2} + \frac{1}{\sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2} \times \\ & \quad \left. \times \left(\sum_{n=1}^M 2w_n \operatorname{Re} (\Theta x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) \right)^2 \right] \cdot \varepsilon^2. \end{aligned}$$

A jobb oldal első tagja akkor a maximális érték, ha ε együtthatója zérus és ε^2 -é pedig nem pozitív. Az előző két tényezőtől áll, az egyik:

$$\ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2 \right) - \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right),$$

és a másik:

$$\sum_{n=1}^M 2w_n \operatorname{Re} (\Theta x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0).$$

Ha az első zérus, akkor ε^2 együtthatójának első tagja zérus (ez soha nem pozitív), tehát a második tagnak — mely nemnegatív — el kell tűnnie ahhoz, hogy az egész együttható ne legyen pozitív. Eszerint

$$\sum 2w_n \operatorname{Re} (\Theta x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) = 0.$$

Az ε együtthatójának második tényezője tehát mindig zérus. Ez így is írható:

$$2 \operatorname{Re} \left(\Theta \sum_{n=1}^M w_n x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0 \right) = 0.$$

Mivel ez Θ megfelelő megválasztása mellett a $\sum_{n=1}^M$ összeg az abszolútértékébe megy át, ennek el kell tűnnie:

$$\sum_{n=1}^M w_n x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0 = 0.$$

Itt 1 és 2 bármely egymástól különböző k -val és j -vel helyettesíthető ($k, j = 1, \dots, M$), így

$$\sum_{n=1}^M w_n x_{kn}^0 \bar{x}_{jn}^0 = 0, \quad \text{ha } k \neq j.$$

Más szóval az $[x_{mn}^0]$ mátrixú unitér koordinátatranszformáció a w_1, \dots, w_n elemű diagonális mátrixot ismét diagonális alakra hozza. A diagonális elemek a mátrix sajátértékei, tehát koordinátatranszformáció során nem változnak meg, legfeljebb permutálódnak. Transzformáció előtt ezek a w_m -ek voltak ($m = 1, \dots, M$), utána pedig a

$$\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2 \quad (m = 1, \dots, M)$$

összegek. Így a

$$\sum_{n=1}^M w_n \ln w_n, \quad \sum_{m=1}^M \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2 \right) \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2 \right)$$

összegek értéke megegyezik. Tehát mindenesetre van maximum az

$$x_{mn} = \begin{cases} 1, & \text{ha } m = n, \\ 0, & \text{ha } m \neq n \end{cases}$$

helyen, ahogy állítottuk.

Határozzuk most meg, hogy mikor érvényes az egyenlőségjel *-ban. Ha ez a helyzet, akkor

$$\sum_{n=1}^{\infty} (U \chi_n, \chi_n) \ln (U \chi_n, \chi_n)$$

a maximális értékét nemcsak a $\chi_m = \Psi_m$ ($m=1, 2, \dots$ ezek U sajátfüggvényei az előzőek szerint) esetében veszi fel, hanem akkor is, ha $\chi_n = \varphi_n$ ($n=1, 2, \dots, \chi_1, \chi_2, \dots$ befutja az összes teljes ortonormált rendszert). Ez akkor is igaz, ha a φ_n -ek közül csupán az első M számú van egymásközt transzformálva, mégpedig természetesen unitér módon (vagyis $\chi_n = \varphi_n$, ha $n > M$). Legyen $\mu_{mn} = (U\varphi_m, \varphi_n)$, ($m, n=1, \dots, M$), legyen a véges (és hermitikus, valamint definit) $[\mu_{mn}]$ mátrix sajátértéke v_1, \dots, v_M és legyen $[\alpha_{mn}]$ az a mátrix, amely $[\mu_{mn}]$ -et diagonális alakra transzformálja ($m, n=1, \dots, M$). Ez $\varphi_1, \dots, \varphi_M$ -et $\omega_1, \dots, \omega_M$ -be viszi át:

$$\varphi_m = \sum_{n=1}^M \alpha_{mn} \omega_n \quad (m=1, \dots, M).$$

Ekkor

$$U\omega_n = v_n \omega_n,$$

tehát

$$(U\omega_n, \omega_n) = \begin{cases} v_n, & \text{ha } m=n, \\ 0, & \text{ha } m \neq n. \end{cases}$$

Ha

$$\xi_m = \sum_{n=1}^M x_{mn} \omega_n$$

($m=1, \dots, M$, legyen $[x_{mn}]$ is unitér), akkor

$$(U\xi_k, \xi_j) = \sum_{n=1}^M v_n x_{kn} \bar{x}_{jn}.$$

A $\varphi_1, \dots, \varphi_M$ -re tett feltevésünk miatt

$$\sum_{m=1}^M \left(\sum_{n=1}^M v_n |x_{mn}|^2 \right) \ln \left(\sum_{n=1}^M v_n |x_{mn}|^2 \right)$$

akkor veszi fel a maximumát, ha $x_{mn} = \alpha_{mn}$. Előző bizonyításunk szerint ebből következik, hogy

$$\sum_{n=1}^M v_n \alpha_{kn} \bar{\alpha}_{jn} = 0,$$

ha $k \neq j$, tehát $(U\varphi_k, \varphi_j) = 0$, ha $k \neq j$, $k, j=1, \dots, M$.

Ennek tetszőleges M esetében igaznak kell lennie, tehát $U\varphi_k$ ortogonális φ_j -re, ha $j \neq k$, vagyis $U\varphi_k = w'_k \varphi_k$ (ahol w'_k állandó). Következésképpen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvénye U -nak, és a megfelelő sajátérték w'_1, w'_2, \dots (tehát w_1, w_2, \dots valamely permutációja). Ekkor azonban

$$U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]} = \sum_{n=1}^{\infty} w'_n P_{[\varphi_n]} = U.$$

Ezek alapján eredményünk a következő:

Az 1. folyamat, vagyis

$$U \rightarrow U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$$

(itt $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ a mért \mathfrak{R} mennyiség R operátorának sajátfüggvénye), az entrópiát sohasem csökkenti. Az entrópia általában nő, hacsak $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ nem sajátfüggvénye U -nak, ekkor $U = U'$.

Ebben az utóbbi esetben U felcserélhető R -rel, s ez elégséges is ahhoz, hogy U egyenlő legyen U' -vel (hiszen ez a közös $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvényrendszer létezésével egyenértékű).

Az 1. folyamat tehát mindig irreverzibilis, ha egyáltalán változást okoz.

A reverzibilitás kérdését az 1. és a 2. folyamatra vonatkozóan az V. 2. fejezetben elmondott program második pontjának értelmében a fenomenológiai termodinamikától függetlenül kell vizsgálni. Azt a matematikai módszert, mellyel ez végrehajtható, már ismerjük: amennyiben a termodinamika második főtétele érvényes, az entrópia $-N\kappa \text{Sp}(U \ln U)$, és ez sem az 1., sem a 2. folyamatban nem csökken. Ezek szerint $-N\kappa \text{Sp}(U \ln U)$ matematikai mennyiségnek tekintendő attól függetlenül, hogy értéke éppen az entrópia, s meg kell nézni, hogy 1. és 2. során mi történik e mennyiséggel.²⁰⁰

A 2.-ben U -ból

$$U_t = e^{-\frac{2\pi i}{h} tH} U e^{\frac{2\pi i}{h} tH}$$

lesz, vagyis ha az

$$e^{-\frac{2\pi i}{h} tH}$$

unitér operátort A -val jelöljük, akkor $U \rightarrow U_t = A U A^{-1}$. Az A unitér volta folytán $f \rightarrow A f$ a Hilbert-tér izomort leképezése önmagára, ez a P operátort APA^{-1} -be viszi át. Tehát bármely F -re $F(APA^{-1}) = AF(P)A^{-1}$. Következésképpen $U_t \ln U_t = AU \ln UA^{-1}$. Így $\text{Sp}(U_t \ln U_t) = \text{Sp}(U \ln U)$, vagyis $-N\kappa \text{Sp}(U \ln U)$ a 2. folyamán nem változik meg. Azt már voltaképpen a termodinamika második főtételeire történő hivatkozás nélkül beláttuk, hogy 1. során mi történik. Ha U megváltozik (tehát $U' \neq U$), akkor $-N\kappa \text{Sp}(U \ln U)$ nő, míg ha U nem változik meg (tehát $U' = U$, vagyis, ha ψ_1, ψ_2, \dots sajátfüggvénye U -nak, vagy másként, ha U felcserélhető R -rel), akkor változatlan marad. Több (tetszőleges számú és sorrendű) 1. és 2. folyamatból álló beavatkozás során $-N\kappa \text{Sp}(U \ln U)$ nem változik meg, ha valamennyi 1. típusú folyamat hatástalan (vagyis nem okoz változást), minden más esetben azonban növekszik. Ily módon csak az 1. és 2. beavatkozást tekintve, minden 1. folyamat, amely egyáltalán változást okoz, irreverzibilis.

Érdeemes megjegyezni, hogy van más, $-\text{Sp}(U \ln U)$ -nál egyszerűbb kifejezés is, amely 1. során nem növekszik és 2.-ben állandó marad. Ilyen például U legnagyobb sajátértéke. Valóban; 2. során ez invariáns, hiszen U valamennyi sajátértéke az; az 1. során az U w_1, w_2, \dots sajátértékei U' sajátértékeibe mennek át, ezek a következők:

$$\sum_{n=1}^{\infty} w_n |x_{1n}|^2, \quad \sum_{n=1}^{\infty} w_n |x_{2n}|^2, \dots$$

(lásd e szakasz korábbi megmondolásait), s az $\{x_{mn}\}$ mátrix unitér volta, tehát a

$$\sum_{n=1}^{\infty} |x_{1n}|^2 = 1, \quad \sum_{n=1}^{\infty} |x_{2n}|^2 = 1, \dots$$

miatt e számok a legnagyobb w_n -nél nem nagyobbak. (Létezik legnagyobb w_n , hiszen $w_n \geq 0$, minden n -re és minthogy

$$\sum_{n=1}^{\infty} w_n = 1,$$

$w_n \rightarrow 0$, ha $n \rightarrow \infty$.) Ám meg lehet úgy változtatni U -t, hogy

$$-\text{Sp}(U \ln U) = - \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n$$

változtatlan marad, azonban a legnagyobb w_n csökken, tehát látható, hogy ezek olyan folyamatok, amelyek a fenomenológiai termodinamika szerint lehetségesek, tehát a mi gázfolyamatainkkal végrehajthatók, azonban egyedül **1.** és **2.** egymásutáni alkalmazásával nem állíthatók elő. Ez azt bizonyítja, hogy a gázfolyamatokat szükséges volt bevezetni.

A $-\text{Sp}(U \ln U)$ helyett megfelelő $F(x)$ függvényre $\text{Sp}(F(U))$ is vizsgálható. Az, hogy ez az **1.** folyamán $U \neq U'$ esetén nő ($U = U'$ esetén csakúgy, mint **2.** folyamán, természetesen invariáns), ugyanúgy bebizonyítható, mint az $F(x) = -x \ln x$ esetben, ha ez utóbbi függvénynek ama tulajdonságaival, melyeket korábban felhasználtunk, $F(x)$ rendelkezik. Ezek a következők: $F''(x) < 0$ és $F'(x)$ monoton csökken. Az utóbbi az előző következménye. Ily módon a nem termodinamikai irreverzibilitásra vonatkozó megmondolásainkban minden olyan $\text{Sp}(F(U))$ felhasználható, amelyekre $F(x)$ felülről konvex, vagyis ha $F''(x) < 0$ (a $0 \leq x \leq 1$ esetén, hiszen U minden sajátértéke ebbe az intervallumba esik).

Végül meg kellene még mutatni, hogy az U - és a V -sokaság mondjuk $\alpha : \beta$ arányú ($\alpha > 0$, $\beta > 0$, $\alpha + \beta = 1$) összekeverése sem csökkenti az entrópiát, tehát

$$\begin{aligned} & -\text{Sp}(\alpha U + \beta V) \ln(\alpha U + \beta V) \geq \\ & \geq -\alpha \text{Sp}(U \ln U) - \beta \text{Sp}(V \ln V). \end{aligned}$$

Ez $-x \ln x$ helyébe tetszőleges konvex $F(x)$ -et írva is igaz marad. A bizonyítást az olvasóra bizzuk.

Most a stacionárius egyensúlyi szuperpozíciót, vagyis a maximális entrópiájú keveréket vizsgáljuk meg adott energia mellett. Az utóbbit természetesen úgy kell érteni, hogy az energia várható értékét előírtuk. A statisztikus sokaságok termodinamikai vizsgálatára szolgáló és a 184. jegyzetben jelzett módszer szempontjából csak ez az értelmezés van megengedve. Következésképpen csak

olyan keveréket engedünk meg, amelyekre $\text{Sp } U = 1$ és $\text{Sp } (UH) = E$, ahol H az energiaoperátor és E az energia előírt várható értéke. Ilyen mellékfeltételekkel kell $-N\kappa \text{Sp } (U \ln U)$ -t maximalizálni. Az egyszerűség kedvéért azt is feltesszük, hogy H spektruma tisztán diszkrét, sajátértékei legyenek W_1, W_2, \dots sajátfüggvényei pedig $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (megengedünk többszörös sajátértékeket is).

Legyen \mathfrak{R} oly mennyiség, melynek R operátora ugyanazon $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvénnyel bír, mint H , sajátértékei azonban legyenek egyszerűsek. Az \mathfrak{R} mérése U -t 2 . miatt az

$$U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$$

operátorba viszi át, így $-N\kappa \text{Sp } (U \ln U)$ nő, ha $U \neq U'$. A $\text{Sp } U, \text{Sp } (UH)$ nem változik meg, az utóbbi azért nem, mert a φ_n -ek H sajátfüggvényei, ezért $(H\varphi_m, \varphi_n)$ zérus, ha $m \neq n$, vagyis

$$\begin{aligned} \text{Sp } (U'H) &= \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) \text{Sp } (P_{[\varphi_n]}H) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n)(H\varphi_n, \varphi_n) = \\ &= \sum_{m,n=1}^{\infty} (U\varphi_m, \varphi_n)(H\varphi_n, \varphi_m) = \text{Sp } (UH). \end{aligned}$$

Ennek R és H felcserélhetősége miatt is igaznak kell lennie (\mathfrak{R} és az energia egyszerre mérhető). Következésképpen a maximumot elegendő az U' , vagyis a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvényű statisztikus operátorokra korlátozódva keresni. Így

$$U = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{[\varphi_n]},$$

s mivel $U, UH, U \ln U$ közös sajátfüggvényei a φ_n -ek, a sajátértékek pedig rendre $w_n, W_n w_n, w_n \ln w_n$, elegendő a

$$-N\kappa \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n$$

kifejezést maximalizálni a

$$\sum_{n=1}^{\infty} w_n = 1, \quad \sum_{n=1}^{\infty} W_n w_n = E$$

mellékfeltételek figyelembevételével. Ez azonban ugyanaz a probléma, mint ami a gázelmélet megfelelő egyensúlyi feladatánál adódik,²⁰¹ s a megoldása is ugyanúgy történik. A szélsőérték-számítás jól ismert szabályai szerint a maximalizáló w_1, w_2, \dots rendszernek a

$$\frac{\partial}{\partial w_n} \left(\sum_{m=1}^{\infty} w_m \ln w_m \right) + \alpha \frac{\partial}{\partial w_n} \left(\sum_{m=1}^{\infty} w_m \right) + \beta \frac{\partial}{\partial w_n} \left(\sum_{m=1}^{\infty} W_m w_m \right) = 0$$

egyenletet kell kielégítenie, ahol α és β megfelelő állandó és $n = 1, 2, \dots$. Vagyis

$$(\ln w_n + 1) + \alpha + \beta W_n = 0,$$

$$w_n = e^{-1 - \alpha - \beta W_n} = a e^{-\beta W_n},$$

s itt α helyett az $a = e^{-1 - \alpha}$ állandót vezettük be. Minthogy

$$\sum_{n=1}^{\infty} W_n = 1,$$

$$a = \frac{1}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta W_n}},$$

s így

$$W_n = \frac{e^{-\beta W_n}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta W_n}}.$$

Viszont

$$\sum_{n=1}^{\infty} W_n w_n = E$$

folytán

$$\frac{\sum_{n=1}^{\infty} W_n e^{-\beta W_n}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta W_n}} = E,$$

ami β meghatározására szolgál. Ha — amint az szokásos — bevezetjük a

$$z(\beta) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta W_n} = \text{Sp}(e^{-\beta H})$$

„particiós függvény” (lásd a 183. és a 184. jegyzetet), akkor

$$z'(\beta) = - \sum_{n=1}^{\infty} W_n e^{-\beta W_n} = - \text{Sp}(H e^{-\beta H}),$$

s így a β -ra vonatkozó feltétel

$$-\frac{z'(\beta)}{z(\beta)} = E.$$

(Itt feltételeztük, hogy

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta W_n}, \quad \sum_{n=1}^{\infty} W_n e^{-\beta W_n}$$

minden β -ra konvergens, vagyis hogy $n \rightarrow \infty$ esetén W_n elég gyorsan tart végtelenhez. Például $W_n / \ln n \rightarrow \infty$ már elegendő.) Így U -ra a következő kifejezést kapjuk:

$$U = \sum_{n=1}^{\infty} a e^{-\beta W_n} P_{[\varphi_n]} = a e^{-\beta H} = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Sp}(e^{-\beta H})} = \frac{e^{-\beta H}}{z(\beta)}.$$

Az U egyensúlyi tulajdonságait (melyeket E vagy β értékei jellemeznek, amelyek tehát egy paramétértől függenek, amint annak lennie is kell) a gázelméletben szokásos módszerrel határozhatjuk meg.

Sokaságunk entrópiája a következő:

$$\begin{aligned} S &= -N\kappa \text{Sp}(U \ln U) = -N\kappa \text{Sp}\left(\frac{e^{-\beta H}}{z(\beta)} \ln \frac{e^{-\beta H}}{z(\beta)}\right) = \\ &= -\frac{N\kappa}{z(\beta)} \text{Sp}(e^{-\beta H}(-\beta H - \ln z(\beta))) = \\ &= \frac{\beta N\kappa}{z(\beta)} \text{Sp}(He^{-\beta H}) + \frac{\ln z(\beta)N\kappa}{z(\beta)} \text{Sp}(e^{-\beta H}) = \\ &= N\kappa \left[-\frac{\beta z'(\beta)}{z(\beta)} + \ln z(\beta) \right], \end{aligned}$$

a teljes energia pedig

$$NE = -N \frac{z'(\beta)}{z(\beta)}$$

(ezt és nem E -t magát kell S -sel kapcsolatban vizsgálni). Az U , S , NE tehát β -val van kifejezve. Az utolsó összefüggés invertálása helyett kényelmesebb az egyensúlyi keverék T hőmérsékletét meghatározni és mindent erre visszavezetni. Ha egyensúlyi keverékünket T' hőmérsékletű hőtartállyal kapcsoljuk össze, akkor a hőtartály NdE energiát fog a keveréknek átadni. A termodinamika két főtétele értelmében a teljes energia ennek során nem változik meg és az entrópia nem csökken. Következésképpen, ha a hőtartály NdE energiát veszít, akkor entrópiánövekedése $-NdE/T'$, s egyidejűleg fenn kell álljon:

$$dS - \frac{NdE}{T'} = \left(\frac{dS}{NdE} - \frac{1}{T'} \right) NdE \geq 0.$$

Másrészt $NdE \geq 0$ aszerint, hogy $T' \geq T$, mert a hidegebb test a melegebbtől vesz át energiát. Így $T' \geq T$ következtében

$$\frac{dS}{NdE} - \frac{1}{T'} \geq 0,$$

vagyis

$$T' \stackrel{N}{=} \frac{NdE}{dS} = \frac{N \frac{dE}{d\beta}}{\frac{dS}{d\beta}}$$

Ily módon

$$\begin{aligned} T &= \frac{N \frac{dE}{d\beta}}{\frac{dS}{d\beta}} = - \frac{1}{\kappa} \frac{\left(\frac{z'(\beta)}{z(\beta)}\right)'}{\left(\ln z(\beta) - \beta \frac{z'(\beta)}{z(\beta)}\right)'} = \\ &= - \frac{1}{\kappa} \frac{\left(\frac{z'(\beta)}{z(\beta)}\right)'}{-\beta \left(\frac{z'(\beta)}{z(\beta)}\right)'} = \frac{1}{\kappa\beta}, \end{aligned}$$

tehát

$$\beta = \frac{1}{kT}.$$

Így U , S és NE most mind a hőmérséklet függvényében vannak kifejezve.

Az entrópiára és az egyensúlyi sokaságra kapott fenti kifejezés szembeszökően hasonlít a klasszikus termodinamikai elmélet megfelelő eredményeire. Az entrópia $-N\kappa \text{Sp}(U \ln U)$. Az

$$U = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{[\varphi_n]}$$

a $P_{[\varphi_1]}$, $P_{[\varphi_2]}$, ... sokaságok w_1, w_2, \dots relatív súllyal vett keveréke, vagyis Nw_1 számú φ_1 , Nw_2 számú φ_2, \dots rendszerből áll. Az ilyen sokaság Boltzmann-féle entrópiája az $N!/(Nw_1)!(Nw_2)! \dots$ termodinamikai valószínűség segítségével kapható meg és nem egyéb, mint e valószínűség logaritmusának κ -szorosa. Mivel N nagy, a faktoriálisok az

$$x! \approx \sqrt{2\pi x} e^{-x} x^x$$

Stirling-formulával helyettesíthetők, s így $-\kappa \ln(N!/(Nw_1)!(Nw_2)! \dots)$ lényegében a

$$-N\kappa \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n$$

kifejezéssel lesz egyenlő, s ez éppen $-N\kappa \text{Sp}(U \ln U)$.

Továbbá, az egyensúlyi sokaságra

$$U = e^{-\frac{H}{kT}}$$

(az $1/z(\beta)$ normálási tényezőt elhagytuk), s ez a

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{W_n}{kT}} P_{[\varphi_n]}$$

operátorral egyenlő. A sokaság tehát a $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$ állapotok, vagyis a W_1, W_2, \dots energiájú stacionárius állapotoknak az

$$e^{-\frac{W_1}{kT}}, e^{-\frac{W_2}{kT}}, \dots$$

megfelelő (relatív) súlyokkal vett keveréke. Ha valamelyik energia többszörös, mondjuk $W_{n_1} = \dots = W_{n_2} = W$, akkor $P_{[\varphi_{n_1}]} + \dots + P_{[\varphi_{n_2}]}$ az egyensúlyi sokaságban az

$$e^{-\frac{W}{kT}}$$

súllyal fog szerepelni, vagyis a helyesen normált

$$\frac{1}{v} (P_{[\varphi_{n_1}]} + \dots + P_{[\varphi_{n_2}]})$$

(lásd a IV. 3. fejezet elejét) a

$$v e^{-\frac{W}{kT}}$$

súllyal fog szerepelni. Ám a klasszikus „kanonikus” sokaság éppen ez BOLTZMANN tétele²⁰¹ miatt (eltekintve a specifikus kvantummechanikai

$$\frac{1}{v} (P_{[\varphi_{n_1}]} + \dots + P_{[\varphi_{n_2}]})$$

kifejezéstől).

Ha $T \rightarrow 0$, akkor az

$$e^{-\frac{W_n}{kT}}$$

súlyok zérushoz tartanak, s így U a

$$\sum_{n=1}^{\infty} P_{[\varphi_n]} = 1$$

kifejezésbe megy át. Az $U = 1$ az abszolút egyensúlyi sokaság, ha nincs energiakorlátozás; ezt már a IV. 3. fejezetben megkaptuk. Látható, hogy a kvantumpályák *a priori* egyforma valószínűsége (ez a nem degeneráltakra vonatkozik, általában az a

priori súly a sajátértékek multiplicitása, lásd előbb) az elméletből automatikusan adódik.

Még azt kell megnéznünk, hogy az adott energiájú U egyensúlyi sokaságról nem termodinamikai alapon, vagyis csupán U stacionárius voltát figyelembe véve (természetesen a 2. folyamat időben a sokaságot nem fogja megváltoztatni) mit lehet mondani. Az U változatlan marad az olyan mérés során, amely nem befolyásolja az energiát (vagyis olyan mennyiség mérésekor a 1. folyamatban, amely H -val együtt figyelhető meg, tehát R operátora H -val felcserélhető, azaz $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvényeik megegyeznek).

A

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{2\pi i}{h} (UH - HU)$$

differenciálegyenlet miatt az előbbi annyit tesz, hogy H felcserélhető U -val, az utóbbi pedig annyit, hogy ha $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ a H teljes sajátfüggvény-rendszere gyanánt használható, akkor $U = U'$, más szóval ezek U -nak is sajátfüggvényei. A H megfelelő sajátértéke legyen W_1, W_2, \dots , az U -é pedig w_1, w_2, \dots . Ha $W_j = W_k$, akkor H szempontjából φ_j és φ_k a

$$\frac{\varphi_j + \varphi_k}{\sqrt{2}}, \quad \frac{\varphi_j - \varphi_k}{\sqrt{2}}$$

függvényekkel helyettesíthető, tehát ezek U -nak is sajátfüggvényei, amelyből következik, hogy $W_j = W_k$. Így alkotható olyan $F(\kappa)$ függvény, amelyre $F(W_n) = w_n$ ($n = 1, 2, \dots$), azaz $F(H) = U$. Világos, hogy ez elégséges és hogy ennek következtében H felcserélhető U -val.

Az eredményünk tehát, hogy $U = F(H)$, az $F(x)$ azonban nem határozható meg

$$\left(\text{mint tudjuk} \quad F(x) = \frac{1}{z(\beta)} e^{-\beta x}, \quad \beta = \frac{1}{kT} \right).$$

A

$$\text{Sp } U = 1, \quad \text{Sp } (UH) = E$$

egyenletek következtében

$$\sum_{n=1}^{\infty} F(W_n) = 1, \quad \sum_{n=1}^{\infty} W_n F(W_n) = E,$$

ezzel azonban az e módszer nyújtotta lehetőségeket kimerítettük.

4. A makroszkópikus mérés

Noha entrópiakifejezésünk a klasszikus entrópiával teljesen analóg, mégis meglepő, hogy a rendszer normális időbeli fejlődése folyamán változatlan marad (2. folyamat) és csak a mérések során nő (1. folyamat). A klasszikus elméletben (itt a mérés általában nem játszik szerepet) még a közönséges mechanikai, időbeli fejlődés alatt is általában növekszik. Tisztáznunk kell ezt a látszólag paradox helyzetet.

A szokásos klasszikus termodinamikai okoskodás a következő: Tekintsük a V térfogatú tartályt, melynek ($V/2$ térfogatú fallal elválasztott) jobb felében M molekulányi, T hőmérsékletű (s az egyszerűség kedvéért ideális) gáz van. Ha e gázt izotermikusan és reverzibilisen a gáz nyomásának munkáját felhasználva a válaszfal elmozdításával az egész térfogatra hagyjuk kiterjedni (a gáz hőmérsékletét T hőmérsékletű nagy hőtartállyal tartjuk állandó szinten), akkor az entrópiacsökkenés kint (a hőtartályban) $M\kappa \ln 2$ (lásd a 195. jegyzetet), tehát a gáz entrópiája ugyanennyivel megnő. Másrészt, ha a válaszfalat eltávolítjuk, akkor a gáz átdiffundál az üres bal oldalra, a térfogat megnő V -re, vagyis az entrópiánövekedés $M\kappa \ln 2$ anélkül, hogy ezt most entrópiacsökkenés ellensúlyozná. E folyamat tehát irreverzibilis, az entrópia a rendszer időbeli mechanikai fejlődése (nevezetesen a diffúzió) során megnőtt. Miért nem ad a mi elméletünk valami ehhez hasonlót?

A helyzet egyszerűen az $M = 1$ esetben tisztázható. A termodinamika az ilyen egy molekulányi gázra is érvényes, és az is igaz, hogy ennek entrópiánövekedése $\kappa \ln 2$, ha a térfogata megkettőződik. E növekmény azonban csak addig $\kappa \ln 2$, ha a molekuláról nem tudunk többet, csak annyit, hogy a $V/2$, illetőleg a V térfogatban található meg. Ha például a molekula a V térfogatban van, de azt is tudjuk, hogy a tartály jobb vagy bal felében, esetleg a közepén tartózkodik, akkor elég a válaszfalat betenni középre és megengedni, hogy ezt a molekula (izotermikusan és reverzibilisen) a tartály bal vagy jobb végére tolja el. Ebben az esetben $\kappa T \ln 2$ nagyságú mechanikai munkavégzés történik, s ezt a hőtartály fedezi. Így a folyamat végén a molekula ismét a V térfogatban van, azonban már nem ismeretes, hogy a tartály bal vagy jobb felében, vagy esetleg középen tartózkodik-e. Más szóval ismereteinket $\kappa \ln 2$ nagyságú entrópiacsökkenésért becséréltük.²⁰² Úgy is mondhatjuk, hogy az entrópia ugyanakkora a V térfogatban, mint a $V/2$ térfogatban, ha az első esetben tudjuk, hogy a molekula a tartály melyik felében található. Ha tehát ismernénk a molekula valamennyi jellemzőjét (helyét és impulzusát) a diffúzió előtt, akkor a diffúzió után minden pillanatban ki tudnánk számítani, hogy a bal vagy a jobb oldalon tartózkodik-e, s így az entrópia nem növekednék. Ha azonban mindössze annyi makroszkópikus információnk van, hogy a térfogat kezdetben $V/2$ volt, akkor az entrópia a diffúzió során megnő.

Az olyan klasszikus megfigyelő számára, aki minden koordinátát és impulzust ismer, az entrópia állandó, sőt mi több, zérus, hiszen a Boltzmann-féle termodinamikai valószínűség 1 (lásd a 201. jegyzet hivatkozását). Ugyanez a helyzet elméletünkben az állapotok esetén, tehát ha $U = P_{[\varphi]}$, hiszen ez felel meg annak, hogy a megfigyelő ismeretei a rendszerre vonatkozóan a lehető legrészletesebbek.

Az entrópia időbeli változásai tehát azzal kapcsolatosak, hogy a megfigyelő nem tud mindent, nem mérhet meg mindent, ami elvileg megmérhető. Érzékei csak arra alkalmasak, hogy az úgynevezett makroszkopikus mennyiségeket észlelje. Az előbb említett látszólagos ellentmondás e tisztázása azonban arra kötelez bennünket, hogy megvizsgáljuk a klasszikus makroszkopikus entrópia pontos kvantummechanikai mását, vagyis az olyan megfigyelő által észlelt entrópiát, aki nem képes minden mennyiséget megmérni, csak néhány specifikusat. Ezek a makroszkopikus mennyiségek, s esetenként még ezek is csak korlátos pontossággal mérhetőek.

A III. 3. fejezetben megtanultuk, hogy minden korlátos pontosságú mérés olyan mennyiségek abszolút pontos mérésével helyettesíthető, amely az előbbieket függvénye, s amelyek spektruma diszkrét. Ha \mathfrak{R} ilyen mennyiség, s operátora R , és ha $\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots$ az egymástól különböző sajátértékek, akkor \mathfrak{R} mérése a következő kérdésekre adott válaszokkal egyenértékű: „igaz-e, hogy $\mathfrak{R} = \lambda^{(1)}$ ”, „igaz-e, hogy $\mathfrak{R} = \lambda^{(2)}$ ”, ... Valóban, közvetlenül is látható, hogy ha a korlátolt pontossággal mérhető S operátorú \mathfrak{S} mennyiségről meg akarjuk állapítani, hogy értéke melyik $c_{n-1} < \lambda \leq c_n$ intervallumba esik ($\dots c_{-2} < c_{-1} < c_0 < c_1 < c_2 < \dots$), akkor e mérés a következő kérdésekre adott válaszokkal egyenértékű „ \mathfrak{S} értéke a $c_{n-1} < \lambda \leq c_n$ intervallumba esik-e?”, $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Az ilyen kérdéseknek a III. 5. fejezet alapján olyan E projektorok felelnek meg, amelyeknek az \mathfrak{C} mennyiségeket (értéke 0 vagy 1) kell voltaképpen megmérni. Példáinkban az \mathfrak{C} -k olyan $F_n(\mathfrak{R})$ függvények ($n=1, 2, \dots$), melyekre

$$F_n(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \lambda = \lambda^{(n)}, \\ 0 & \text{egyébként,} \end{cases}$$

illetőleg olyan $G_n(\mathfrak{S})$ függvények ($n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$), melyekre

$$G_n(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{ha } c_{n-1} < \lambda \leq c_n, \\ 0 & \text{egyébként,} \end{cases}$$

és a megfelelő E -k az $F_n(R)$ -ek, illetőleg a $G(S)$ -ek. Ily módon a makroszkopikusan mérhető \mathfrak{S} mennyiségek és ezek elérhető (makroszkopikus) mérési pontosságának megadása egyenértékű az \mathfrak{C} kérdések feltevésével — ezekre a választ makroszkopikus mérések szolgáltatják — vagy az E projektorok felsorolásával. Tehát a makroszkopikus megfigyelő jellemzésének tekinthető az E -k megadása. (A megfigyelőt klasszikusan jellemezhetjük azzal, hogy azt állítjuk, hogy a gáz térfogatának minden köbcentiméterében a hőmérsékletet és a nyomást képes megmérni).²⁰³

A makroszkopikus méréseknél alapvető, hogy minden, ami mérhető, egyúttal egyszerre is mérhető. Tehát, ha a kérdésekre külön-külön válasz adható, akkor egyszerre is válasz adható az összesre, vagyis az E -k felcserélhetőek. Az, hogy a kvantummechanikai mennyiségek egyidejűleg nem mérhetőek, ellentmondás érzését keltheti. Ám ennek az az oka, hogy e fogalom a makroszkopikus megfigyelési módszerrel forrott össze. E pontnak alapvető jelentősége van, ezért részletesebben megvizsgáljuk.

Lássuk azt a módszert, melynek segítségével két egyidejűleg nem mérhető mennyiség (mondjuk a q koordináta és a p impulzus, lásd a III. 4. fejezetet) egyszerre mérhető korlátos pontossággal. Legyen ε és η a megfelelő közepes hiba (a határozatlansági összefüggés miatt $\varepsilon\eta \sim h$). A III. 4. fejezetben mondottak szerint ilyen pontosság mellett az egyidejű mérés valóban lehetséges, a q (hely-) koordináta mérését nem túl rövid hullámhosszúságú fényvel, a p impulzust pedig nem túl hosszú fényhullám-vonulattal mérhetjük meg. A megfelelő berendezésben maga a mérés két fénykvantum valamilyen — mondjuk fényképezéssel történő — megfigyelését jelenti. Az egyik (a q mérésénél) a Compton-effektus során szórt fénykvantum, a másik (a p Doppler-effektussal történő mérésénél) visszaverődik, megváltozik a rezgésszáma, majd e rezgésszám meghatározásakor valamilyen optikai berendezésben (ez lehet prizma vagy diffrakciós rács) eltérítést szenved. A kísérlet végén két fénykvantumunk, illetőleg két fényképfelvételünk van, és a fénykvantumok irányából, vagyis a lemezekben a megfeketedés helyéből kell kiszámítanunk q -t és p -t. Azt azonban hangsúlyoznunk kell, hogy semmi sem akadályozza meg a két irány vagy megfeketedés helyének — tetszőleges pontosságú — meghatározását, mert ezek nyilvánvalóan egyszerre mérhető mennyiségek (különböző objektumok impulzusai, illetőleg koordinátái). Itt azonban a túlzott pontosság nem nagyon szolgál q és p mérésének javára. Ahogy azt a III. 4. fejezetben megmutattuk, e mennyiségek kapcsolata q -val és p -vel olyan, hogy ez utóbbiak ε illetőleg η bizonytalansága együtt nem csökkenthető (még akkor sem, ha e mennyiségeket pontosabban mérjük), és nem lehet olyan berendezést készíteni, hogy $\varepsilon\eta \ll h$ teljesüljön.

Így, ha bevezetjük a két irányt vagy magát a két megfeketedés helyét, mint fizikai mennyiséget (legyen ezek operátora Q' , P'), akkor látható, hogy Q' felcserélhető P' -vel, de a q -hoz és a p -hez tartozó Q , illetve P operátor ezekkel ε -nál, illetve η -nál pontosabban nem fejezhető ki. Legyen a Q' -höz és P' -höz tartozó mennyiség q' , illetve p' . Az a felfogás, hogy a makroszkopikusan mérhető mennyiség nem maga q és p , hanem q' és p' , nagyon kézenfekvő (hiszen valójában q' -t és p' -t mérjük meg) és összhangban van azzal az alapfeltevésünkkel, hogy a makroszkopikusan megfigyelhető mennyiségek egyszerre mérhetőek.

Ésszerű eme eredményünknek általános jelentőséget tulajdonítani és úgy tekinteni, mint ami a makroszkopikus megfigyelési módszer egy jellegzetességét fedi fel. Eszerint az összes lehetséges A , B , C , ... operátort — ezek általában nem cserélhetőek fel egymással — olyan A' , B' , C' , ... operátorral helyettesítjük (az előbbieket bizonyos közelítéssel az utóbbiak függvényei), amelyek már felcserélhetőek egymással. E függvényeket magukat is A' -vel, B' -vel, C' -vel, ... jelölhetjük, s így mondhatjuk, hogy A' , B' , C' , ... nem egyéb, mint A , B , C , ... közelítése, s e közelítések egymással felcserélhetőek. Ha az ε_A , ε_B , ε_C , ... számok rendre $A' - A$, $B' - B$, $C' - C$, ... operátorok nagyságát mérik, akkor látható, hogy $\varepsilon_A \varepsilon_B$ az $AB - BA$ nagyságrendjébe esik (tehát általában nem zérus), s így megkapjuk a lehetséges közelítések korlátait. Természetesen tanácsos az A , B , C , ... felsoroláskor olyan operátorokra korlátozódni, amelyek fizikai mennyiségei a makroszkopikus megfigyelések számára hozzáférhetetlenek, legalábbis ésszerű közelítésben.

E kvalitatív fejlemények csupán üres programot jelentenek mindaddig, amíg meg nem mutatjuk, hogy a szükséges eszközök matematikai szempontból kezelhetők. Ezért a Q , P jellemző esetre matematikai szempontból megvizsgáljuk Q' , P' létezésének kérdését. Legyen tehát ε és η két olyan pozitív szám, melyre $\varepsilon\eta = \frac{h}{\pi}$.

Olyan egymással felcserélhető Q' -t és P' -t keresünk, melyre $Q' - Q$ és $P' - P$ nagyságrendje (később pontosabban meghatározandó értelemben) ε , illetőleg η .

Abszolút pontosan mérhető q' -t és p' -t tekintünk. Tehát Q' és P' spektruma tisztán diszkrét és közös, teljes ortonormált $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvényrendszerük van, hiszen felcserélhetők egymással (lásd a II. 10. fejezetet). Legyen Q' -nek és P' -nek sajátértéke a_1, a_2, \dots , illetve b_1, b_2, \dots . Ekkor

$$Q' = \sum_{n=1}^{\infty} a_n P_{[\varphi_n]}, \quad P' = \sum_{n=1}^{\infty} b_n P_{[\varphi_n]}.$$

Legyen a mérőberendezés olyan, hogy a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotok egyikét hozza létre, azaz mérjük meg olyan \mathfrak{M} mennyiséget, amelynek R operátora a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvénnyel és a megfelelő egyszeres c_1, c_2, \dots sajátértékkel rendelkezik. Ekkor Q' és P' az R függvénye. Nyilvánvaló, hogy a következőket jelenti az, hogy e mérés Q -nak és P -nek közelítő mérése: A φ_n állapotban Q és P értéke Q' és P' megfelelő a_n és b_n értékével közelítően kifejezhető. Más szóval szórásuknak eme értékek körül kicsinynek kell lennie. E szórások a $(q - a_n)^2$ és a $(p - b_n)^2$ mennyiségek várható értékei, tehát

$$((Q - a_n \cdot 1)^2 \varphi_n, \varphi_n) = \|(Q - a_n \cdot 1) \varphi_n\|^2 = \|Q\varphi_n - a_n\varphi_n\|^2,$$

$$((P - b_n \cdot 1)^2 \varphi_n, \varphi_n) = \|(P - b_n \cdot 1) \varphi_n\|^2 = \|P\varphi_n - b_n\varphi_n\|^2.$$

Ezek Q' és Q , illetőleg P' és P különbségnégyzetének mértékei, tehát ε^2 -tel, illetőleg η^2 -tel kell közelítően egyenlőnek lenniük. Megköveteljük tehát, hogy

$$\|Q\varphi_n - a_n\varphi_n\| \lesssim \varepsilon, \quad \|P\varphi_n - b_n\varphi_n\| \lesssim \eta$$

legyen. Ahelyett, hogy Q' -ről és P' -ről beszélnénk, kézenfekvőbb olyan teljes ortonormált $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszert keresni, amelyre a_1, a_2, \dots és b_1, b_2, \dots megfelelő megválasztása mellett a fenti becslések érvényesek lesznek.

Olyan φ ($\|\varphi\| = 1$), amelyre (megfelelő a és b esetén)

$$\|Q\varphi - a\varphi\| = \varepsilon, \quad \|P\varphi - b\varphi\| = \eta,$$

a III. 4. fejezetből már ismert:

$$\varphi_{\rho, \sigma, \gamma} = \varphi_{\rho, \sigma, \gamma}(q) = \left(\frac{2\gamma}{h}\right)^{1/4} e^{-\frac{\pi\gamma}{h}(q-\sigma)^2 + \frac{2\pi\rho}{h}iq}.$$

Így $\varepsilon\eta = h/4\pi$ miatt

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{h\gamma}{4\pi}}, \quad \eta = \sqrt{\frac{h}{4\pi\gamma}}$$

(tehát $\gamma = \varepsilon/\eta$) és legyen $a = \sigma$, $b = \rho$. Ezen $\varphi_{\rho, \sigma, \gamma}$ -k segítségével most teljes ortonormált rendszert kell alkotnunk. Mivel σ a Q -nak, ρ pedig P -nek várható értéke, világos, hogy ρ -nak és σ -nak egymástól függetlenül kell egy számhalmazt befutnia, és a ρ halmaznak közelítően ε , a σ halmaznak közelítően η sűrűségűnek kell lennie. Kényelmes a

$$2\sqrt{\pi} \varepsilon = \sqrt{h\gamma}, \quad 2\sqrt{\pi} \eta = \sqrt{\frac{h}{\gamma}}$$

egységválasztással dolgozni. Így

$$\rho = \sqrt{h\gamma} \mu, \quad \sigma = \sqrt{\frac{h}{\gamma}} \nu$$

($\mu, \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Ekkor a

$$\psi_{\mu, \nu} = \varphi_{\sqrt{h\gamma} \mu, \sqrt{\frac{h}{\gamma}} \nu}$$

($\mu, \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) függvényeknek kellene a φ_n -ek ($n = 1, 2, \dots$) megfelelőinek lenniük. Az természetesen nem számít, hogy az egyetlen n index helyett itt kettő, μ és ν szerepel.

E $\psi_{\mu, \nu}$ -k azonban nem ortogonálisak. (Csak normáltak és kielégítik a

$$\|Q\psi_{\mu, \nu} - \sqrt{h\gamma} \mu \psi_{\mu, \nu}\| = \varepsilon, \quad \left\| P\psi_{\mu, \nu} - \sqrt{\frac{h}{\gamma}} \nu \psi_{\mu, \nu} \right\| = \eta$$

összefüggéseket.) Elvégezve az ortonormálást E. SCHMIDT módszere szerint, az eredményül kapott $\psi'_{\mu, \nu}$ rendszer teljessége is bebizonyítható minden nehézség nélkül, és megállapítható a

$$\|Q\psi'_{\mu, \nu} - \sqrt{h\gamma} \mu \psi'_{\mu, \nu}\| \leq C\varepsilon, \quad \left\| P\psi'_{\mu, \nu} - \sqrt{\frac{h}{\gamma}} \nu \psi'_{\mu, \nu} \right\| \leq C\eta$$

becslések helyessége is megfelelő C -vel. Ily módon $C \sim 60$ adódik, s ez valószínűleg még csökkenthető. Ennek bizonyítása fáradtságos számoláson múlik, ám nem kíván semmi újat sem, s így elhagyjuk. A $C \sim 60$ tényező nem érdekes, hiszen $\varepsilon\eta = h/4\pi$ makroszkopikus (C.G.S.)-egységekben mérve úgy is nagyon kicsiny ($\sim 10^{-28}$).

Összefoglalva azt mondhatjuk, hogy jogunk van a makroszkopikus operátorok, s így a fent bevezetett makroszkopikus E projektorok felcserélhetőségét feltételezni.

Az E -k a makroszkopikusan eldönthető H kérdéseknek felelnek meg. Ezek alkotják a vizsgált rendszer makroszkopikusan lehetséges meghatározó, megkülönböztető alternatíváinak halmazát. Ezek mind felcserélhetők egymással. A II. 5. fejezet alapján mondhatjuk, hogy E -vel és F -fel együtt $1 - E$, $E \cdot F$, $E + F - EF$, $E - E \cdot F$ is hozzájuk tartozik. Ésszerű feltételezni, hogy számuk véges: E_1, \dots, E_n . Vezessük be az $E^+ = E$, $E^- = 1 - E$ jelölést és tekintsük a 2^n számú $E_1^{(s_1)} \dots E_n^{(s_n)}$ szorzatot ($s_1, \dots, s_n = \pm$). Ezek közül bármely két különbözőnek a szorzata zérus. Ha ugyanis $E_1^{(s_1)} \dots E_n^{(s_n)}$ és $E_1^{(t_1)} \dots E_n^{(t_n)}$ olyan, hogy $s_v \neq t_v$, akkor szorzatukban

$E_v^{(+)} = E_v$ és $E_v^{(-)} = 1 - E_v$ szorzata szerepel, ami zérus. Bármely E_v ilyen szorzatok összege:

$$E_v = \sum_{s_1, \dots, s_{v-1}, s_{v+1}, \dots, s_n = \pm} E_1^{(s_1)} \dots E_{v-1}^{(s_{v-1})} E_v^{(+)} E_{v+1}^{(s_{v+1})} \dots E_n^{(s_n)}.$$

Tekintsük ezek közül azon $E_1' \dots E_m'$ szorzatokat, amelyek zérustól különböznek. (Világos, hogy $m \leq 2^n$, de még az is igaz, hogy $m \leq n^{-1}$, hiszen ezeknek E_1, \dots, E_n között szerepelniük kell és zérustól különböznek.) Nyilvánvaló, hogy $E_\mu' \neq 0$ és $E_\mu' E_\nu' = 0$ és minden E_μ bizonyos E_ν' -k összege. (Az utóbbiból az is következik, hogy $n = 2^m$.) Meg kell jegyeznünk, hogy $E_\mu + E_\nu = E_\rho'$ sohasem fordulhat elő, csak akkor, ha $E_\mu = 0$, $E_\nu = E_\rho'$, vagy $E_\nu = 0$, $E_\mu = E_\rho'$, különben E_μ és E_ν az E_π' -k összege volna, s így E_ρ' is legalább két E_π' összezeként állna elő (ebben egyforma tagok is lehetnek). Azonban a 15. és 16. Tétel miatt (II. 4. fejezet) ezek egymástól, E_ρ' -tól és zérustól különböznek, számuk legalább kettő, s így a szorzatuk E_ρ' -vel zérus, tehát összegük szorzata E_ρ' -vel szintén eltűnik, ami ellentmond annak, hogy ez az összeg E_ρ' .

Az E_1', \dots, E_m' projektoroknak megfelelő H_1', \dots, H_m' makroszkopikus tulajdonságokra tehát leszögezhetjük a következőket. Egyikük sem abszurd. Bármelyik kettő kölcsönösen kizárja egymást. Bármelyik makroszkopikus tulajdonság ezek diszjunkciójaként előállítható. Ezek egyike sem bontható fel diszjunkcióval két élesebb makroszkopikus tulajdonságra. A makroszkopikus diszkrimináció során tehát nem tudunk az H_1', \dots, H_m' tulajdonságokon túlmenni, mert ezek makroszkopikusan felbonthatatlanok.

A továbbiakban elejtjük azt a feltevést, hogy számuk véges és csak annyit követelünk meg, hogy létezzenek makroszkopikusan felbonthatatlan H_1', H_2', \dots tulajdonságok. A megfelelő projektorok E_1', E_2', \dots zérustól különbözők és páronként ortogonálisak. Minden makroszkopikus E ezek összezeként előállítható.

A fentiek szerint 1 is ilyen összeg. Ha ebben az összegben valamelyik E_ν' nem fordulna elő, akkor ez, lévén ortogonális minden más tagra, 1-re is ortogonális volna: $E_\nu' \cdot 1 = 0$, ami lehetetlen. Így $E_1' + E_2' + \dots = 1$. A vesszőt elhagyjuk: $H_1 + H_2, \dots$ és E_1, E_2, \dots . Az ezekhez tartozó megfelelő zárt lineáris sokaság legyen $\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \dots$, s ezek legyenek rendre s_1, s_2, \dots -dimenziósak.

Ha $s_n = 1$ lenne minden n -re, vagyis ha mindegyik \mathfrak{M}_n egydimenziós, akkor $\mathfrak{M}_n = [\varphi_n]$, $E_n = P_{[\varphi_n]}$ és $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszert alkot, hiszen $E_1 + E_2 + \dots = 1$. Ez azt jelentené, hogy maguknak a makroszkopikus méréseknek a segítségével a megfigyelt rendszer állapotát egyértelműen meg lehetne határozni. Mivel általában nem ez a helyzet, azért $s_n > 1$, sőt valójában $s_n \gg 1$.

Vegyük észre továbbá, hogy az E_n -eknek, amelyek a világ makroszkopikus leírásának építőkövei, bizonyos értelemben a klasszikus elmélet fázissterének cellabeosztásai felelnek meg. Azt már láttuk, hogy ezek közelítően a nem felcserélhető operátorok — s közöttük a fázisster szempontjából fontos szerepet játszó Q és P — viselkedését adják vissza.

Mekkora az U keverék entrópiája az E_1, E_2, \dots felbonthatatlan projektorokkal jellemzett makroszkopikus megfigyelő számára? Pontosabban, mennyi entrópia keletkezik, ha ez a megfigyelő U -t V -be viszi át, vagyis mekkora entrópiacsökkenést

(ez a körülményektől függően $\cong 0$) tud létrehozni külső objektumokban a legkedvezőbb körülmények között az $U \rightarrow V$ folyamattal?

Először is lényeges, hogy nem tud különbséget tenni olyan U és U' sokaságok között, amelyek E_n -re minden n esetén ugyanazt a várható értéket adják, tehát akkor, ha $\text{Sp}(UE_n) = \text{Sp}(U'E_n)$ ($n = 1, 2, \dots$). Bizonyos idő elmúltával a megkülönböztetés lehetővé válhat, hiszen U és U' a 2. szerint változik és

$$\text{Sp}(AUA^{-1}E_n) = \text{Sp}(AU'A^{-1}E_n),$$

$$A = e^{-\frac{2\pi i}{h} tA}$$

nem lesz okvetlenül igaz.²⁰⁴ Azonban csak olyan méréseket tekintünk, amelyeket rögtön egymás után hajtunk végre. Ilyen feltételek mellett U és U' megkülönböztethetetlennek tekinthető. A megfigyelő továbbá csak olyan féligáteresztő falakat használhat, amelyek valamelyik E_n φ -jét átengedi, a többit változatlanul visszaveri. Ez a lehetőség, amint az nehézség nélkül belátható, elegendő ahhoz, hogy az V. 2. fejezet módszerét követve valamely

$$U' = \sum_{n=1}^{\infty} x_n E_n$$

operátort egy

$$V' = \sum_{n=1}^{\infty} y_n E_n$$

operátorba vigyünk át reverzibilisen úgy, hogy az entrópiakülönbség továbbra is

$$\kappa \text{Sp}(U' \ln U') - \kappa \text{Sp}(V' \ln V'),$$

vagyis U' entrópiája $-\kappa \text{Sp}(U' \ln U')$ legyen. Megjegyezzük, ahhoz, hogy ilyen U' ($\text{Sp} U' = 1$) létezzék, $\text{Sp} E_n$ -nek, vagyis az s_n számoknak végesnek kell lenniük. Feltételezzük tehát, hogy mindegyik s_n véges. Az U' -nek x_1 sajátértéke s_1 -szeres, x_2 -é s_2 -szeres és így tovább. Így a $-U' \ln U'$ -nek $-x_1 \ln x_1$ sajátértéke is s_1 -szeres, $-x_2 \ln x_2$ s_2 -szeres, és így tovább. Ily módon $\text{Sp} U' = 1$ következtében

$$\sum_{n=1}^{\infty} s_n x_n = 1$$

és az entrópia

$$-\kappa \sum_{n=1}^{\infty} s_n x_n \ln x_n.$$

Az

$$U'E_m = \sum_{n=1}^{\infty} x_n E_n E_m = x_m E_m$$

összefüggés miatt

$$\text{Sp}(U'E_m) = x_m \text{Sp} E_m = s_m x_m,$$

$$x_m = \frac{\text{Sp}(U'E_m)}{s_m},$$

tehát az entrópia

$$-\kappa \sum_{n=1}^{\infty} \text{Sp}(U'E_n) \ln \frac{\text{Sp}(U'E_n)}{s_n}.$$

Tetszőleges U -ra ($\text{Sp } U = 1$) az entrópia szükségképpen ugyancsak

$$-\kappa \sum_{n=1}^{\infty} \text{Sp}(UE_n) \ln \frac{\text{Sp}(UE_n)}{s_n},$$

mert, ha

$$x_n = \frac{\text{Sp}(UE_n)}{s_n}, \quad U' = \sum_{n=1}^{\infty} x_n E_n,$$

akkor $\text{Sp}(UE_n) = \text{Sp}(U'E_n)$ és ha U az U' -től megkülönböztethetetlen, akkor entrópiájuk megegyezik.

Azt is meg kell említenünk, hogy ez az entrópia a szokásos entrópiát mindig meghaladja:

$$-\kappa \sum_{n=1}^{\infty} \text{Sp}(UE_n) \ln \frac{\text{Sp}(UE_n)}{s_n} \geq -\kappa \text{Sp}(U \ln U),$$

és az egyenlőség csak az

$$U = \sum_{n=1}^{\infty} x_n E_n$$

esetre igaz. Az V. 3. fejezet eredményei szerint biztosan ez a helyzet, ha az

$$U = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sp}(UE_n)}{s_n} E_n$$

U -ból az 1. folyamat többszöri (nem feltétlenül makroszkopikus) alkalmazásával kapható, mert a bal oldalon $-\kappa \text{Sp}(U' \ln U')$ van és

$$U = \sum_{n=1}^{\infty} x_n E_n$$

ugyanazt jelenti, mint $U = U'$. Vegyük az E_n -hez tartozó \mathfrak{M}_n zárt lineáris sokaságot kifeszítő $\varphi_1^{(n)}, \varphi_2^{(n)}, \dots$ ortonormált rendszert. Tekintve, hogy

$$\sum_{n=1}^{\infty} E_n = 1,$$

a $\varphi_v^{(n)}$ -k együtt ($n=1, 2, \dots, v=1, \dots, s_n$) teljes ortonormált rendszert alkotnak. Tartozék e sajátfüggvényekhez az (egyszeres sajátértékekkel rendelkező) R operátor, s legyen \mathfrak{R} a megfelelő fizikai mennyiség. Az \mathfrak{R} mérésekor (1. folytán) az

$$U'' = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{s_n} (U \varphi_v^{(n)}, \varphi_v^{(n)}) \cdot P_{[\varphi_v^{(n)}]}$$

jön létre. Legyen

$$\psi_v^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{s_n}} \sum_{v=1}^{s_n} e^{\frac{2\pi i}{s_n} \mu v} \varphi_v^{(n)},$$

ekkor $\psi_1^{(n)}, \dots, \psi_{s_n}^{(n)}$ ortonormált rendszer, amely ugyancsak \mathfrak{M}_n -et feszíti ki csakúgy, mint $\varphi_1^{(n)}, \dots, \varphi_{s_n}^{(n)}$. Így $\psi_v^{(n)}$ ($n=1, 2, \dots, v=1, 2, \dots, s_n$) szintén teljes ortonormált rendszer és képezhető az e sajátfüggvényekkel rendelkező S operátor és a megfelelő \mathfrak{C} fizikai mennyiség. Érvényesek a következő összefüggések:

$$(P_{[\varphi_v^{(n)}]} \psi_\mu^{(m)}, \psi_\mu^{(m)}) = \begin{cases} 0 & \text{ha, } m \neq n, \\ \frac{1}{s_n} & \text{ha, } m = n, \end{cases}$$

$$\sum_{v=1}^{s_n} P_{[\varphi_v^{(n)}]} = \sum_{v=1}^{s_n} P_{[\psi_v^{(n)}]} = E_n.$$

Az \mathfrak{C} mérésével (1. folytán) U'' az U' -be megy át:

$$\begin{aligned} & \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{s_m} (U'' \psi_\mu^{(m)}, \psi_\mu^{(m)}) P_{[\psi_\mu^{(m)}]} = \\ & = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{s_m} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{s_n} (U \varphi_v^{(n)}, \varphi_v^{(n)}) (P_{[\varphi_v^{(n)}]} \psi_\mu^{(m)}, \psi_\mu^{(m)}) \right] P_{[\psi_\mu^{(m)}]} = \\ & = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{s_m} \left[\sum_{v=1}^{s_m} \frac{(U \varphi_v^{(m)}, \varphi_v^{(m)})}{s_m} \right] P_{[\psi_\mu^{(m)}]} = \\ & = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{s_m} \frac{\text{Sp}(U E_m)}{s_m} P_{[\varphi_\mu^{(m)}]} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\text{Sp}(U E_m)}{s_m} E_m = U'. \end{aligned}$$

Következésképpen két 1. típusú folyamat elegendő ahhoz, hogy U -t U' -be transzformáljuk át és csak ennyire volt a bizonyításhoz szükségünk.

Ez az entrópia az állapotok esetében

$$[\text{amikor is } U = P_{[\varphi]}, \quad \text{Sp}(U E_m) = (E_m \varphi, \varphi) = \|E_m \varphi\|^2]$$

$$- \kappa \sum_{n=1}^{\infty} \|E_n \varphi\|^2 \ln \frac{\|E_n \varphi\|^2}{s_m}.$$

E kifejezés már mentes a makroszkopikus entrópia kényelmetlen tulajdonságaitól: nem állandó az időben (a 2. folyamatra) és nem zérus minden $U = P_{[\varphi]}$ állapotpra.

Valóban, $Sp(U E_n)$, amelyből entrópiánk felépül, nem állandó az időben, ahogy azt a 202. jegyzetben kielemeztük. Könnyű megmondani, hogy mely állapotra zérus az entrópia. Mivel

$$1 \geq \frac{\|E_m \varphi\|^2}{s_m} \geq 0,$$

az entrópia kifejezésében minden összeadandó

$$\|E_n \varphi\|^2 \ln \frac{\|E_n \varphi\|^2}{s_n}$$

járolék nempozitív, tehát valamennyiüknek el kell tűnniük. Vagyis

$$\frac{\|E_n \varphi\|^2}{s_n} = 0, 1.$$

Az első azt jelenti, hogy $E_n \varphi = 0$, a második pedig, hogy $\|E_n \varphi\| = \sqrt{s_n}$, mivel azonban

$$\|E_n \varphi\| \leq 1, \quad s_n \geq 1,$$

ebből következik, hogy $s_n = 1$, $\|E_n \varphi\| = \|\varphi\|$, vagyis $E_n \varphi = \varphi$; más szóval $s_n = 1$ és φ az \mathfrak{M}_n eleme. Az utóbbi nem lehet igaz két különböző n -re, mi több, ekkor $E_m \varphi = 0$, $m \neq n$ esetén, tehát $\varphi = 0$, mert

$$\sum_{n=1}^{\infty} E_n = 1.$$

Így pontosan egyetlen n -re φ az \mathfrak{M}_n eleme és $s_n = 1$. Ám megállapítottuk, hogy általánosan $s_n \gg 1$, tehát ez lehetetlen. Más szóval entrópiánk mindig pozitív.

Mivel a makroszkopikus entrópia időtől függő, a következő kérdésre kell választ adnunk: entrópiánk vajon a fenomenológiai termodinamika entrópiájának mintájára viselkedik-e, vagyis az esetek többségében növekszik-e? Erre a kérdésre a klasszikus elméletben a Boltzmann-féle H-tétel alapján a válasz igenlő. Ehhez azonban bizonyos statisztikus feltevéseket, az úgynevezett „rendezetlenségi” feltevéseket kell tenni.²⁰⁵ A szerzőnek a kvantummechanikában ilyen feltevések nélkül sikerült a megfelelő tételt bebizonyítania. Mivel e tárgynak és a vele szorosan kapcsolódó ergodikus tételnek részletes vizsgálata e kötet keretein kívül esik, e kutatásokra nem térhetünk ki (lásd a 206. jegyzet hivatkozását, ahol a tétel is bizonyítást kap). Az e probléma iránt érdeklődő olvasó a hivatkozásokban találhat idevágó anyagot.

VI. A MÉRÉSI FOLYAMAT

1. A probléma megfogalmazása

Eddigi vizsgálatainkban a kvantummechanika és a természet leírására szolgáló különböző kauzális és statisztikus módszerek viszonyát tárgyaltuk. Ennek során a kvantummechanikai folyamatok kettős, kielégítően meg nem magyarázható természetére derült fény. Egyrészt azt találtuk, hogy a $0 \leq \tau \leq t$ időintervallumban a φ állapot a H energiaoperátor hatására a φ' állapotba megy át:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi_\tau = -\frac{2\pi i}{h} H \varphi_\tau, \quad (0 \leq \tau \leq t)$$

ha tehát $\varphi_0 = \varphi$, $\varphi_t = \varphi'$, akkor

$$\varphi' = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H} \varphi,$$

s ez tisztán kauzális. Az U keverék ennek megfelelően az

$$U' = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H} U e^{\frac{2\pi i}{h} t H}$$

keverékbe megy át. A φ kauzális változásának következtében tehát az $U = P_{[\varphi]}$ állapotok az $U' = P_{[\varphi']}$ állapotokba transzformálódnak át (a 2. folyamat az V. 1. fejezetben).

Másrészt a φ állapot, amelyen valamilyen tisztán diszkrét spektrumú, egyszeres sajátértékekkel és a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvényekkel rendelkező mennyiséget mérünk meg, e mérés során nem kauzálisan változik, s a $|(\varphi_1, \varphi_2)|^2, |(\varphi_1, \varphi_2)|^2, \dots$ valószínűségekkel a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotokba megy át, vagyis az

$$U' = \sum_{n=1}^{\infty} |(\varphi, \varphi_n)|^2 \cdot P_{[\varphi_n]}$$

keverék jön létre. Általában az U keverék az

$$U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) \cdot P_{[\varphi_n]}$$

keverékbe fog átmenni (az 1. folyamat az V. 1. fejezetben). E folyamat nem kauzális, hiszen az állapotok keverékekbe mennek át.

A két $U \rightarrow U'$ folyamat között a különbség alapvető, nemcsak azért, mert a kauzalitás elve szempontjából különböznek, hanem azért is, mert az első termodinamikailag megfordítható, a második pedig nem (lásd. az V. 3. fejezetet).

Hasonlítsuk össze e körülményeket a természet vagy inkább a megfigyelés valódi körülményeivel. Először is alapvetően helyes az a megállapítás, hogy a mérés, illetőleg a szubjektív észlelés ehhez kapcsolódó folyamata új mozzanat a fizikai környezethez képest és arra vissza nem vezethető. Valóban, a szubjektív észlelés az individuumban belső intellektuális életéhez vezet el, mely természete szerint nem része a megfigyelésnek (hiszen minden elképzelhető megfigyelés vagy kísérlet esetén eleve adottnak kell tekinteni, lásd a fenti meg gondolást). Mindazáltal tudományos szempontból alapvető követelmény — ez az úgynevezett pszichofizikai paralelizmus elve —, hogy a szubjektív észlelés fizikán kívül eső folyamatát lehetséges legyen úgy leírni, mintha az a fizikai világban játszódna le, vagyis hogy egyes részeihez az objektív környezet és a közönséges tér ekvivalens fizikai folyamatait tudjuk hozzárendelni. (Természetesen e hozzárendelés során gyakran van szükség arra, hogy e folyamatok egyikét vagy másikat a térnek a testünk által elfoglalt részeibe eső pontjaiban lokalizáljuk. Ez azonban nem változtat azon, hogy ezek a körülöttünk levő világhoz, a fent említett objektív környezethez tartoznak.) A következő egyszerű példa mutatja eme elképzelések alkalmazását; mérjük hőmérsékletet. Ha akarjuk, akkor számolással nyomon követhetjük e folyamatot addig, míg el nem jutunk a hőmérő higanytartályának környezetében uralkodó hőmérsékletig, s ekkor azt mondjuk, hogy ezt a hőmérsékletet méri a hőmérő. Tovább is számolhatunk azonban, és a higanynak a kinetikus, molekuláris elmélet megszabta tulajdonságaiból kiszámíthatjuk a felmelegedést, a higanyoszlop megnyúlását, a hosszát, és azt mondhatjuk, hogy ezt a hosszúságot látja a megfigyelő. Tovább is mehetünk, és a fényforrást is figyelembe véve meghatározhatjuk a fénykvantumok visszaverődését a higanyoszlopról, a visszavert fénykvantumok pályáját a megfigyelő szeméig, elhajlását a szemlencsén és a kép keletkezését a retinán, és ekkor azt mondhatjuk, hogy ezt a képet regisztrálja a megfigyelő retinája. Ha fiziológiai ismereteink a mainál pontosabbak lennének, akkor még tovább mehetnénk és kinyomozhatnánk azokat a vegyi reakciókat, amelyek ennek a retinán képződő képnek a benyomását a látóidegen át az agyba továbbítják, s végül azt mondhatnánk, hogy az agysejtek ilyen és ilyen kémiai változását észleli a megfigyelő. Minden esetben azonban bármeddig is folytatjuk a számolást a higanyoszlopig, a hőmérő skálájáig, a retináig, vagy az agyig, valamelyik végállomásnál a következőt kell mondanunk: „és ezt észleli a megfigyelő”. Így a világot mindig két részre kell osztani, az egyik a megfigyelt rendszer, a másik a megfigyelő. Az előbbiben minden fizikai folyamat (legalábbis elvileg) tetszőleges pontossággal nyomon követhető. Az utóbbiban ez értelmét veszti. A kettő között a határ nagymértékben önkényes. A fenti példán a négy különböző lehetőségen láttuk, hogy a megfigyelőt ebben az értelemben nem kell a megfigyelő testével azonosítanunk. A fenti példa egyik lehetőségében még a hőmérőt is hozzáértettük, a másikban viszont a szemét és látóidegét sem tekintettük a részének. Az, hogy ezt a határt a megfigyelő testében tetszőlegesen mélyre toljuk el, nem más, mint a pszichofizikai paralelizmus elvének a tartalma. Ez azonban nem változtat azon, hogy bármely leírásmódnál e határt el kell valahol helyezni, ha azt akarjuk, hogy valóban megfigyelés, tehát összevetés történjék a kísérlettel. Valóban, a tapasztalat ilyen állításokat tartalmaz: valamely

megfigyelő bizonyos (szubjektív) megfigyelést tett, és sohasem ilyeneket: valamely fizikai mennyiség bizonyos értéket vesz fel.

A kvantummechanika a világ megfigyelt részében végbemenő eseményeket a **2.** folyamat (V. 1. fejezet) segítségével írja le mindaddig, amíg ezek nem hatnak kölcsön a megfigyelő résszel. Amint ilyen kölcsönhatás, vagyis mérés történik, az **1.** folyamat alkalmazására van szükség. E kettősség tehát indokolt.²⁰⁷ Az a veszély fenyeget azonban, hogy a pszichofizikai parallelizmus elve megsérülhet, ha nem bizonyítjuk be, hogy a megfigyelt rendszer és a megfigyelő között a határ a fenti értelemben tetszőlegesen helyezhető el.

Ennek megvizsgálásához osszuk fel a világot három részre, legyen ez *I*, *II* és *III*. Legyen *I* a voltaképpen megfigyelt rendszer, *II* a mérőberendezés, *III* a voltaképpeni megfigyelő.²⁰⁸ Meg kell mutatnunk, hogy a határ éppúgy megvonható *I* és *II+III* között, mint *I+II* és *III* között. (A fenti példában az első és a második eset összevetésekor *I* a megfigyelt rendszer, *II* a hőmérő, *III* pedig a fény és a megfigyelő volt, a második és a harmadik esetben *I* a megfigyelt rendszer és a hőmérő, *II* a fény és a megfigyelő szeme, *III* a megfigyelő volt a retinától kezdve, a harmadik és a negyedik esetben *I* mindent tartalmazott a megfigyelő retinájáig, *II* a retinája, az idegpályái és az agya volt, *III* pedig az absztrakt „énje”.) Az egyik esetben a **2.** folyamatot kell *I*-re és az **1.** folyamatot *I* és *II+III* kölcsönhatására, a másik esetben pedig **2.**-t kell *I+II*-re, **1.**-t pedig *I+II* és *III* kölcsönhatására alkalmazni. (Mindkét esetben maga a *III* a számolás körén kívül esik.) Feladatunk tehát az, hogy bebizonyítsuk, hogy mindkét eljárás ugyanazt eredményezi *I*-re vonatkozóan (mindkét esetben ez és csak ez tartozik a világ tulajdonképpen megfigyelt részéhez).

Ahhoz azonban, hogy ezt sikeresen végre tudjuk hajtani, először közelebbről meg kell vizsgálnunk két fizikai rendszer egyesítésének folyamatát (így lesz *I*-ből és *II*-ből *I+II*).

2. Összetett rendszerek

Amint azt az előző szakasz végén említettük, két fizikai rendszert, az *I*-et és a *II*-t, valamint ezek *I+II* egyesítését fogjuk vizsgálni (*I* és *II* jelentése nem feltétlenül az, ami az előző szakaszban volt). Legyen *I* szabadsági fokainak száma *k*, *II*-é pedig *l*. A klasszikus mechanikai leírásban *I* koordinátái q_1, \dots, q_k , ezeket együtt *q*-val, *II* koordinátái pedig r_1, \dots, r_l , ezeket együtt *r*-rel jelöljük. Így *I+II* $k+l$ szabadsági fokú, a koordináták $q_1, \dots, q_k, r_1, \dots, r_l$, vagy röviden *q, r*. A kvantummechanikában *I* hullámfüggvénye $\varphi(q)$, *II*-é $\zeta(r)$, *I+II*-é pedig $\Phi(q, r)$. A megfelelő Hilbert-terek \mathfrak{R}^I , \mathfrak{R}^{II} , \mathfrak{R}^{I+II} , a skaláris szorzat definíciója pedig rendre $\int \varphi(q) \psi(q) dq$, $\int \zeta(r) \eta(r) dr$ és $\int \Phi(qr) \Psi(q, r) dq dr$. Az *I*, *II* és *I+II* fizikai mennyiségei rendre a (hipermaximális) hermitikus **A**, **Q** és **A** operátorok \mathfrak{R}^I -ben, \mathfrak{R}^{II} -ben, illetőleg \mathfrak{R}^{I+II} -ben.

Az *I* minden **A** fizikai mennyisége egyben *I+II* fizikai mennyisége is és **A** az **A**-ból a következőképpen kapható meg: **A** $\Phi(qr)$ -et úgy kapjuk, hogy *r*-et állandónak

tekintjük és \mathbf{A} -t q -nak $\Phi(q, r)$ függvényére alkalmazzuk.²⁰⁹ E transzformációs szabály mindenesetre helytálló, a Q_1, \dots, Q_k és P_1, \dots, P_k koordináta, illetőleg impulzus operátorok, tehát

$$q_1, \dots, q_k, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$$

esetén (lásd az I. 2. fejezetet) és összefér a IV. 2. fejezetben felírt I. és II. elvvel.²¹⁰ Így ezt általában is feltételezzük. (Ez a kvantummechanikában a szokásos eljárás.)

Ehhez hasonlóan II -nek minden fizikai mennyisége egyben $I+II$ fizikai mennyisége is, és \mathbf{A} az \mathfrak{A} -ból hasonló szabály segítségével kapható meg: $\mathbf{A}\Phi(q, r)$ $\mathfrak{A}\Phi(q, r)$ -rel egyenlő, ha az utóbbiban q -t állandónak tekintjük és $\Phi(q, r)$ -et r függvényeként fogjuk fel.

Ha $\varphi_m(q)$ ($m=1, 2, \dots$) teljes ortonormált rendszer \mathfrak{R}^I -ben, $\xi_n(r)$ ($n=1, 2, \dots$) pedig \mathfrak{R}^{II} -ben, akkor világos, hogy $\Phi_{m|n}(q, r) = \varphi_m(q)\xi_n(r)$ teljes ortonormált rendszer \mathfrak{R}^{I+II} -ben. Így az \mathbf{A} , \mathfrak{A} és \mathbf{A} operátorok rendre az $[a_{m|m'}]$, $[a_{n|n'}]$ és az $[\alpha_{mn|m'n'}]$ mátrixokkal reprezentálhatók ($m, n, m', n'=1, 2, \dots$).²¹¹ Ezt gyakran fogjuk használni. A mátrixreprezentáció azt jelenti, hogy

$$\mathbf{A}\varphi_m(q) = \sum_{m'=1}^{\infty} a_{m|m'} \varphi_{m'}(q),$$

$$\mathfrak{A}\xi_n(r) = \sum_{n'=1}^{\infty} a_{n|n'} \xi_{n'}(r),$$

$$\mathbf{A}\Phi_{mn}(q, r) = \sum_{m', n'=1}^{\infty} \alpha_{mn|m'n'} \Phi_{m'|n'}(q, r),$$

vagyis

$$\mathbf{A}\varphi_m(q)\xi_n(r) = \sum_{m', n'=1}^{\infty} \alpha_{mn|m'n'} \varphi_{m'}(q)\xi_{n'}(r).$$

Ennek értelmében az $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}$ megfeleltetés azt jelenti, hogy

$$\mathbf{A}\varphi_m(q)\xi_n(r) = (\mathbf{A}\varphi_m(q))\xi_n(r) = \sum_{m'=1}^{\infty} a_{m|m'} \varphi_{m'}(q)\xi_n(r),$$

más szóval

$$\alpha_{mn|m'n'} = a_{mm'} \delta_{nn'},$$

$$\delta_{nn'} = \begin{cases} 1, & \text{ha } n=n', \\ 0, & \text{ha } n \neq n'. \end{cases}$$

Ugyanilyen módon az $\mathfrak{A} \rightarrow \mathbf{A}$ megfeleltetés azt jelenti, hogy $\alpha_{mn|m'n'} = a_{n|n'} \delta_{mm'}$.

Az $I+II$ statisztikus sokaságát az $[\nu_{mn|m'n'}]$ mátrixú \mathbf{U} statisztikus operátor jellemzi. Ez $I+II$ minden mennyiségének, s így I mennyiségeinek statisztikus tulajdonságait is meghatározza. Következésképpen van megfelelő I -sokaság is.

Valóban, olyan megfigyelő, aki csak I -t tudja észlelni, II -t pedig nem, az $I+II$ rendszerek sokaságát az I rendszerek sokaságának tekinti. Kérdés, hogy ennek az I -sokaságnak mi az U statisztikus operátora, vagy ennek $[u_{m|m'}]$ mátrixa. Ezt így határozzuk meg: Ha az $[a_{m|m'}]$ mátrixú I mennyiséget $I+II$ mennyiségnek tekintjük, akkor mátrixa $[a_{m|m'}\delta_{nn'}]$, az I -re számított várható érték:

$$\sum_{m,m'=1}^{\infty} u_{m|m'} a_{m'|m},$$

míg ugyanez $(I+II)$ -re számítva:

$$\begin{aligned} \sum_{m,n,m',n'=1}^{\infty} v_{mn|m'n'} a_{m'|m} \delta_{nn'} &= \sum_{m,m',n=1}^{\infty} v_{mn|m'n} a_{m'|m} = \\ &= \sum_{m,m'=1}^{\infty} \left(\sum_{n=1}^{\infty} v_{mn|m'n} \right) a_{m'|m}. \end{aligned}$$

Ahhoz, hogy e két kifejezés megegyezzen egymással, kell, hogy

$$u_{m|m'} = \sum_{n=1}^{\infty} v_{mn|m'n}$$

teljesüljön.

Hasonlóan, ha csupán II -t tekintjük és I -et nem vesszük figyelembe, akkor az $I+II$ sokaság $[u_{n|n'}]$ mátrixú U statisztikus operátorral jellemzett II sokaságot határoz meg, ahol

$$u_{n|n'} = \sum_{m=1}^{\infty} v_{mn|mn'}.$$

Ezzel megállapítottuk az összefüggést I , II és $I+II$ U , U és U statisztikus operátora között. Ezek lényegesen különböznek a fizikai mennyiségek A , U és A operátorai közötti megfeleltetésektől.

Meg kell jegyeznünk, hogy a megfeleltetés az U , U és U operátorok között csak látszólag függ a $\varphi_m(q)$ és a $\xi_n(r)$ teljes ortonormált rendszer kiválasztásától. Valóban, ezt invariáns feltételből vezettük le (amelyet csupán ez az elrendezés elégít ki), nevezetesen abból a követelményből, hogy A és A , illetőleg U és A várható értéke egyezzen meg.

Az U az $(I+II)$ statisztikáját, U és U az I -re, illetőleg a II -re korlátozott statisztikát fejezi ki. Ezzel kapcsolatban a következő kérdés merül fel: vajon U és U meghatározza-e U -t egyértelműen? A kérdésre általában nemleges választ várunk, hiszen a két rendszer között lehetséges „valószínűségi korrelációk” eltűnnek, ha az információt egyedül U , illetőleg U ismeretéből, vagyis I , illetőleg II vizsgálatából merítjük. Viszont ha I és II állapotát pontosan ismerjük, akkor valószínűségi kérdések nem merülnek fel és $(I+II)$ állapota is ismert lesz. Kíváncsian azonban e kérdések egzakt matematikai vizsgálata, s ezért most ehhez látunk hozzá.

A feladat tehát a következő: adott $[u_{m|m'}]$ és $[u_{n|n'}]$ definit mátrixhoz keresni kell olyan $[v_{mn|m'n'}]$ definit mátrixot, hogy

$$\sum_{n=1}^{\infty} v_{mn|m'n} = u_{m|m'}, \quad \sum_{m=1}^{\infty} v_{mn|mn'} = u_{n|n'}$$

igaz legyen. (A

$$\sum_{m=1}^{\infty} u_{m|m} = \sum_{n=1}^{\infty} u_{n|n} = 1$$

összefüggésből következik, hogy

$$\sum_{m,n=1}^{\infty} v_{mn|mn} = 1,$$

vagyis a helyes normálás megmarad.) E feladat mindig megoldható, mert például $v_{mn|m'n} = u_{m|m'} \cdot u_{n|n'}$ mindig megoldás (könnyen belátható, hogy e mátrix definit). Felmerül azonban a kérdés, hogy vajon ez az egyetlen megoldás-e?

Megmutatjuk, hogy akkor és csak akkor ez a helyzet, ha az $[u_{m|m'}]$, $[u_{n|n'}]$ mátrixok közül legalább az egyik állapotnak felel meg. Először e feltétel szükségességét bizonyítjuk be, vagyis azt, hogy ha mindkét mátrix keveréknek felel meg, akkor több megoldás létezik. Ilyen esetben (lásd a IV. 2. fejezetet)

$$u_{m|m'} = \alpha v_{m|m'} + \beta w_{m|m'}, \quad u_{n|n'} = \gamma v_{n|n'} + \delta w_{n|n'}.$$

(A $v_{m|m'}$ és $w_{m|m'}$ definit és egymástól nemcsak állandó tényezőben különböznek. Ugyanez igaz $v_{n|n'}$ -re és $w_{n|n'}$ -re is és

$$\sum_{m=1}^{\infty} v_{m|m} = \sum_{m=1}^{\infty} w_{m|m} = \sum_{n=1}^{\infty} v_{n|n} = \sum_{n=1}^{\infty} w_{n|n} = 1,$$

$$\alpha, \beta, \gamma, \delta > 0, \quad \alpha + \beta = \gamma + \delta = 1.)$$

Ekkor könnyen bebizonyítható, hogy minden

$$v_{mn|m'n} = \pi v_{m|m'} v_{n|n'} + \rho w_{m|m'} v_{n|n'} + \sigma v_{m|m'} w_{n|n'} + \tau w_{m|m'} w_{n|n'}$$

megoldás, ahol

$$\pi + \sigma = \alpha, \quad \rho + \tau = \beta, \quad \pi + \rho = \gamma, \quad \sigma + \tau = \delta,$$

$$\pi, \rho, \sigma, \tau > 0.$$

Ekkor π, ρ, σ, τ végtelen sokféleképpen választható meg. Az $\alpha + \beta = \gamma + \delta$ miatt a négy egyenletből csak három független, így $\rho = \gamma - \pi$, $\sigma = \alpha - \pi$, $\tau = (\delta - \alpha) + \pi$, és mivel mindegyik pozitív, azért $\alpha - \delta = \gamma - \beta < \pi < \alpha, \gamma$, ami végtelen sok π -re igaz. Ám, különböző π, ρ, σ, τ különböző $v_{mn|m'n}$ -höz vezet, s így $v_{m|m'} \cdot v_{n|n'}, \dots, w_{m|m'} \cdot w_{n|n'}$ lineárisan független egymástól, mert $v_{m|m'}$, $w_{m|m'}$ és $v_{n|n'}$, $w_{n|n'}$ is az.

Most az elégségességet bizonyítjuk be. Ekkor feltehetjük, hogy $u_{m|m'}$ állapotnak felel meg (a másik esetet ugyanígy lehet tárgyalni). Az $U = P_{[\varphi]}$ és mivel a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$

teljes ortonormált rendszer tetszőleges volt, feltehetjük, hogy $\varphi_1 = \varphi$. Az $U = P_{[\varphi_1]}$ mátrixa a következő:

$$u_{m|m'} = \begin{cases} 1, & \text{ha } m = m' = 1, \\ 0, & \text{különben.} \end{cases}$$

Így

$$\sum_{n=1}^{\infty} v_{mn|m'n} = \begin{cases} 1, & \text{ha } m = m' = 1, \\ 0, & \text{különben.} \end{cases}$$

Nevezetesen, ha $m \neq 1$, akkor

$$\sum_{n=1}^{\infty} v_{mn|mn} = 0,$$

mivel azonban $v_{mn|m'n'}$ definit, minden $v_{mn|mn} \geq 0$ [ugyanis $v_{mn|mn} = (\mathbf{V}\Phi_{mn}, \Phi_{mn})$], s így ebben az esetben $v_{mn|mn} = 0$. Más szóval $(\mathbf{V}\Phi_{mn}, \Phi_{mn}) = 0$, s így \mathbf{V} definit volta miatt $(\mathbf{V}\Phi_{mn}, \Phi_{m'n'}) = 0$, ahol m' és n' tetszőleges (lásd II. 5. fejezet 19. Tétele). Így $m \neq 1$ esetén következik $v_{mn|m'n'} = 0$, és a hermitikusság miatt ez $m' \neq 1$ esetén is igaz. Viszont $m = m' = 1$ esetén

$$v_{1n|1n'} = \sum_{m=1}^{\infty} v_{mn|mn'} = u_{n|n'}.$$

Amint tehát állítottuk, a $v_{mn|m'n'}$ megoldás egyértelműen meg van határozva.

Eredményünket a következőkben foglaljuk össze. Az $\mathbf{V} = [v_{mn|m'n'}]$ operátorú $I + II$ statisztikus sokaságot akkor és csak akkor határozza meg az általa külön I -ben és külön II -ben keltett $U = [u_{m|m'}]$, illetőleg $\mathfrak{U} = [u_{n|n'}]$ operátorú sokaság egyértelműen, ha a következő két feltétel teljesül:

1.

$$v_{mn|m'n'} = v_{m|m'} \cdot v_{n|n'}$$

(Abból, hogy

$$\text{Sp } \mathbf{V} = \sum_{m,n=1}^{\infty} v_{mn|mn} = \sum_{m=1}^{\infty} v_{m|m} \sum_{n=1}^{\infty} v_{n|n} = 1,$$

következik, hogy $v_{m|m'}$ -nek és $v_{n|n'}$ -nek két állandó reciprok tényezővel történő szorzásával elérhető a

$$\sum_{m=1}^{\infty} v_{m|m} = 1, \quad \sum_{n=1}^{\infty} v_{n|n} = 1.$$

Ekkor azonban látható, hogy $u_{m|m'} = v_{m|m'}$, $u_{n|n'} = v_{n|n'}$.)

2. Vagy $v_{m|m'} = \bar{x}_m x_m$, vagy pedig $v_{n|n'} = \bar{x}_n x_n$. (Valóban, $U = P_{[\varphi]}$ azt jelenti, hogy

$$\varphi = \sum_{m=1}^{\infty} y_m \varphi_m,$$

s így $u_{m|m'} = y_m \bar{y}_m$, s ennek megfelelően $v_{m|m'}$ -re ehhez hasonló igaz, ha $\mathfrak{U} = P_{[\xi]}$.)

Az \mathcal{U} -nak és \mathcal{V} -nek neve \mathbf{V} projekciója I -re, illetőleg II -re.²¹²

Foglalkozzunk most az $I + II$, $\mathbf{V} = P_{[\Phi]}$ állapotaival. A megfelelő $\Phi(q, r)$ hullámfüggvény a teljes ortonormált $\Phi_{mn} = \varphi_m(q)\xi_n(r)$ rendszer szerint kifejezhető:

$$\Phi(q, r) = \sum_{m,n=1}^{\infty} f_{mn} \varphi_m(q)\xi_n(r).$$

A $\Phi(q, r)$ helyett az f_{mn} -ek is tekinthetők ($m, n = 1, 2, \dots$). Ezekre csak az a feltétel van kiszabva, hogy

$$\sum_{m,n=1}^{\infty} |f_{mn}|^2 = \|\Phi\|^2$$

végés legyen. Definiálható az F és az F^* operátor:

$$F\varphi(q) = \int \overline{\Phi(q, r)}\varphi(q) dq,$$

$$F^*\xi(r) = \int \Phi(q, r)\xi(r) dr.$$

Ezek lineárisak és \mathfrak{R}^I -en, illetőleg \mathfrak{R}^{II} -n vannak értelmezve, de értékészletük \mathfrak{R}^{II} -be, illetőleg \mathfrak{R}^I -be esik. Köztük adjungálási reláció áll fenn, hiszen $(F\varphi, \xi) = (\varphi, F\xi)$ (a bal oldalon a skalárszorzatot \mathfrak{R}^{II} -ben, a jobb oldalon \mathfrak{R}^I -ben kell képezni). Az \mathfrak{R}^I és \mathfrak{R}^{II} között a különbség matematikai szempontból érdektelen, így alkalmazhatjuk a II. 11. fejezet eredményeit, lévén ezek integráloperátorok, $\sum(F)$ és $\sum(F^*)$ a következő:

$$\iint |\Phi(q, r)|^2 dq dr = \|\Phi\|^2 = 1$$

($\|\Phi\|$ az \mathfrak{R}^{I+II} -ben veendő),

s így mindkettő végés. Következésképpen F és F^* folytonos, sőt teljesen folytonos, és mind F^*F mind pedig FF^* definit operátor, $\text{Sp}(F^*F) = \sum(F) = 1$, $\text{Sp}(FF^*) = \sum(F^*) = 1$. Figyeljünk arra, hogy \mathfrak{R}^I és \mathfrak{R}^{II} különböző, s látjuk, hogy F^*F az \mathfrak{R}^I -ben, FF^* az \mathfrak{R}^{II} -ben van definiálva.

Mint hogy $F\varphi_m(q)$ a

$$\sum_{n=1}^{\infty} f_{mn}\xi_n(r)$$

kifejezéssel egyenlő, F mátrixa $[f_{mn}]$ (itt felhasználjuk, hogy $\varphi_m(q)$ és $\xi_n(r)$ teljes ortonormált rendszer), ugyanígy F^* mátrixa $[f_{mn}]$. Így F^*F , illetve FF^* mátrixa

$$\left[\sum_{n=1}^{\infty} f_{mn}f_{m'n} \right],$$

illetve

$$\left[\sum_{m=1}^{\infty} f_{mn}f_{mn'} \right].$$

Másrészt $\mathbf{V} = P_{[\Phi]}$ mátrixa viszont $[\tilde{f}_{mn} f_{m'n'}]$ a $\Phi_{mn}(qr) = \varphi_m(q)\xi_n(r)$ rendszerben, tehát ennek projekciója I -re és II -re, vagyis az \mathbf{U} és az \mathbf{U} mátrixok az

$$\left[\sum_{n=1}^{\infty} \tilde{f}_{mn} f_{m'n'} \right],$$

illetve

$$\left[\sum_{m=1}^{\infty} \tilde{f}_{mn} f_{mn'} \right]$$

alakot öltik.²¹³

Következésképpen

$$\mathbf{U} = F^*F, \quad \mathbf{U} = FF^*,$$

és ezek az állítások nem függenek a φ_m és ξ_n kiválasztásától (mert \mathbf{U} , \mathbf{U} és F sem).

Az \mathbf{U} és az \mathbf{U} operátor teljesen folytonos, és a II. 11., valamint a IV. 3. fejezet alapján ezek a következő alakba írhatók:

$$\mathbf{U} = \sum_{k=1}^{\infty} w'_k P_{[\psi_k]}, \quad \mathbf{U} = \sum_{k=1}^{\infty} w''_k P_{[\eta_k]},$$

ahol ψ_k -k és η_k -k \mathfrak{R}^I -ben, illetőleg \mathfrak{R}^{II} -ben teljes ortonormált rendszert alkotnak és $w'_k, w''_k \geq 0$. Most e két képletben elhagyjuk azokat a tagokat, amelyekre $w'_k = 0$, illetve $w''_k = 0$ és a megmaradókat számozzuk meg k -val; $k = 1, 2, \dots$ Így a ψ_k -k és a η_k -k ismét ortonormált, azonban nem feltétlenül teljes rendszert alkotnak, a

$$\sum_{k=1}^{\infty}$$

helyett

$$\sum_{k=1}^{M'}, \quad \sum_{k=1}^{M''}$$

fog szerepelni, ahol M' és M'' lehet véges, vagy végtelen, és w'_k , illetve w''_k már pozitív.

Tekintsük ψ_k -t. Fennáll $\mathbf{U}\psi_k = w'_k\psi_k$, s így $F^*F\psi_k = w'_k\psi_k$, $FF^*F\psi_k = w'_kF\psi_k$, $\mathbf{U}F\psi_k = w'_kF\psi_k$ is. Továbbá

$$(F\psi_k, F\psi_l) = (F^*F\psi_k\psi_l) = (\mathbf{U}\psi_k, \psi_l) =$$

$$= w'_k(\psi_k, \psi_l) = \begin{cases} w'_k, & \text{ha } k=l \\ 0, & \text{ha } k \neq l. \end{cases}$$

Így $\|F\psi_k\|^2 = w'_k$. Az

$$\frac{1}{\sqrt{w'_k}} F\psi_k$$

függvények \mathfrak{R}^{II} -ben ortonormált rendszert alkotnak. Ezek \mathbf{U} sajátfüggvényei, a sajátérték ugyanaz, mint \mathbf{U} -é a ψ_k -ra (vagyis w'_k). Más szóval \mathbf{U} -nak minden sajátértéke \mathbf{U} -nak is sajátértéke legalább ugyanakkora multiplicitással. Az \mathbf{U} és \mathbf{U} felcserélésével tehát belátható, hogy sajátértékeik, s azok multiplicitásai megegyez-

nek. A w'_k -k és a w''_k -k tehát sorrendtől eltekintve megegyeznek, s így $M' = M'' = M$ és w'_k átszámolásával elérhető, hogy $w'_k = w''_k = w_k$ teljesüljön. Ekkor világos, hogy η_k általában így választható:

$$\eta_k = \frac{1}{\sqrt{w_k}} F \psi_k.$$

Tehát

$$\frac{1}{\sqrt{w_k}} F^* \eta_k = \frac{1}{w_k} F^* F \psi_k = \frac{1}{w_k} U \psi_k = \psi_k.$$

Ily módon

$$\eta_k = \frac{1}{\sqrt{w_k}} F \psi_k, \quad \psi_k = \frac{1}{\sqrt{w_k}} F^* \eta_k$$

fennáll.²¹²

Terjesszük most ki a ψ_1, ψ_2, \dots és az η_1, η_2, \dots ortonormált rendszert a teljes $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi'_1, \psi'_2, \dots$, illetve a teljes $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta'_1, \eta'_2, \dots$ ortonormált rendszerre (a ψ'_1, ψ'_2, \dots , valamint az η'_1, η'_2, \dots rendszer egymástól függetlenül lehet üres, véges vagy végtelen is). Hangsúlyozzuk, hogy az eddigi megfontolásaink függetlenek voltak a φ_m és a ξ_n ortonormált rendszerek megválasztásától. Ezért megtehetjük, hogy ezek a ψ_1, ψ_2, \dots , ill. $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta'_1, \eta'_2, \dots$ függvényrendszerekkel egybeessenek. Feleljen meg ψ_k a φ_{μ_k} -nak és η_k a ξ_{ν_k} -nak (a μ_1, μ_2, \dots és ν_1, ν_2, \dots egymástól különböznek). Ekkor

$$F \varphi_{\mu_k} = \sqrt{w_k} \xi_{\nu_k},$$

$$F \varphi_m = 0, \quad \text{ha } m \neq \mu_1, \mu_2, \dots$$

Így

$$f_{mn} = \begin{cases} \sqrt{w_k}, & \text{ha } m = \mu_k, n = \nu_k, k = 1, 2, \dots, \\ 0, & \text{különben,} \end{cases}$$

vagy, ami ugyanaz,

$$\Phi(q, r) = \sum_{k=1}^M \sqrt{w_k} \varphi_{\mu_k}(q) \xi_{\nu_k}(r).$$

A $\varphi_m(q), \xi_n(r)$ teljes ortonormált rendszer megfelelő megválasztásával bebizonyítottuk tehát, hogy az $[f_{mn}]$ mátrix minden oszlopa legfeljebb egy zérustól különböző elemet tartalmaz (az, hogy ez valós és pozitív, nevezetesen $\sqrt{w_k}$, a továbbiakban érdektelen). Mi e matematikai állítás fizikai tartalma?

Legyenek az A és a B operátorok sajátfüggvényei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, illetve ξ_1, ξ_2, \dots , egyszeres sajátértékrendszereik pedig a_1, a_2, \dots , illetve b_1, b_2, \dots . Az A I -ben, B pedig II -ben felel meg valamilyen fizikai mennyiségnek. Ezek tehát egyszerre mérhetőek. Könnyen látható, hogy az az állítás, miszerint „ A -értéke a_m , B -é pedig b_n ” a $\Phi_{mn}(q, r) = \varphi_m(q) \xi_n(r)$ állapotot határozza meg, s ennek valószínűsége a $\Phi(q, r)$ állapotban

$$(P_{[\Phi_{mn}]} \Phi, \Phi) = |(\Phi, \Phi_{mn})|^2 = |f_{mn}|^2.$$

Következésképpen állításunk azt jelenti, hogy A és B egyszerre mérhető, és hogy ha az egyiket Φ -ben megmértük, akkor ezzel a másik értékét egyértelműen meghatároztuk. (Olyan a_m , amelyre az összes f_{mn} zérus, nem lehetséges, mert a teljes

$$\sum_{n=1}^{\infty} |f_{mn}|^2$$

valószínűség nem tűnhet el, ha a_m egyáltalán megfigyelhető, ezért pontosan egy n esetén $f_{mn} \neq 0$, és ugyanez igaz B -re.) Más szóval a Φ állapotban több A -érték lehetséges (nevezetesen azok az a_m értékek, amelyekre

$$\sum_{n=1}^{\infty} |f_{mn}|^2 > 0,$$

vagyis, amelyekre van oly m , hogy $f_{mn} \neq 0$; általában minden a_m ilyen), és ugyanennyi B -érték lehetséges (azok a b_n -ek, amelyekre

$$\sum_{m=1}^{\infty} |f_{mn}|^2 > 0,$$

vagyis amelyekre van oly m , hogy $f_{mn} \neq 0$), de Φ egy-egy értelmű megfeleltetést létesít a lehetséges A - és B -értékek között.

Legyenek a lehetséges m értékek μ_1, μ_2, \dots illetve n értékek ν_1, ν_2, \dots , ekkor

$$f_{mn} = \begin{cases} c_k \neq 0, & \text{ha } m = \mu_k, n = \nu_k, k = 1, 2, \dots \\ 0, & \text{különben,} \end{cases}$$

így (M véges, vagy végtelen)

$$\Phi(q, r) = \sum_{k=1}^M c_k \varphi_{\mu_k}(q) \xi_{\nu_k}(r),$$

tehát

$$u_{mm'} = \sum_{n=1}^{\infty} f_{mn} f_{m'n} = \begin{cases} |c_k|^2, & \text{ha } m = m' = \mu_k, k = 1, 2, \dots \\ 0, & \text{különben,} \end{cases}$$

$$u_{nn'} = \sum_{m=1}^{\infty} f_{mn} f_{m'n} = \begin{cases} |c_k|^2, & \text{ha } n = n' = \nu_k, k = 1, 2, \dots \\ 0, & \text{különben,} \end{cases}$$

következésképpen

$$U = \sum_{k=1}^M |c_k|^2 P_{[\varphi_{\mu_k}]}, \quad U = \sum_{k=1}^M |c_k|^2 P_{[\xi_{\nu_k}]}.$$

Ebből látható, hogy ha Φ -t I -re, illetőleg II -re projiciáljuk, akkor általában keveréket kapunk, noha az $I + II$ csak állapot volt. Valóban, ez $I + II$ -ben bizonyos

információt nyújt, amely egyedül I -ben, vagy egyedül II -ben elvész, nevezetesen azt, hogy az A - és a B -értékek között egy-egy értelmű megfeleltetés van.

Bármely Φ esetén tehát A és B , vagyis φ_m és ξ_n megválasztható úgy, hogy feltételünk kielégül; tetszőleges A és B esetén ez persze megsérülhet. Minden Φ tehát bizonyos összefüggést jelent I és II között, a megfelelő A és B mennyiség függ Φ -tól. Könnyű megmondani, hogy Φ ezeket, vagyis a φ_m -et és ξ_n -et mennyire határozza meg. Ha a $|c_k|$ -k nem zérusok és egymástól különböznek, akkor \mathcal{U} és \mathcal{U} (ezeket Φ meghatározza) a megfelelő φ_m -eket és ξ_n -eket egyértelműen rögzíti (lásd a IV. 3. fejezetet). Az általános eset vizsgálatát az olvasóra bizzuk.

Végül megemlítjük, hogy $M \neq 1$ esetén sem \mathcal{U} , sem pedig \mathcal{U} nem állapot, hiszen mindegyik $|c_k|^2$ pozitív, míg ha $M = 1$, akkor mindkettő az: $\mathcal{U} = P_{[\varphi_{\mu_1}]}$, $\mathcal{U} = P_{[\xi_{v_1}]}$. Ekkor

$$\Phi(q, r) = c_1 \varphi_{\mu_1}(q) \xi_{v_1}(r)$$

és c_1 a $\varphi_{\mu_1}(q)$ -ba beleérthető, így \mathcal{U} és \mathcal{U} akkor és csak akkor állapot, ha $\Phi(q, r)$ alakja $\varphi(q)\xi(r)$ típusú, s ekkor

$$\mathcal{U} = P_{[\varphi]}, \quad \mathcal{U} = P_{[\xi]}.$$

A fenti eredmények alapján kijelenthetjük, hogy ha I a $\varphi(q)$, II pedig $\xi(r)$ állapotban van, akkor $I + II$ a $\Phi(q, r) = \varphi(q)\xi(r)$ állapotban lesz. Másrészt, ha $I + II$ olyan $\Phi(q, r)$ állapotban van, amely nem $\varphi(q)\xi(r)$ szorzat, akkor I és II keverék és nem állapot, azonban Φ az I és II bizonyos mennyiségeinek lehetséges értékei között egy-egyértelmű megfeleltetést teremt.

3. A mérési folyamat vizsgálata

Mielőtt a VI. 1. fejezetben kifejtett elképzeléseinkkel és a VI. 2. fejezetben kidolgozott formális eszközök segítségével teljessé tennénk a mérési folyamat vizsgálatát, az VI. 2. fejezet eredményeinek a segítségével megmutatjuk, hogy az 1. folyamat (V. 1. fejezet) statisztikus jellegének megvilágítására egy gyakorta javasolt magyarázat nem állja meg a helyét. E magyarázat a következőn alapul. Legyen I a megfigyelt rendszer, II pedig a megfigyelő. Ha a mérés előtt I az $\mathcal{U} = P_{[\varphi]}$ állapotban van, II pedig az

$$\mathcal{U} = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{[\xi_n]}$$

keverék, akkor $I + II$ egyértelműen meghatározott keverék. Valóban, a VI. 2. fejezet alapján számolva

$$\mathcal{V} = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{[\Phi_n]}, \quad \Phi_n = \varphi(q)\xi_n(r).$$

Ha most az A mennyiség mérése folyik le I -ben, akkor ez I és II kölcsönhatásának tekintendő. Ez azonban bizonyos \mathbf{H} energiaoperátorú 2. folyamat (V. 1. fejezet). Ha ez t ideig tart, akkor azt kapjuk, hogy

$$\mathbf{V}' = e^{-\frac{2\pi i}{h} t \mathbf{H}} \mathbf{V} e^{\frac{2\pi i}{h} t \mathbf{H}}$$

jön létre \mathbf{V} -ből, és valóban

$$\mathbf{V}' = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{[e^{-\frac{2\pi i}{h} t \mathbf{H}} \phi_n]}$$

Ha most minden

$$\Phi(q, r)$$

alakja $\psi_n(q)\eta_n(r)$ volna, ahol a ψ_n -ek A sajátfüggvényei, η_1, η_2, \dots pedig tetszőleges rögzített teljes ortonormált rendszer, akkor ez a beavatkozás mérési jellegű volna, mert I -nek bármely φ állapotát az A ψ_n sajátfüggvényeinek keverékébe transzformálná át. A statisztikus jelleg tehát a következőképpen bukkan fel. A mérés előtt I (egyértelmű) állapot, II pedig keverék volt, és II keverék jellege a kölcsönhatás folyamán $I+II$ -höz kapcsolódott, nevezetesen a projekciót I -re keverékké változtatta át. Más szóval a mérés eredménye határozatlan, mert a megfigyelő állapota a mérés előtt nem volt pontosan ismeretes. Elképzelhető, hogy ilyen mechanizmus működjék, mert lehet, hogy a megfigyelőnek a saját állapotára vonatkozó információi a természet törvényei miatt korlátozottak. E korlátok w_n értékében fejeződnek ki, s így csak a megfigyelőtől (s nem a φ -tól) függnék.

E ponton ez a magyarázat érvényét veszti. A kvantummechanika követelménye szerint ugyanis $w_n = (P_{[\psi_n]}\varphi, \varphi) = |(\varphi, \psi_n)|^2$, vagyis w_n függ φ -tól! Lehetséges ugyan más felbontás:

$$\mathbf{V}' = \sum_{n=1}^{\infty} w'_n P_{[\varphi_n]}$$

(a $\Phi'_n(q, r) = \psi_n(q)\eta_n(r)$ függvények ortonormáltak), ez azonban nem segít, a w'_n -ket ugyanis (a sorrendtől eltekintve) \mathbf{V} egyértelműen meghatározza (IV. 3. fejezet), ezek tehát a w_n -ekkel egyenlők.²¹⁴

Így az 1. folyamat nem kauzális jellegét nem a megfigyelő állapotának hiányos ismerete hozza létre. Ezért a továbbiakban mindig feltételezzük, hogy ez az állapot kimerítően ismert.

Foglalkozzunk ismét a VI. 1. fejezet végén megfogalmazott feladattal. Az I, II és III jelentse ugyanazt, mint ott és I , valamint II kvantummechanikai vizsgálata során a VI. 2. fejezet jelölését használjuk, míg III a számítások körén kívül marad (lásd ennek vizsgálatát a VI. 1. fejezetben). Legyen A az I -ben mérendő mennyiség, sajátfüggvényei $\varphi_1(q), \varphi_2(q), \dots$. Legyen I a $\varphi(q)$ állapotban.

Ha I a megfigyelt rendszer, $II+III$ pedig a megfigyelő, akkor az 1. folyamatot kell alkalmazni, és azt találjuk, hogy a mérés I -et a φ állapotból valamelyik φ_n állapotba viszi át a megfelelő $|(\varphi, \varphi_n)|^2$ valószínűséggel ($n=1, 2, \dots$). Mi a leírás mód akkor, ha $I+II$ a megfigyelt rendszer és csupán III a megfigyelő?

Ebben az esetben azt kell mondanunk, hogy II a mérőeszköz, amely valamely skálán mutatja A -nak I -ben felvett értékét. A mutató helyzete e skálán a B mennyiség (II -ben) és ezt figyeli meg III (ha II a megfigyelő testén belül van, akkor

a skála és a mutató helyett a megfelelő fiziológiai fogalmakat használjuk: ilyen a retina, a kép a retinán és így tovább). Legyen A és B értéke a_1, a_2, \dots illetve b_1, b_2, \dots , s legyen a számozás olyan, hogy a_n -hez b_n tartozzék hozzá.

Kezdetben I az (ismeretlen) $\varphi(q)$, II pedig az (ismert) $\xi(r)$ állapotban van, tehát $I + II$ állapota $\Phi(q, r) = \varphi(q)\xi(r)$. A mérés (amennyiben azt II hajtja végre I -ben) ugyanúgy, mint az előző példában, $I + II$ bizonyos H operátorának t időtartamú hatását jelenti: ez a 2. folyamat, mely Φ -t a

$$\Phi' = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H} \Phi$$

állapotba viszi át. A III megfigyelő szempontjából csak akkor van mérésről szó, ha a helyzet a következő: ha III méri az A és B egyszerre mérhető mennyiséget (I -ben, illetőleg II -ben, vagy mindkettő $I + II$ -ben), akkor az a_m, b_n pár valószínűsége zérus, ha $m \neq n$ és w_n ha $m = n$. Más szóval elég II -re pillantania, és ezzel A -t I -ben méri meg. A kvantummechanika szerint még $w_n = |(\varphi, \varphi_n)|^2$.

Ezzel a mérést II -ben elméletileg „megmagyaráztuk”, vagyis a VI. 1. fejezetben vizsgált $I|II + III$ felosztást az $I + II|III$ felosztásba át tudjuk vinni.

A matematikai feladat a következő: adott a teljes ortonormált $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszer \mathfrak{R}^I -ben. Keresendő olyan teljes ortonormált ξ_1, ξ_2, \dots rendszer és ξ állapot \mathfrak{R}^{II} -ben, olyan H energiaoperátor \mathfrak{R}^{I+II} -ben és oly t , hogy ha φ tetszőleges állapot \mathfrak{R}^I -ben és

$$\Phi(q, r) = \varphi(q)\xi(r), \quad \Phi'(q, r) = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H} \Phi(q, r),$$

akkor $\Phi'(q, r)$ alakja a következő legyen

$$\Phi'(q, r) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(q) \xi_n(r)$$

(a c_n -ek természetesen függenek φ -tól). Tehát

$$|c_n|^2 = |(\varphi, \varphi_n)|^2$$

(az V. 2. fejezetben megmutattuk, hogy ez egyenértékű az előbb megfogalmazott fizikai követelménnyel.)

A következőkben rögzített ξ_1, ξ_2, \dots és $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszert és rögzített ξ állapotot használunk és H helyett a

$$\Delta = e^{-\frac{2\pi i}{h} t H}$$

unitér operátort vizsgáljuk meg.

A matematikai feladat visszavezet a VI. 2. fejezetben megoldott problémához. Ott a jelen Φ' -nek megfelelő mennyiség volt adva és megmutattuk, hogy c_n, φ_n és ξ_n létezik. Most φ_n és ξ_n rögzítve van, adott a φ -tól függő Φ és c_n , meg kell határozni olyan Δ -t, hogy a $\Phi' = \Delta\Phi$ állapotra c_n, φ_n és ξ_n kiadódjék a fenti egyenlet szerint.

Megmutatjuk, hogy ilyen Δ -t valóban lehet találni. Csak az a fontos számunkra, hogy elvileg ilyen Δ létezik. Azzal a további kérdéssel, hogy valamely egyszerű és ésszerű mérőberendezésnek (a III. 4. fejezetbelinek pl.) megfelelő

$$\Delta = e^{-\frac{2\pi i}{h} tH}$$

rendelkezik-e ezen tulajdonsággal, nem foglalkozunk. Láttuk, hogy követelményeink a beavatkozás mérés mivoltát megszázó intuitív és kézenfekvő ismervekkel esnek egybe. A kérdéses beavatkozásoknak pedig a mérés jellegzetességeit kell magukon viselniük. Így a megfigyelésre alkalmazott kvantummechanika a tapasztalattal szembeszökő ellentmondásban volna, ha az ilyen Δ -k a követelményeinket nem elégítenék ki.²¹⁵ A következőkben tehát csupán a feltételeinket pontosan kielégítő absztrakt Δ -t adunk meg.

Legyen tehát φ_m ($m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$) és ξ_n ($n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$) két adott teljes ortonormált rendszer \mathfrak{R}^I -ben, illetőleg \mathfrak{R}^{II} -ben. (Az m és n most nem az $1, 2, \dots$, hanem a $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ értékeket veszi fel. Ez technikai szempontból kényelmes és elvileg az előzővel egyenértékű.) Legyen a ξ állapot az egyszerűség kedvéért ξ_0 . A Δ operátort a következőképpen határozzuk meg:

$$\Delta \sum_{m, n = -\infty}^{\infty} x_{mn} \varphi_m(q) \xi_n(r) = \sum_{m, n = -\infty}^{\infty} x_{mn} \varphi_m(q) \xi_{m+n}(r),$$

mivel mind $\varphi_m(q) \xi_n(r)$, mind pedig $\varphi_m(q) \xi_{m+n}(r)$ teljes ortonormált rendszer \mathfrak{R}^{I+II} -ben, ez a Δ unitér. Ám

$$\varphi(q) = \sum_{m = -\infty}^{\infty} (\varphi, \varphi_m) \varphi_m(q), \quad \xi(r) = \xi_0(r),$$

ezért

$$\Phi(qr) = \varphi(q) \xi(r) = \sum_{m = -\infty}^{\infty} (\varphi, \varphi_m) \cdot \varphi_m(q) \xi_0(r),$$

$$\Phi'(q, r) = \Delta \Phi(q, r) = \sum_{m = -\infty}^{\infty} (\varphi, \varphi_m) \cdot \varphi_m(q) \xi_m(r).$$

Célunkat elértük és még $c_n = (\varphi, \varphi_m)$ is teljesül.

E folyamat mechanizmusát egészében jobban megérthetjük konkrét *Schrödinger*-féle hullámfüggvények példáján és Δ helyett H megadásával.

A megfigyelt objektumot csakúgy, mint a megfigyelőt (vagyis I , illetőleg II) egyetlen $-\infty$ -tól $+\infty$ -ig változó q , illetőleg r változóval jellemezzük. Legyen tehát mindkettő egyenes mentén mozgó pont. Hullámfüggvényük $\psi(q)$, illetőleg $\eta(r)$ alakú. Feltételezzük, hogy m_1 , illetőleg m_2 tömegük oly nagy, hogy az energiaoperátor

$$\frac{1}{2m_1} \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 + \frac{1}{2m_2} \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial r} \right)^2$$

kinetikus energia része elhanyagolható. Ekkor H -nak csak a mérés szempontjából döntő kölcsönhatási része marad meg. Ezt így választjuk meg:

$$\frac{h}{2\pi i} q \frac{\partial}{\partial r}.$$

Az időtől függő Schrödinger-egyenlet [$I + II$ -nek $\psi_t = \psi_t(q, r)$ hullámfüggvényeire] a következő:

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(q, r) = -\frac{h}{2\pi i} q \frac{\partial}{\partial r} \psi_t(q, r),$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + q \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi_t(q, r) = 0,$$

vagyis

$$\psi_t(q, r) = f(q, r - tq).$$

Ha $t=0$ -ra $\psi_0(q, r) = \Phi(q, r)$, akkor tehát $f(q, r) = \Phi(q, r)$, s így

$$\psi_t(q, r) = \Phi(q, r - qt).$$

Nevezetesen, ha I és II kezdeti állapota $\varphi(q)$, illetve $\xi(r)$, akkor számításunk szerint (ha abban t -t 1-nek választjuk)

$$\Phi(q, r) = \varphi(q)\xi(r),$$

$$\Phi'(q, r) = \psi_1(q, r) = \varphi(q)\xi(r - q).$$

Szeretnénk megmutatni, hogy ez II számára az I helyének mérésére használható fel, vagyis, hogy a koordináták össze vannak csatolva. (A q és r csak tetszőleges és nem abszolút pontossággal mérhető, hiszen spektrumuk folytonos. Így e mérés csak közelítőleg hajtható végre.) E célból feltételezzük, hogy $\xi(r)$ csak az igen kicsiny $-\varepsilon < r < \varepsilon$ intervallumban különbözik zérustól (más szóval a megfigyelő r koordinátája a mérés előtt nagyon pontosan ismert). A ξ ezenkívül még normált is:

$$\|\xi\| = 1, \quad \text{vagyis} \quad \int |\xi(r)|^2 dr = 1.$$

Annak valószínűsége tehát, hogy q a $q_0 - \delta < q < q_0 + \delta$, r pedig az $r_0 - \delta' < r < r_0 + \delta'$ intervallumba esik, a következő:

$$\begin{aligned} & \int_{q_0 - \delta}^{q_0 + \delta} \int_{r_0 - \delta'}^{r_0 + \delta'} |\Phi'(q, r)|^2 dq dr = \\ & = \int_{q_0 - \delta}^{q_0 + \delta} \int_{r_0 - \delta'}^{r_0 + \delta'} |\varphi(q)|^2 |\xi(r - q)|^2 dq dr. \end{aligned}$$

Ha q_0 és r_0 különbsége egymástól $\delta + \delta' + \varepsilon$ -nál nagyobb, akkor ez 0, vagyis q és r egymáshoz olyan szorosan kapcsolódik, hogy különbségük $\delta + \delta' + \varepsilon$ -nál soha nem lehet nagyobb. Ha $r_0 = q_0$, akkor e valószínűség

$$\int_{q_0 - \delta}^{q_0 + \delta} |\varphi(q)|^2 dq,$$

ha $\delta' \geq \delta + \varepsilon$, a ξ -re tett feltevések miatt. Mivel azonban δ , δ' és ε tetszőlegesen kicsinynek választható (zérusnál azonban nagyobbak kell lenniük), ez azt jelenti, hogy q -nak és r -nek egymáshoz tetszőlegesen közel kell esnie és a valószínűsűrsűrűség az, amit a kvantummechanika állapít meg, vagyis $|\varphi(q)|^2$.

Vagyis a mérés viszonyai, úgy, ahogy azokat ebben és a VI. 1. szakaszban elemeztük, megvalósulnak.

Bonyolultabb rendszer, mondjuk a VI. 1. fejezetben található négy tagú példához hasonló, vagy például a *II* által *I*-en végrehajtott mérésnek egy *III* megfigyelő által végrehajtott ellenőrzése ugyanígy vizsgálható meg. Ezt az olvasóra bízuk.

JEGYZETEK

1. Többek között a következő átfogó műveket ajánlhatjuk: A. SOMMERFELD: *Ergänzungsband zur 4. Aufl. v. Atombau und Spektrallinien*, Braunschweig, 1928; WEYL: *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, Leipzig 1928; FRENKEL: *Einführung in die Quantenmechanik*, Berlin, 1929; BORN és JORDAN: *Elementare Quantenmechanik*, Berlin, 1930; DIRAC: *The Principles of Quantum Mechanics*, második kiadás, Oxford, 1936.

2. Lásd *Proc. Roy. Soc. London*, 109 (1925) és ugyanott 113 (1926). DIRACTól függetlenül P. JORDAN (*Z. Physik* 40 (1926)) és F. LONDON (*Z. Physik* 40 (1926)) az elmélet hasonló megalapozását adja.

3. Lásd a IV. és IV. 3. fejezetet.

4. Lásd az V. fejezetet.

5. A főbb állomások a következők: PLANCK felfedezi a „fekete test” sugárzásának kvantumtörvényeit (lásd M. PLANCK: *Wärmestrahlung*, Leipzig, 1906); EINSTEIN feltételezése a fény részecske természetéről (A fénykvantumok elmélete, *Ann. Phys.* [4] 17 (1905)), melyben a hullám—részecske kettős viselkedés első példáját adja meg. Amint azt azóta megtanultuk, ez az egész mikrofizika vezérlő elve. E két szabályt alkalmazta BOHR az atommodellben. (*Phil. Mag.* 26 (1913); *Z. Physik* 6 (1920)).

6. A többszörös periodikus mozgások kvantumtörvényeit (ezeket a mechanika törvényeihez kell csatolni) először EPSTEIN és SOMMERFELD dolgozta ki (SOMMERFELD: *Atombau und Spektrallinien*, Braunschweig, 1924). Másrészt bebizonyosodott, hogy a szabadon mozgó tömegpont, vagy a hiperbolapályán mozgó bolygó (szemben az elliptikus pályákkal) nem „kvantált”. A kvantumelmélet e fázisáról az olvasó teljes anyagot REICHE: *Die Quantentheorie, ihr Ursprung und ihre Entwicklung*, (Berlin, 1921) c. könyvében találhat. Lásd még LANDE: *Fortschritte der Quantentheorie*, Dresden, 1922.

7. Ezt SCHRÖDINGER bizonyította be. *Ann. Physik* [4] 79 (1926).

8. *Z. Physik* 37 (1926).

9. Lásd a 2. jegyzetben említett cikkeket. SCHRÖDINGER cikkeit könyv alakban is kiadták: *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, Leipzig, 1928.

10. A mai helyzet a következő: az elmélet, amennyiben azt különálló elektronokra, atomok és molekulák elektronhéjaira alkalmazzuk, tökéletesen sikeres, és még akkor is, amikor elektrosztatikus erők hatása alatt álló elektronokra, vagy a fény keletkezésére és átalakulására vonatkozó elektromágneses folyamatokra alkalmazzuk. Másrészt az atommag problémáinál és az elektromágnesség átfogó relativisztikus elméletének megteremtésére vonatkozó erőfeszítéseknél az említésre méltó részleges sikerek ellenére is az elmélet komoly nehézségekhez vezet, ezeket — úgy tűnik — nem lehet gyökeresen új gondolatok bevezetése nélkül megoldani.

11. A mozgást — amint az jól ismert — a klasszikus mechanika szerint a *Hamilton-függvény* szabja meg, amelyekből a

$$\dot{q}_l = \frac{\partial H}{\partial p_l}, \quad \dot{p}_l = -\frac{\partial H}{\partial q_l} \quad (l=1, \dots, k)$$

mozgásegyenletek következnek. A kvantumelmélet felfedezése előtt az volt a törekvés, hogy eme egyenletek megoldása mellett kiegészítő kvantumfeltételeket fogalmazzanak meg (lásd a 6. jegyzetet). A $t=0$ időben adott tetszőleges $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$ rendszerhez a mozgásegyenletek meghatározzák az időfüggést, más szóval a pályát a $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$, $2k$ -dimenziós fázissterében. Minden további feltétel azt jelenti tehát, hogy a lehetséges kezdeti értékeket, vagyis a pályákat, bizonyos diszkrét

halmazra kell korlátozni. (Ekkor a megengedhető pályáknak megfelelően a lehetséges energiaszintek száma is kisebb lesz.) Noha a kvantummechanika e módszerrel teljes kátyúba torkollott, mégis világos, hogy a *Hamilton*-függvénynek fontos szerepet kell benne játszania. Valóban széles körű tapasztalat bizonyítja, hogy a *Bohr*-féle korrespondenciaelv igaz. Ez azt állítja, hogy a kvantummechanika eredményeinek a klasszikus mechanika eredményeivel meg kell egyezniük a nagy kvantumszámok határesetében.

12. E három utóbbi fogalom a főleg N. BOHR által kidolgozott régi kvantumelméletből származik. Később ezeket a kvantummechanika szempontjából is elemezni fogjuk. (Lásd a III. 6. fejezetben tárgyalt *Dirac*-féle sugárzáselméletet.) Történelmi fejlődésük BOHRnak az atom szerkezetéről 1913-tól 1916-ig írott cikkeiben követhető nyomon.

13. Részletesebb matematikai vizsgálat azt mutatja, hogy ez szükségképpen a végtelen mátrixokra vonatkozó probléma. Az ilyen mátrixok tulajdonságait később úgyis részletesen megvizsgáljuk, így most a részletekbe nem megyünk bele. Egyelőre elég annyi, hogy az ilyen mátrixokkal a formális algebrai számolásokat az ismert mátrixösszeadási és szorzási szabályok értelmében kell elvégezni. A 0 és 1 a zérus-, illetőleg az egységmátrixot jelenti (az előbbinek minden eleme azonosan zérus, az utóbbinak csak a fődiagonálisában állnak egységek, a többi eleme zérus).

14. Ha Q_1, P_1 hermitikus, akkor sem $Q_1 P_1$, sem pedig $P_1 Q_1$ nem feltétlenül az, azonban $\frac{1}{2}(Q_1 P_1 + P_1 Q_1)$ mindig hermitikus. A $Q_1^2 P_1$ esetében még $\frac{1}{2}(Q_1^2 P_1 + P_1 Q_1^2)$ és $Q_1 P_1 Q_1$ is megvizsgálendő, bár e két utóbbi a $P_1 Q_1 - Q_1 P_1 = \frac{h}{2\pi i} \cdot 1$ miatt egyenlő. A $Q_1^2 P_1^2$ esetében tekintetbe kell még venni az $\frac{1}{2}(Q_1^2 P_1^2 + P_1^2 Q_1^2)$, $Q_1 P_1^2 Q_1$, $P_1 Q_1^2 P_1$, ... stb. kifejezéseket is (ezek a fenti esetben nem mind esnek egybe). Ezt most nem vizsgáljuk tovább, mert a később kidolgozandó operátorkalkulus segítségével ez úgyis áttekinthetőbb lesz.

15. Fennáll ugyanis

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} (q_1 \psi) = q_1 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \psi + \frac{h}{2\pi i} \psi.$$

Következésképpen:

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \cdot q_1 - q_1 \cdot \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} = \frac{h}{2\pi i} \cdot 1,$$

ahol 1 az azonosság operátora ($\psi \rightarrow \psi$ -be viszi át), vagyis $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}$ és q_1 ugyanazt a felcserélési összefüggést követi, mint a P_1 és a Q_1 mátrix.

16. Lásd a 9. jegyzetben említett könyvének első két cikkét (és még *Ann. Phys* [4] 79 (1926)).

17. Lásd *SCHRÖDINGER*nek a 16. jegyzetben említett első munkáit. A spektrum és részeinek első pontos definícióját a II. 6.—II. 9. fejezetek tartalmazzák.

18. A mátrixmechanika eredeti keretei közt (lásd korábban) az ilyen általános állapotfogalom, melynek a stacionárius állapot speciális esete, nem szerepel. Csak az energia sajátértéke szerint rendezett stacionárius állapotokkal foglalkozott az elmélet.

19. A $H = H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ tartalmazhatja a t időt is. Ilyenkor természetesen általában egyáltalán nincsenek stacionárius állapotok.

20. Ha csak diszkrét spektrum van. Lásd a II. 6. fejezetet.

21. Ezek csak úgy, mint a következő sorfejtések, „átlagban” konvergálnak. Erre a II. 2. fejezetben még visszatérünk.

22. Hogy ilyen oszcillációk a stacionárius állapotokban és csak ezekben nem fordulnak elő, volt BOHR egyik legfontosabb alapfeltevése 1913-ban. A klasszikus elektrodinamika ennek ellentmond!

23. Lásd *SCHRÖDINGER*nek a 16. jegyzetben említett második munkáját.

24. Lásd a 7. jegyzetet.

25. Lásd BOHRnak és JORDANNak az 1. jegyzetben említett könyvéből a 20. és a 23. paragrafust.

26. Mert

$$S^{-1} \cdot 1 \cdot S = 1, \quad S^{-1} \cdot aA \cdot S = a \cdot S^{-1}AS,$$

$$S^{-1} \cdot (A + B) \cdot S = S^{-1}AS + S^{-1}BS,$$

$$S^{-1} \cdot AB \cdot S = S^{-1}AS \cdot S^{-1}BS,$$

bármely $P(A, B, \dots)$ mátrixpolinomra fennáll

$$S^{-1}P(A, B, \dots)S = P(S^{-1}AS, S^{-1}BS, \dots).$$

A felcserélési összefüggések invarianciája belátható tehát, ha P -nek eme összefüggések bal oldalát választjuk. Ha P a H mátrix, akkor $S^{-1}HS = H$.

27. A $\delta_{\mu\nu}$ a jól ismert *Kronecker*-delta:

$$\delta_{\mu\nu} = \begin{cases} 1, & \text{ha } \mu = \nu, \\ 0, & \text{különben.} \end{cases}$$

28. Az S -nek $S_{1\rho}, S_{2\rho}, \dots$ oszlopai (ahol $w_\rho = \lambda$) a megoldások teljes rendszerét alkotják, s mivel ezek invertálható mátrix oszlopai, azért lineárisan függetlenek egymástól.

29. Mivel S oszlopainak és ennek megfelelően S^{-1} sorainak permutációjakor H diagonális elemei is ugyanúgy permutálódnak, a w_1, w_2, \dots sorrendje valóban határozatlan.

30. Az integrálegyenletek elmélete határozott alakot FREDHOLM és HILBERT munkásságával öltött. Kimerítő tárgyalás teljes hivatkozáslistával COURANT és HILBERT: *Methoden der Mathematischen Physik* (Berlin, 1931) című könyvében található.

31. Pontosabban, ha alapul a *Lebesgue*-féle integrálfogalmat vesszük, akkor $q \leq 0$ esetén $h(q) = 0$, kivéve egy zérus mértékű halmazt, tehát ezen kívül $h(q)$ azonosan zérus.

32. A $\delta(q)$ görbe alatti tartományt végtelenül keskenynek és végtelenül magasnak kell tekinteni a $q = 0$ pontnál és e terület egységnyi. Ezt úgy is fel lehetne fogni, mint a

$$\sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-aq^2}$$

görbét, amint $a \rightarrow +\infty$. Ez azonban mégsem lehetséges.

33. Ilyen egységesítésre jóval a kvantummechanika előtt már E. H. MOORE is vállalkozott. Tőle ered az úgynevezett „általános analízis”. Lásd erről HELLINGER és TOEPLITZ cikkét, *Math. Enzyklopädie*, vol. II. C. 13, Leipzig, 1927.

34. Ismételten hangsúlyozzuk, hogy a *Schrödinger*-féle elméletben a φ hullámfüggvényre csak az

$$\int_{\Omega} \dots \int |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1, \dots, dq_k$$

véges voltát követeljük meg. Így φ például lehet szinguláris, esetleg végtelenné is válhat, ha a fenti integrál véges marad. Erre az esetre példa a hidrogénatom DIRAC relativisztikus elméletében. Lásd *Proc. Roy. Soc.* 117 (1928); és W. GORDON, *Z. Physik* 48 (1928).

35. A *Hilbert*-térre vonatkozó vizsgálataink során megadjuk e tétel egyik bizonyítását (lásd a II. 2. és II. 3. fejezetet és az 5. Tételt a II. fejezetben). Érdeemes megjegyezni, hogy e tétel sok esetben elegendő és könnyebben bizonyítható része az, hogy F_{Ω} az F_Z -nek bizonyos részével izomorf. Ez HILBERTTŐL ered (Gött. Nachr., 1906). Így SCHRÖDINGER eredeti ekvivalencia-bizonyítása is a tétel e részének felel meg.

36. Igaz ugyanis, hogy

$$q_m \cdot q_n \cdot \varphi(q_1, \dots, q_k) = q_n \cdot q_m \cdot \varphi(q_1, \dots, q_k),$$

$$\frac{\partial}{\partial q_m} \frac{\partial}{\partial q_n} \varphi(q_1, \dots, q_k) = \frac{\partial}{\partial q_n} \frac{\partial}{\partial q_m} \varphi(q_1, \dots, q_k),$$

$$\frac{\partial}{\partial q_m} q_n \cdot \varphi(q_1, \dots, q_k) - q_n \cdot \frac{\partial}{\partial q_m} \varphi(q_1, \dots, q_k) = \begin{cases} 0 & m \neq n, \\ \varphi(q_1, \dots, q_k), & \text{ha } m = n, \end{cases}$$

amiből a kívánt operátorösszefüggések közvetlenül kiadódnak.

37. Először WEYL jellemezte \mathfrak{R}_n -et az A., B. és $C^{(n)}$ kikötésekkel (lásd „Raum, Zeit, Materie”, Berlin, 1921). Ha \mathfrak{R}_n helyett \mathfrak{R}_∞ -t akarunk kapni, akkor $C^{(n)}$ -et természetesen $C^{(\infty)}$ -nel kell helyettesíteni. Ebben és csak ebben az esetben válik D. és E. szükségessé. Lásd későbbi vizsgálatainkat.

38. Az origón, tehát \mathfrak{R} zérusvektorán kívül szerepel még a 0 szám is, tehát ugyanazzal a szimbólummal két dolgot is jelölünk. Az összefüggések azonban olyanok, hogy félreértés nem eshet.

39. Elég lenne azt megkövetelni, hogy f -fel és g -vel együtt af és $f+g$ is tartozzék \mathfrak{M} -hez. Ekkor, ha f_1, \dots, f_k az \mathfrak{M} eleme, akkor $a_1 f_1, \dots, a_k f_k$ is az, és egymás után okoskodva belátható, hogy $a_1 f_1 + a_2 f_2, a_1 f_1 + a_2 f_2 + a_3 f_3, \dots, a_1 f_1 + \dots + a_k f_k$ is eleme \mathfrak{M} -nek.

40. Az (f, f) valós szám a hermitikus szimmetria miatt: ha $f = g$, akkor $(f, f) = \overline{(f, f)}$.

41. Ha f komponense x_1, \dots, x_n , akkor a II. 1. fejezet γ pontja szerint (véges számú komponensre korlátozódva):

$$\sqrt{(f, f)} = \sqrt{\sum_{v=1}^n |x_v|^2},$$

ami a szokásos euklideszi hosszúság.

42. Mivel (f, f) valós és nemnegatív, azért $\|f\|$ is valós és a pozitív négyzetgyököt választjuk. Ugyanez igaz $\|f - g\|$ -ra is.

43. A 2. Tétel szerint (ezt $f - g$ -re és $g - h$ -ra alkalmazzuk) $f - g = 0$, vagyis $g = f$; vagy $g - h = 0$, vagyis $g = h$; vagy pedig $g - h = c(f - g)$ (c valós és > 0), vagyis

$$g = \frac{c}{c+1} f + \frac{1}{c+1} h,$$

más szóval: $g = af + (1-a)h$, ahol a értéke rendre

$$1, 0, \frac{c}{c+1}.$$

Geometriai nyelven ez azt jelenti: g kollineáris f -fel és h -val.

44. A határpont következő definíciója is hasznos: tetszőleges $\varepsilon > 0$ -hoz létezzék \mathfrak{A} -nak oly f' eleme, amelyre $\|f - f'\| < \varepsilon$. A két definíció egyenértékűségét a közönséges analízis módszerével lehet bebizonyítani.

45. A rövideg kedvéért a topológiai kifejezést használjuk (lásd HAUSDORFF: Mengenlehre, Berlin, 1927). Később ezt majd részletesebben is megmagyarázzuk.

46. Valóban,

$$\|f\| = \sqrt{(f, f)} = 1.$$

47. Amint látjuk, a teljes ortonormált rendszer megfelelője \mathfrak{R}_n -ben a Descartes-féle koordináta-rendszer (ebben a tengelyek irányába mutatnak az egységvektorok).

48. Mint lineáris sokaság ez $\{\mathfrak{A}\}$ -t szükségképpen tartalmazza, s mivel zárt, tartalmaznia kell $\{\mathfrak{A}\}$ határpontjait is.

49. Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes. Ekkor $\varphi_2, \varphi_3, \dots$ nem teljes, azonban még mindig végtelen rendszer.

50. Emlékeztetünk arra, hogy a g_{mn} kettős sor ($m, n = 1, 2, \dots$) egyszerű sorként is felírható: $g_{11}, g_{12}, g_{21}, g_{13}, g_{22}, g_{31}, \dots$

51. Ez a szakasz a későbbiek megértéséhez nem szükséges.

52. Lásd például CARATHÉODORY: Vorlesungen über reelle Funktionen, Leipzig, 1927 (különösen a 237—274. oldalt) és KAMKE: Das Lebesguesche Integral, Leipzig, 1925.

53. Általában igaz, hogy

$$|x + y|^2 = (x + y)(\bar{x} + \bar{y}) = x\bar{x} + y\bar{y} + (x\bar{y} + \bar{x}y) = |x|^2 + |y|^2 + 2 \operatorname{Re}(x\bar{y}).$$

54. Ez a Lebesgue-integrál elméletében szokásos.

55. Noha α folytonosan változik, ez összeg és nem integrál, hiszen az α -knak csak egy sorozata szerepel benne.

56. Az $(x(\alpha), y(\alpha))$ definíciója természetesen a következő:

$$(x(\alpha), y(\alpha)) = \sum_{\alpha} x(\alpha)\overline{y(\alpha)}.$$

57. Ez a kontinuum nem megszámlálhatóságának halmazelméleti tétele. Lásd például HAUSDORFFnak a 45. jegyzetben említett könyvét.

58. Legyen \mathfrak{R}_∞ például F_Ω , ahol Ω a valós x -ek tere ($-\infty < x < +\infty$), a $\frac{d}{dx}$ függvényt függvénybe képez le, tehát operátor, de a mi elképzeléseink szerint csak olyan $f(x)$ -ekre van értelmezve, amelyek először is differenciálhatók, másodsor pedig amelyekre az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d}{dx} f(x) \right|^2 dx$$

véges (lásd a II. 8. fejezetet, ahol ezt részletesebben megvizsgáljuk). Természetesen

$$\frac{d^2}{dx^2} f(x)\text{-nek}$$

általában nem kell léteznie és az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d^2}{dx^2} f(x) \right|^2 dx$$

nem feltétlenül véges. Erre példa az

$$f(x) = |x|^{3/2} e^{-x^2}$$

függvény.

59. A II. 3. fejezetben az E. feltétel vizsgálata szerint elég, ha a következő típusú függvények összes lineáris kombinációját tudjuk közelíteni; $f(x) = 1$ véges számú intervallumban és 0 egyebütt. Világos, hogy az is elég, ha külön minden ilyen függvényt tudunk közelíteni, s ez biztosan lehetséges, ha közelíteni tudjuk az olyan függvényt, amely csak egyetlen intervallumban egy és egyebütt zérus (ez előbbiek ugyanis az utóbbi függvények összegei). Legyen az intervallum például a $a < x < b$. Az

$$f(x) = 0, \text{ ha } x < a - \varepsilon, \text{ vagy } x > b + \varepsilon,$$

$$f(x) = \cos \frac{2\pi}{\varepsilon} \frac{a-x}{\varepsilon}, \text{ ha } a - \varepsilon \leq x \leq a,$$

$$f(x) = 1, \text{ ha } a < x < b,$$

$$f(x) = \cos \frac{2\pi}{\varepsilon} \frac{x-b}{\varepsilon}, \text{ ha } b \leq x \leq b + \varepsilon$$

függvény teljesíti regularitási követelményeinket és az adott függvényt megfelelően kicsiny ε mellett tetszőlegesen jól megközelíti.

60. E megközelítés nem szigorú, hiszen a linearitást végtelen összegek esetén használja fel. A következő módon azonban azzá tehető: Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszer és az A, A^* operátor egymásnak adjungáltja. Legyen

$$f = \sum_{v=1}^{\infty} x_v \varphi_v, \quad Af = \sum_{v=1}^{\infty} y_v \varphi_v.$$

Ekkor

$$y_\mu = (Af, \varphi_\mu) = (f, A^* \varphi_\mu) = \sum_{v=1}^{\infty} (f, \varphi_v) \overline{(A^* \varphi_\mu, \varphi_v)},$$

és a 7. Tétel γ) pontja szerint:

$$y_\mu = \sum_{v=1}^{\infty} x_v \overline{(A \varphi_v, \varphi_\mu)} = \sum_{v=1}^{\infty} (A \varphi_v, \varphi_\mu) x_v.$$

Legyen most már $a_{\mu\nu} = (A\varphi_\nu, \varphi_\mu)$, s így a fenti

$$y_\mu = \sum_{\nu=1}^{\infty} a_{\mu\nu} x_\nu$$

képletet kapjuk, s az abszolút konvergencia biztosítva van.

Az x_1, x_2, \dots sorozatok Hilbert-terében a $\varphi_1 = 1, 0, \dots; \varphi_2 = 0, 1, \dots; \dots$, sorozatok teljes ortonormált rendszert alkotnak. Ha

$$f = \{x_1, x_2, \dots\},$$

akkor

$$f = \sum_{\nu=1}^{\infty} x_\nu \varphi_\nu,$$

és ha

$$Af = \{y_1, y_2, \dots\},$$

akkor

$$Af = \sum_{\nu=1}^{\infty} y_\nu \varphi_\nu.$$

Így a fentiekkel teljes összhangba jutottunk. Ha $a_{\mu\nu}^*$ -ot képezzük az A^* -ból, akkor látható, hogy

$$a_{\mu\nu}^* = (A^*\varphi_\nu, \varphi_\mu) = (\varphi_\nu, A\varphi_\mu) = \overline{(A\varphi_\mu, \varphi_\nu)} = \overline{a_{\nu\mu}}.$$

61. Az (Af, f) mindenestre valós, hiszen

$$(Af, f) = (f, Af) = \overline{(Af, f)}.$$

62. Következésképpen U és U^* mindenütt meg van határozva és ezek egymás inverzei, ezért bármely értéket csak egyszer vehetnek fel.

63. Adott

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(q)|^2 dq$$

mellett mind az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} q^2 |\varphi(q)|^2 dq,$$

mind pedig az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d}{dq} \varphi(q) \right|^2 dq$$

tetszőlegesen nagy lehet. Legyen például a

$$\varphi(q) = ae^{-bq^2}.$$

A három integrál véges ($b > 0$), azonban rendre az

$$a^2 b^{-1/2}, \quad a^2 b^{-3/2}, \quad a^2 b^{1/2}$$

mennyiséggel arányos, tehát bármelyik kettő értéke tetszőleges.

64. Gött. Nachr., 1906.

65. Az R hermitikus volta lényeges a levezetésben, harmadik lépésben ugyanis:

$$\left(R \frac{f+g}{2}, \frac{f+g}{2} \right) - \left(R \frac{f-g}{2}, \frac{f-g}{2} \right) = \frac{(Rf, g) + (Rg, f)}{2} + \frac{(Rf, g) + (f, Rg)}{2}.$$

66. Lásd a 9. jegyzetben említett könyv harmadik cikkét (Ann. Phys. [4] 80 (1926)).

67. Szándékosan nem foglalkoztunk a konvergencia finomabb kérdéseivel. E kérdéseket a mátrix- és hullámelmélet eredeti formájában sem kezelték szigorúan és mi is csak később intézzük el őket (lásd például a II. 9. fejezetet).

68. Az utóbbi csak folytonos és mindenütt meghatározott H esetén világos minden további megjegyzés nélkül. Ilyen H -ra a $Hf_n \rightarrow Hf$ az $f_n \rightarrow f$ következménye. A következő gyengébb tulajdonság ugyancsak következmény: $f_n \rightarrow f$, $Hf_n \rightarrow f^*$ következtében $Hf = f^*$ (ez H úgynevezett lezárása, lásd a szerző munkáját, Math. Ann. 102 (1929)). Ezt a kvantummechanika minden operátora kielégíti még akkor is, ha nem folytonos. A nem zárt hermitikus operátor zárttá (és hermitikussá) tehető értelmezési tartományának egyértelmű kiterjesztésével (például a folytonosság esetén ez nem tehető meg). Lásd a II. 9. fejezetet és a 148. jegyzetet.

69. Lásd például SCHRÖDINGER munkáját a hidrogénatomról a 16. jegyzetben említett hivatkozásban.

70. Lásd a 64. jegyzetben említett hivatkozást.

71. Lásd COURANT és HILBERT említett munkáját a 30. jegyzetben.

72. Más szóval

$$E(l) = (e_{\mu\nu}(l)), \quad E(l, \zeta, \eta) = \sum_{\mu, \nu=1}^n e_{\mu\nu}(l) \zeta_\nu \bar{\eta}_\mu.$$

Következésképpen

$$e_{\mu\nu}(l) = \sum_{\lambda_\rho \leq l} x_{\rho\mu} \bar{x}_{\rho\nu}.$$

73. A *Stieltjes*-integrált illetően lásd PERRON: Die Lehre von den Kettenbrüchen, Leipzig, 1913; ami pedig az operátorelmélet különleges vonatkozásait illeti, CARLEMAN: Équations intégrales singulières, Upsala, 1923. Az ilyesmi iránt kevésbé érdeklődő olvasónak elégséges a következő definíció: az a, b intervallum

$$a \leq \Lambda_0 < \Lambda_1 < \dots < \Lambda_k \leq b$$

felosztására képezzük a következő összeget:

$$\sum_{\tau=1}^k f(\Lambda_\tau)(g(\Lambda_\tau) - g(\Lambda_{\tau-1})).$$

Ha ez konvergens, amint a felosztást tetszőleges módon finomítjuk, akkor határértéke a *Stieltjes*-integrál, amit így jelölünk:

$$\int_a^b f(x) dg(x)$$

($g(x) = x$ esetén ez a jól ismert *Riemann*-integrálba megy át).

Esetünkben tehát a levezetett egyenlet azt jelenti, hogy

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x dE(x; \zeta, \eta)$$

létezik (x helyett λ -val jelöltük ott a változót) és a következővel egyenlő:

$$\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \zeta_\nu \bar{\eta}_\mu.$$

74. Min (a, b, \dots, e) a legkisebb, Max (a, b, \dots, e) a legnagyobb a véges számú a, b, \dots, e valós szám közül.

75. Lásd a 64. jegyzet hivatkozását és CARLEMANNAK a 73. jegyzetben említett könyvét. Ezzel a folytonos spektrummal még sok dolgunk lesz, lásd a II. 8. fejezetet.

76. Az $A(\lambda) \rightarrow B$ ($A(\lambda)$ és B operátor \mathfrak{R}_∞ -ben, λ valamennyi paraméter) azt jelenti, hogy \mathfrak{R}_∞ -nek bármely f elemére $A(\lambda)f \rightarrow Bf$, ez tehát a *Hilbert*-tér konvergencia állításának rövidítése.

77. Ez a *Stieltjes*-integrálnak a 73. jegyzetben megadott definíciójából következik. A bizonyítást lásd az ott említett hivatkozásban.

78. Lásd Math. Ann. 102 (1929).

79. Ezt csak λ sorozatokra mutattuk meg. Ám a határértéknek minden λ sorozatra ($\lambda \rightarrow \lambda_0$ és $\lambda < \lambda_0$ vagy $\lambda > \lambda_0$) ugyanannak kell lennie, hiszen két ilyen sorozat egyesíthető és mivel ennek van határértéke,

az összetevőknek is kell, hogy ugyanez legyen a határértéke. Ebből következik, hogy (valamennyi λ sorozat közös határértékéhez) a konvergencia λ folytonos változásánál is fennáll.

80. Ez $E(\lambda; \xi, \eta)$ II. 7. fejezetben megadott definíciójának pontos átfogalmazása.

81. A 10. Tétel bizonyítása szerint

$$P_{[\varphi]}f = (f, \varphi) \cdot \varphi, \quad (\text{ha } \|\varphi\| = 1),$$

így

$$\|P_{[\varphi]}f\| = |(f, \varphi)| = |(P_{[\varphi]}f)|.$$

82. A 7. Tétel szerint

$$f = \sum_{\rho} (f, \varphi_{\rho}) \cdot \varphi_{\rho} = \sum_{\rho} P_{[\varphi_{\rho}]}f.$$

Ez a II. 4. fejezet megfontolásaiból is következik.

83. A 73. jegyzet alapján

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\left(\sum_{\lambda_{\rho} \leq \lambda} |x_{\rho}|^2\right) = \lim_{\tau} \sum_{\tau=1}^k \Lambda_{\tau}^2 \sum_{\Lambda_{\tau-1} < \lambda_{\rho} \leq \Lambda_{\tau}} |x_{\rho}|^2.$$

Ha $\Lambda_{\tau}^2 - \Lambda_{\tau-1}^2$, mindig kisebb, mint ε (vagyis a $\Lambda_0, \dots, \Lambda_k$ felosztás elég finom), akkor ennek ingadozása kisebb, mint

$$\varepsilon \sum_{\rho=1}^{\infty} |x_{\rho}|^2 = \varepsilon \|f\|^2.$$

Felhasználva, hogy

$$\sum_{\tau=1}^k \sum_{\Lambda_{\tau-1} < \lambda_{\rho} \leq \Lambda_{\tau}} \lambda_{\rho}^2 |x_{\rho}|^2 = \sum_{\Lambda_0 < \lambda_{\rho} \leq \Lambda_k} \lambda_{\rho}^2 |x_{\rho}|^2,$$

ha Λ_0 elég kicsiny és Λ_k elég nagy, akkor az integrál értéke a

$$\sum_{\rho=1}^{\infty} \lambda_{\rho}^2 |x_{\rho}|^2$$

összegetől tetszőlegesen kevéssé tér el. A következő integrálképlet ugyanígy bizonyítható.

84. E ponton az általunk követett korrek matematikai módszer eltér DIRAC szimbolikus módszerétől (lásd az 1. jegyzetben említett könyvét). Az utóbbi lényege az, hogy f a $(q - \lambda)f(g) = 0$ megoldásának tekintendő (egyszerűség kedvéért legyen $l = j = 1, g_j = q$). Mivel azonban minden

$$(f, g) = \int f(q) \overline{g(q)} dq = 0$$

és $f \neq 0, f(q)$ a $g = \lambda$ pontban végtelen (csak itt különbözik zérustól) és olyan erősen végtelen, hogy $(f, g) \neq 0$. Mivel $q \neq \lambda$ esetén

$$\int f(q) \overline{g(q)} dq$$

csak $\overline{g(\lambda)}$ -tól függhet, s világos, hogy additív tulajdonsága miatt ez az integrál $\overline{g(\lambda)}$ -sal arányos, tehát $c\overline{g(\lambda)}$ -sal egyenlő, ahol c zérustól különbözik. Az $f(q) - tf(q)/c$ -vel helyettesítve azt kapjuk, hogy $c = 1$. Így olyan fiktív $f(q)$ függvényt kapunk, amelyre

$$\int f(q) \overline{g(q)} dq = \overline{g(\lambda)}.$$

Természetesen elegendő a $\lambda = 0$ esetet tekinteni. Az $f(q) = \delta(q)$ jelöléssel a következő definíciót kapjuk:

$$\Delta. \quad q\delta(q) = 0, \quad \int \delta(q)f(q) dq = f(0).$$

Tetszőleges λ -ra a megoldás $\delta(q - \lambda)$. Noha olyan δ -függvény, amely a Δ . tulajdonságokkal rendelkezik, nem létezik, léteznek olyan függvénysorozatok, amelyek ilyen jellegű függvényhez konvergálnak (noha a határfüggvény nem létezik). Például

$$f_\varepsilon(x) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon}, & \text{ha } |x| < \varepsilon, \\ 0, & \text{ha } |x| \geq \varepsilon, \end{cases} \quad \varepsilon \rightarrow +0,$$

vagy

$$f_a(x) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-ax^2}, \quad \text{ha } a \rightarrow +\infty.$$

(lásd még az I. 3. fejezetet és a 32. jegyzetet).

85. E gondolat (melyet itt csak heurisztikus állításnak tekintünk) pontos megfogalmazása megtalálható HELLINGER (J. f. Math., 136 (1909)) és WEYL (Math. Ann. 68 (1910)) cikkeiben.

86. E szempontot és használatát a kvantummechanikában csak a fizikai alkalmazás sikere igazolhatja.

87. PLANCHEREL: Circ. Math. di Pal. 30 (1910), TITCHMARSH: Lond. Math. Soc. Proc. 22 (1924).

88. Más szóval $E'(\lambda)$ nem magához az

$$A' = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$$

operátorhoz tartozik, hanem egy olyanhoz, amelynek értelmezési tartománya A' -ét tartalmazza és A' értelmezési tartományán vele megegyezik. Lásd a II. 9. fejezet idevágó okfejtését.

89. Az összes Fourier-együttható eltűnik, tehát maga a függvény is zérus. Lásd például COURANT és HILBERT művét (30. jegyzet).

90. Az valóban igaz, hogy $M^{-1}Mf(q) = f(q)$ (elegendő $q < 0$ esetén $f(q) = 0$ teljesülését kironi és korábbi tételeket felhasználni), az azonban nem mindig igaz, hogy $MM^{-1}F(p) = F(p)$, mert általában $\|M^{-1}F\| < \|F\|$, így $\|MM^{-1}F\| = \|F\|$. Következésképpen $M^{-1}M = 1$, $MM^{-1} \neq 1$, vagyis M^{-1} nem M igazi reciproka. (Másik biztosan nem létezik, mert ha volna, akkor $M^{-1}M = 1$ miatt M^{-1} -gyel kellene egyenlőnek lennie). Ennek következtében

$$E'^2(\lambda) = E'(\lambda)$$

igaz marad, ha $E'(\lambda) = ME(\lambda)M^{-1}$, mert ebben csak $M^{-1}M$ szerepel, ám

$$E'(\lambda) \rightarrow MM^{-1} \neq 1, \quad \text{ha } \lambda \rightarrow +\infty.$$

91. Valójában ezt nem szimbolikusan a pontos

$$(Af, g) = \int \lambda d(E(\lambda)f, g)$$

egyenlettel a következőképpen kell bizonyítani:

$$\begin{aligned} (AFf, g) &= \int \lambda d(E(\lambda)Ff, g) = \int \lambda d(FE(\lambda)f, g) = \\ &= \int \lambda d(E(\lambda)f, Fg) = (Af, Eg) = (FAf, g), \end{aligned}$$

ebből következik, hogy $AF \equiv FA$.

92. Ez az

$$\int f(\lambda) d(\int g(\lambda') dh(\lambda')) = \int f(\lambda) g(\lambda) dh(\lambda)$$

egyenletből következik, mely általában igaz a Stieltjes-integrálra. Ez az egyenlet minden magyarázat nélkül világos, mert d és \int között reciprok viszony van. A szerző ennek szigorú bizonyítását adta: Annals of Mathematics 32 (1931).

93. Vagyis

$$\begin{aligned} (Bf, g) &= \int_{-\infty}^{+\infty} r(\lambda) d(E(\lambda)f, g), \\ (Cf, g) &= \int_{-\infty}^{+\infty} s(\lambda) d(E(\lambda)f, g). \end{aligned}$$

94. E függvényfogalom precíz megalapozását a szerző adta meg (Annals of Math. 32 (1931)). RIESZ-FRIGYES definiált először általános operátorfüggvényt polinomokra alkalmazott határátmenettel.

95. A korlátos operátorok Hilbert-féle elmélete mellett a nem korlátos operátorok elméletére is hivatkozunk a következőkben. Ezt a szerző dolgozta ki (lásd a 78. jegyzet hivatkozását). M. STONE (Proc. Mat. Ac., 1929 és 1930) tőle függetlenül hasonló eredményekre jutott.

96. Math. Ann. 69 (1911).

97. Még a $-\infty < q < \infty$ intervallumban analitikus $f(q)$ függvények $\left(\int_{-\infty}^{+\infty} |f(q)|^2 dq, \int_{-\infty}^{+\infty} |f'(q)|^2 dq \text{ véges} \right)$ is mindenütt sűrűek \mathfrak{R}_∞ -ben. Valóban, a II. 3. fejezet D. pontja folytán

$$f_{a,b}(q) = \begin{cases} 1, & \text{ha } a < q < b, \\ 0, & \text{különben} \end{cases}$$

lineáris kombinációi mindenütt sűrűek. Ezért elég ezeket tetszőlegesen megközelíteni a fenti $f(q)$ -kkel. Például

$$f_{a,b}^{(\varepsilon)}(q) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{(x-a)(x-b)}{\varepsilon} = \frac{1}{e^{2 \frac{(x-a)(x-b)}{\varepsilon}} + 1}$$

ilyen, ez $f_{a,b}(q)$ -hoz tart, ha $\varepsilon \rightarrow +0$.

98. Megint elég az $f_{a,b}(q)$ -kat ($0 \leq a < b \leq 1$) \mathfrak{R}^0 -hoz tartozó függvényekkel közelíteni. E célra

$$f_{a,b}^{(\varepsilon)}(q) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\frac{1}{\varepsilon} \frac{(x-a-\varepsilon)(x-b+\varepsilon)}{x(1-x)} \right),$$

$\varepsilon \rightarrow +0$, megfelel.

99. Mivel $f(\lambda)$ polinomokkal közelíthető, elég polinomokat, illetőleg azok összetevőit, a hatványokat tekinteni, $f(\lambda) = \lambda^s$ ($s=0, 1, 2, \dots$). Feltehetjük, hogy A diagonális mátrix, hiszen egy unitér transzformáció itt nem számít. A diagonális elemek a $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ sajátértékek. Ekkor azt kell megmutatni, hogy A^s is diagonális és $\lambda_1^s, \lambda_2^s, \dots$ a diagonális elem; ez azonban nyilvánvaló.

100. Azt, hogy e tulajdonságok a hermitikus, illetőleg az unitér jelleg sajátosságai, csupán diagonális mátrixokra kell bebizonyítani. A $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ elemű A diagonális mátrixra A^* is diagonális, elemei $\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \dots$, ezeket transzformálással és konjugálással kapjuk, így ha $A = A^*$, akkor $\lambda_1 = \bar{\lambda}_1, \dots, \lambda_n = \bar{\lambda}_n$, tehát $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ valós. Ha $AA^* = A^*A = 1$, akkor $\lambda_1 \bar{\lambda}_1 = 1, \dots, \lambda_n \bar{\lambda}_n = 1$, vagyis $|\lambda_1| = \dots = |\lambda_n| = 1$.

101. Ennek bizonyításához lásd a szerzőnek a 78. jegyzetben idézett művét, továbbá A. WINTNER: Math. Z. 30 (1929). Az olyan

$$\int_0^1 f(\sigma) d(E(\sigma)f, g)$$

integrálok abszolút konvergenciáját, amelyben $f(\sigma)$ korlátos, a következőképpen mutatjuk meg. Elég $\operatorname{Re}(E(\sigma)f, g)$ -t tekinteni, mert ha f és g helyére if -et, illetve g -t írunk, akkor ez $\operatorname{Im}(E(\sigma)f, g)$ -be megy át. Mivel

$$\operatorname{Re}(E(\sigma)f, g) = \left(E(\sigma) \frac{f+g}{2}, \frac{f+g}{2} \right) - \left(E(\sigma) \frac{f-g}{2}, \frac{f-g}{2} \right),$$

csak $(E(\sigma)f, f)$ -t kell vizsgálni. Ám az

$$\int_0^1 f(\sigma) d(E(\sigma)f, f)$$

integrálban az integrandus korlátos és a differenciáljel mögött a függvény monoton, tehát állításunkat bebizonyítottuk.

102. A Stieltjes-integrált a számok helyett \mathfrak{R}_∞ elemeire alkalmazzuk. Minden összefüggést úgy kell érteni, hogy \mathfrak{R}_∞ egy rögzített g elemét és egy másik tetszőleges elemét véve — ennek és g -nek skalárszorzatát kell venni — érvényes relációt kapunk. Ez minden g -re igaz. A II. 7. fejezet operátorának

Stieltjes-integráljaival szemben ez félig szimbolikus eljárás, ott \mathfrak{R}_∞ egy g eleme helyett kettőt, f -et és g -t kellett \mathfrak{R}_∞ -ből tetszőlegesen kiválasztani és (\dots, g) helyett (\dots, f, g) -t kellett képezni (a pontok az operátort jelzik).

103. Itt az a hallgatólagos feltevés, hogy minden adott $F(\lambda)$ egységfelbontásra létezik ilyen operátor. Vagyis véges

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\|F(\lambda)f\|^2$$

esetén feltesszük, hogy található olyan f^* , hogy minden g -re

$$(f^*, g) = \int \lambda d(F(\lambda)f, g)$$

és hogy az ilyen f -ek mindenütt sűrűek. (Az így definiált operátor hermitikussága a \mathfrak{C}_3 következménye: az utolsó egyenletben f -et és g -t fel kell cserélni és a komplex konjugáltat venni. (E két állítás a 78. jegyzet hivatkozásában van bebizonyítva.

104. Ebből U unitér voltának, vagyis annak, hogy $\mathfrak{C} = \mathfrak{F} = \mathfrak{R}_n$, vagy \mathfrak{R}_∞ , következnie kell ahhoz, hogy A sajátértékfeladata mindig megoldható legyen. Az \mathfrak{R}_∞ esetén nem ez a helyzet, amint erre a nem maximális A -k létezéséből következtetünk. Az \mathfrak{R}_n -ben — amint az közvetlenül is látható — ez igaz. Az \mathfrak{R}_n minden lineáris sokasága zárt, így a $\varphi - U\varphi$ -ké is az, s mivel ez mindenütt sűrű, azért \mathfrak{R}_n -nel egyenlő. Az \mathfrak{C} -nek, a φ -k halmazának dimenziója nem kisebb, mint lineáris képéé, tehát a $\varphi - U\varphi$ -k halmazáé, vagyis ez is n -dimenziós. Ez \mathfrak{F} -re is igaz, mert ez \mathfrak{C} -nek egy-egy értelmű lineáris képe. Véges n -re, tehát $\mathfrak{C} = \mathfrak{F} = \mathfrak{R}_n$.

105. A szerző megmutatta (a 78. jegyzet hivatkozásában), hogy a következő operátor maximális, de nem hipermaximális: legyen \mathfrak{R}_∞ a $0 \leq q < +\infty$ -ben értelmezett ama $f(q)$ -k halmaza, melyekre

$$\int_0^\infty |f(q)|^2 dq$$

véges és legyen R az $i \frac{d}{dq}$ operátor, amely minden olyan folytonosan differenciálható $f(q)$ -ra értelmezve van, amelyre

$$\int_0^\infty |f'(q)|^2 dq$$

véges és $f(0) = 0$, és az R -t zárttá tesszük. Ez $-\frac{2\pi}{h} A'$ -vel egyenlő, ha a II. 8. fejezetben A' -t a $0, \infty$ intervallumra tekintjük. Ez az R maximális, de nem hipermaximális. Ezt \mathfrak{C} és \mathfrak{F} közvetlen kiszámításával lehet igazolni. Ez említésre méltó, hiszen $A' = \frac{h}{2\pi} R$ fizikailag a $q=0$ síkkal az egyik oldalról határolt féltérben impulzusoperátorként értelmezhető.

106. E fogalom ERHARD SCHMIDT-től ered. Lásd a 78. jegyzet hivatkozását.

107. A II. 5. fejezet alapján $R \cdot 1$ és $1 \cdot R$ akkor és csak akkor van értelmezve, ha R értelmezve van. Ugyanez érvényes $R \cdot a1$, $a1 \cdot R$ ($a \neq 0$) esetén is. E két szorzat egyenlő, vagyis R és az $a1$ felcserélhető egymással. Az R és az $a1$ tehát felcserélhető, kivéve, ha $a=0$ és R nincs mindenütt értelmezve. Ez szerencsétlen helyzet, és a felcserélhetőség definíciójának megváltoztatásáért kiált.

108. Ez az egységfelbontás — amint az könnyen igazolható — $a \cdot 1$ -hez tartozik:

$$F(\mu) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \mu \geq a, \\ 0, & \text{ha } \mu < a. \end{cases}$$

109. Két, úgynevezett teljesen folytonos A és B operátorra (lásd a 70. jegyzet hivatkozását) TOEPLITZ tételt bizonyított be (lásd a 33. jegyzet hivatkozását), melyből ez következik. (Nevezetesen az A és B közös sajátfüggvényeiből alkotott teljes ortonormált rendszer létezése.) Tetszőleges A és B , illetőleg A, B, C, \dots esetére az általános tételt a szerző bizonyította be (lásd a 94. jegyzetet).

110. Ahhoz, hogy R folytonos legyen, $\kappa_1, \kappa_2, \dots$ korlátosnak választandó (például $\kappa_m = 1/m$). Valóban,

$$\|R\psi_m\| = \|\kappa_m\psi_m\| = |\kappa_m| \leq c \|\psi_m\| = c,$$

$$|\kappa_m| < c$$

az R folytonosságából, vagyis $\|Rf\|^2 \leq c^2 \|f\|^2$ -ből azonnal következik. Fordítva, $|\kappa_m| \leq c$ ($m = 1, 2, \dots$) következtében

$$\|Rf\|^2 = \left\| \left(\sum_{m=1}^{\infty} x_m \psi_m \right) \right\|^2 = \left\| \sum_{m=1}^{\infty} x_m \kappa_m \psi_m \right\|^2 = \sum_{m=1}^{\infty} |x_m|^2 |\kappa_m|^2$$

$$\|f\|^2 = \left\| \sum_{m=1}^{\infty} x_m \psi_m \right\|^2 = \sum_{m=1}^{\infty} |x_m|^2.$$

Így $\|Rf\|^2 \leq c^2 \|f\|^2$, $\|Rf\| \leq c \|f\|$, más szóval R folytonos.

111. Eltekintve esetleg egy zérus Lebesgue-mértékű q_1, q_2 halmaztól.

112. Lásd például a 45. jegyzet hivatkozását.

113. Az $\{a_{\mu\nu}\}$ szerepel a transzformáció (tehát az operátor) helyett:

$$\eta_\mu = \sum_{\nu=1}^n a_{\mu\nu} \xi_\nu$$

($\mu = 1, \dots, n$, lásd a II. 7. fejezetet). Végrehajtva a

$$\xi_\mu = \sum_{\nu=1}^n x_{\nu\mu} v_\nu, \quad \eta_\mu = \sum_{\nu=1}^n x_{\nu\mu} r_\nu$$

$$(\mu = 1, \dots, n)$$

transzformációt, kapjuk, hogy

$$r_\mu = \sum_{\nu=1}^n a_{\mu\nu} v_\nu, \quad (\mu = 1, \dots, n),$$

ahol

$$a_{\mu\nu} = \sum_{\rho, \sigma=1}^n a_{\rho\sigma} \bar{x}_{\mu\rho} x_{\nu\sigma}, \quad (\mu, \nu = 1, 2, \dots, n)$$

a transzformált mátrix. Világos, hogy

$$\sum_{\mu=1}^n a_{\mu\mu} = \sum_{\mu, \rho, \sigma=1}^n a_{\rho\sigma} \bar{x}_{\mu\rho} x_{\mu\sigma} = \sum_{\rho, \sigma=1}^n a_{\rho\sigma} \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\mu\rho} x_{\mu\sigma} \right) = \sum_{\rho=1}^n a_{\rho\rho},$$

vagyis a spur invariáns.

114. A pontos állítás a következő: Ha A hipermaximális és definit, akkor egyetlen ugyanilyen A' létezik, amelyre $A'^2 = A$. Bebizonyítjuk a létezést. Legyen

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda)$$

az A sajátértékrepresentációja. Az A definit, így $E(\lambda)$ állandó (tehát S_1 miatt zérus), ha $\lambda < 0$. Különböző megfelelő $\lambda_1 < \lambda_2 < 0$ esetén $E(\lambda_2) - E(\lambda_1) \neq 0$, tehát van olyan f , hogy

$$(E(\lambda_2) - E(\lambda_1))f = f.$$

Ebből azonban következik, ahogy azt már többször levezettük, hogy

$$E(\lambda)f = \begin{cases} f, & \text{ha } \lambda \geq \lambda_2, \\ 0, & \text{ha } \lambda \leq \lambda_1, \end{cases}$$

így

$$(Af, f) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda)f, f) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \lambda d(E(\lambda)f, f) \leq \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \lambda_2 d(E(\lambda)f, f) = \\ = \lambda_2((E(\lambda_2) - E(\lambda_1))f, f) = \lambda_2(f, f) < 0.$$

Következésképpen

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda) = \int_0^{\infty} \lambda dE(\lambda) = \int_0^{\infty} \mu^2 dE(\mu^2)$$

és

$$A' = \int_0^{\infty} \mu dE(\mu^2)$$

a kívánt operátor.

Vegyük észre, hogy $E(\lambda) = 0$, $\lambda < 0$ esetén a definitiség következménye, s mivel a definitiség ebből következik, nyilvánvaló, hogy a spektrum pozitív volta jellemző a definitiségre.

115. Lásd a 64. jegyzet hivatkozását. A bizonyítás a következő. Legyen $\lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_n$, mindegyik $\geq \varepsilon$ vagy $\geq -\varepsilon$, $E(\lambda_0) \neq E(\lambda_1) \neq \dots \neq E(\lambda_n)$. Ekkor $E(\lambda_n) - E(\lambda_{n-1}) \neq 0$, így választható oly $\varphi_n \neq 0$, $\|\varphi_n\| = 1$, hogy

$$(E(\lambda_n) - E(\lambda_{n-1}))\varphi_n = \varphi_n.$$

Ebből következik, hogy

$$E(\lambda)\varphi = \begin{cases} \varphi_n, & \text{ha } \lambda \geq \lambda_n, \\ 0, & \text{ha } \lambda \leq \lambda_{n-1}. \end{cases}$$

A fentiek miatt $(\varphi_n, \varphi_n) = 0$, ha $\mu \neq n$, így $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ ortonormált rendszer, amely teljessé tehető: $\varphi_1, \dots, \varphi_n, \varphi_{n+1}, \dots$

Ha $v = 1, \dots, n$, akkor

$$\|A\varphi_v\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)\varphi_v\|^2 = \int_{\lambda_{v-1}}^{\lambda_v} \lambda^2 d\|E(\lambda)\varphi_v\|^2 \geq \int_{\lambda_{v-1}}^{\lambda_v} \varepsilon^2 d\|E(\lambda)\varphi_v\|^2 = \\ = \varepsilon^2 (\|E(\lambda_v)\varphi_v\|^2 - \|E(\lambda_{v-1})\varphi_v\|^2) = \varepsilon_2 \|\varphi_v\|^2 = \varepsilon^2,$$

így

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\varphi_{\mu}\|^2 \begin{cases} \geq \sum_{\mu=1}^n \|A\varphi_{\mu}\|^2 \geq n \geq \varepsilon^2, \\ = \sum(A) = C^2, \end{cases}$$

vagyis $n \leq \frac{C^2}{\varepsilon^2}$, ha tehát $|\lambda| \geq \varepsilon$, $E(\lambda)$ csak $2C^2/\varepsilon^2$ -nél kevesebb különböző értéket vehet fel, így csak véges számú helyen változhat. A $|\lambda| \geq \varepsilon$ esetén tehát csak diszkrét spektrum van. Mivel ez tetszőlegesen pozitív ε -ra igaz, azért csak tisztán diszkrét spektrum van.

116. A megfontolások során említett eredeti cikkek mellett a legfontosabb a 33. jegyzetben említett összefoglaló HELLINGER, TOEPLITZ munka.

117. A geometriai hasonlóság alapján a φ_0 középpontú és r sugarú gömb (\mathfrak{R}_n -ben) az oly f pontok halmaza, amelyre $\|f - \varphi_0\| \leq r$, belseje a $\|f - \varphi_0\| < r$ halmaz, felszíne pedig a $\|f - \varphi_0\| = r$ halmaz. Az egységsgömb esetén $\varphi_0 = 0$, $r = 1$.

118. BORN mondta ki a φ állapotú rendszer viselkedésére az első statisztikus állításokat. Ezekkel aztán DIRAC és JORDAN foglalkozott részletesebben. Lásd a 2. és a 8. jegyzet hivatkozásait.

119. E megfeleltetésről, mely szerint minden fizikai mennyiségnek hermitikus operátor feleltethető meg, a IV. 1. fejezetben szólnunk részletesebben. Jelenleg csak annyit tudunk (az I. 2. fejezet alapján), hogy a q_1, \dots, q_k operátorok a koordinátáknak, a

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$$

operátorok az impulzusoknak, a H „energiaoperátor” pedig az energiának felel meg.

120. A gázok kinetikus elmélete eme összefüggések kitűnő illusztrációja.

Egy mól (32 g) oxigén $6 \cdot 10^{23}$ molekulát tartalmaz és minden molekula két oxigénatomból áll (ezek belső szerkezetét elhanyagoljuk, tehát három szabadsági fokú tömegpontnak tekinthetők). Egy mól tehát $2 \cdot 3 \cdot 6 \cdot 10^{23} = 36 \cdot 10^{23} = k$ szabadsági fokú mechanikai rendszer. Kauzális viselkedése $2k$ változó ismeretében meghatározható, ám a gázelmélet csak kettőt használ, a nyomást és a hőmérsékletet, ezek a $2k$ változó bonyolult függvényei.

Ily módon csak statisztikus (valószínűségi) megállapítások tehetők. Az, hogy ezek sok esetben kauzálisak, vagyis a valószínűségek vagy zérushoz vagy egyhez közeliek, nem változtat a helyzet alapvető természetén.

121. Ha az $F_t(\lambda)$ függvény függ az időtől:

$$\frac{\partial}{\partial t} F_t(\lambda) = G_t(\lambda)$$

és H hermitikus operátor, akkor

$$\frac{\partial}{\partial t} F_t(H) = G_t(H),$$

mert $\frac{\partial}{\partial t}$ kivonással, osztással és határátmenettel kapható. Ha

$$F_t(\lambda) = e^{-\frac{2\pi i}{h}(t-t_0)\lambda},$$

akkor

$$\frac{\partial}{\partial t} (e^{-\frac{2\pi i}{h}(t-t_0)H}) = -\frac{2\pi i}{h} H e^{-\frac{2\pi i}{h}(t-t_0)H},$$

amely φ -re alkalmazva a kívánt differenciálegyenletet szolgáltatja.

Mint ahogy $|F_t(\lambda)| = 1$, $F_t(\lambda)F_t(\lambda) = 1$, emiatt

$$F_t(H) \cdot [F_t(H)]^* = 1,$$

vagyis

$$F_t(H) = e^{-\frac{2\pi i}{h}(t-t_0)H}$$

unitér, és mivel $t = t_0$ esetén 1, azért

$$\varphi_{t_0} = \varphi$$

is kielegül.

122. Z. Phys. 37 (1926). Az egész további okfejtés ezen nyugszik (lásd a 2. jegyzetet).

123. Phys. Rev. 26 (1925). Lásd még W. BOTHE összefoglaló munkáját: Handbuch der Physik, Vol. 23 („Quanta”), Berlin, 1926, 3. fejezet, különösen a 73. paragrafus.

124. E gondolatok alapján BOHR, KRAMERS és SLATER dolgozta ki az elemi folyamatok statisztikus elméletét. Lásd Z. Physik 24 (1924) és a 123. jegyzet hivatkozásait. A Compton—Simons-féle kísérlet e nézőpont cáfolatának tekintendő.

125. Azt, hogy ezek az ugrások a régi Bohr-féle kvantumelmélet „kvantumugrásaival” kapcsolatban vannak, JORDAN ismerte fel (Z. Physik. 40 (1924)).

126. Az ilyen esetekben mindig feltételezzük, hogy a megfigyelt rendszer és a mérőberendezés szerkezetét — tehát például a közrejátszó erőteret — pontosan ismerjük és csak az állapotra, tehát a pillanatnyi koordinátaértékekre vagyunk kíváncsiak. Ha ezek az (idealizált) feltevések nem állják meg a helyüket, akkor természetesen a határozatlanság további forrásai is felbukkannak.

Még a nem pontos mérés leírása során is idealizálhatunk. Feltételeztük, hogy e mérés nem egyéb, mint annak abszolút biztos eldöntése, hogy valamely érték belesik-e az $I = \{\lambda', \lambda''\}$, $\lambda' < \lambda''$ intervallumba, vagy sem. Valójában a λ', λ'' határ elmosódott, s így csak bizonyos valószínűséggel lehet dönteni. Mégis a fenti leírás tűnik matematikai szempontból a legmegfelelőbbnek, legalábbis pillanatnyilag.

127. Az utóbbi állítás **P.** segítségével bizonyítható be. A II. 8. fejezet alapján képezhető az R -hez és az S -hez tartozó egységfelbontás.

128. E törvényt, mely szerint $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ operátora \mathfrak{R} és \mathfrak{S} operátorának összege, az egyszerre mérhető \mathfrak{R} és \mathfrak{S} esetében bizonyítottuk be. Lásd, amit a (IV. 1. és a IV. 2. fejezet végén mondtunk).

129. Az abszolút pontosan nem mérhető \mathfrak{R} és \mathfrak{S} (folytonos spektrumok) \mathfrak{R} -nek φ állapotán végrehajtott egyidejű mérésének részletes vizsgálatát az olvasóra bizzuk. Ez ugyanúgy hajtható végre, mint ahogy azt a III. 3. fejezetben tettük meg.

130. Az operátorszámítás a következőképpen jár el:

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 &= ((R - \rho \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = (R^2 \varphi, \varphi) - 2\rho \cdot (R\varphi, \varphi) + \rho^2 = \\ &= \|R\varphi\|^2 - 2(R\varphi, \varphi) + (R\varphi, \varphi)^2 = \|R\varphi\|^2 - (R\varphi, \varphi)^2, \end{aligned}$$

és ugyanígy η^2 -re.

131. *Z. Physik* 43 (1927). E megfontolásokat **BOHR** terjesztette ki, *Naturwiss.* 16 (1928). A következő matematikai vizsgálatra először **KENNARD** vállalkozott, *Z. Physik* 44 (1926), jelen formája **ROBERTSON**tól ered.

132. E körülmény alapvető jelentőségét **BOHR** hangsúlyozta. Lásd a 131. jegyzet hivatkozását. A további leírás egy ponton nem teljesen klasszikus: feltételezzük, hogy léteznek fénykvantumok, vagyis hogy a ν rezgésszámú fény energiacsomagjai sohasem kisebbek, mint $h\nu$.

133. A most következő gondolatmenet **HEISENBERG**től és **BORN**tól ered. Lásd a 131. jegyzet hivatkozásait.

134. Lásd például **EINSTEIN** eredeti cikkét, *Ann. Physik* 14 (1905), vagy bármely modern kézikönyvet. 135. A mikroszkóp elméletét illetően lásd például *Handbuch der Physik*, Berlin, 1927, 18. kötet, 2. G. fejezet. Nagyon pontos méréseknel ε , s így λ is nagyon kicsiny, tehát γ -sugarakat, vagy még rövidebb hullámhosszat kell használni. A normális lencse ilyen körülmények között nem jó, a használható molekuláit a γ -sugaraknak sem szétrombolni, sem helyükből kilöknöni nem szabad. Tekintve, hogy ilyen lencse molekulák vagy részecskék létezése semmilyen természettörvénynek nem mond ellent, gondolat kísérletek céljára ezek felhasználhatók.

136. Ha $mc\Delta\nu/\nu$ nagy a $h\Delta\nu/c$ -hez képest, akkor ν kicsiny az mc^2/\hbar -hoz képest, más szóval $E = h\nu$ kicsiny az mc^2 -hez képest. Azaz az L fénykvantum energiája kicsiny T relativisztikus nyugalmi tömegéhez képest. Ez a feltételezés nemrelativisztikus számolásoknál elkerülhetetlen.

137. Legyen például $F(x)$ véges, 0-tól x -ig terjedő ν_0 rezgésszámú monokromatikus hullámvonalat:

$$F(x) = \begin{cases} a \sin 2\pi\nu_0 x, & \text{ha } 0 \leq x \leq \tau, \\ 0, & \text{különben.} \end{cases}$$

(A határokon a folytonosság miatt $\sin 2\pi\nu_0\tau$ -nak el kell tűnnie, vagyis $\nu_0 = n/2\tau$, $n = 1, 2, \dots$) Ekkor a *Fourier*-integrál ismert inverziós képlete miatt (lásd a 87. jegyzet hivatkozását):

$$a_v^2 = b_v^2 + c_v^2,$$

ahol

$$\begin{aligned} \left. \begin{matrix} b_v \\ c_v \end{matrix} \right\} &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} F(x) \frac{\cos 2\pi\nu x dx}{\sin 2\pi\nu_0 x} = 2a \int_0^\tau \sin 2\pi\nu_0 x \frac{\cos 2\pi\nu x dx}{\sin 2\pi\nu_0 x} = \\ &= \pm a \int_0^\tau \left(\frac{\sin \pi(\nu + \nu_0)x}{\cos \pi(\nu + \nu_0)x} - \frac{\sin \pi(\nu - \nu_0)x}{\cos \pi(\nu - \nu_0)x} \right) dx = -a \left[\frac{\cos \pi(\nu + \nu_0)x}{\sin \pi(\nu + \nu_0)x} - \frac{\cos \pi(\nu - \nu_0)x}{\sin \pi(\nu - \nu_0)x} \right]_0^\tau = \end{aligned}$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} -a \left[\frac{(-1)^n \cos \pi v \tau - 1}{\pi(v+v_0)} - \frac{(-1)^n \cos \pi v \tau - 1}{\pi(v-v_0)} \right] \\ -a \left[\frac{(-1)^n \sin \pi v \tau}{\pi(v+v_0)} - \frac{(-1)^n \sin \pi v \tau}{\pi(v-v_0)} \right] \end{array} \right\} =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \frac{-2av_0(1 - (-1)^n \cos \pi v \tau)}{\pi(v^2 - v_0^2)}, \\ \frac{2av_0(-1)^n \sin \pi v \tau}{\pi(v^2 - v_0^2)}. \end{array} \right.$$

Így

$$a_v = \frac{2av_0 \sqrt{2 - 2(-1)^n \cos \pi v \tau}}{\pi(v^2 - v_0^2)} = \frac{4av_0 \left| \frac{\sin \frac{1}{2} \pi v \tau}{\cos \frac{1}{2} \pi v \tau} \right|}{\pi(v^2 - v_0^2)} = \frac{4av_0 |\sin \pi(v - v_0)\tau|}{\pi(v^2 - v_0^2)}.$$

Ahogy látható, a $v = v_0$ környezetébe eső rezgésszámok szerepelnek a legnagyobb súllyal, és a hullámvonulat energiájának legnagyobb része a kicsiny $\pi(v - v_0)\tau$ értékeknek megfelelő rezgésszámartományba esik. Ezért $v - v_0$ (vagy ami ugyanaz, v) szórásának nagyságrendje $1/\tau$. Az

$$\frac{\int_0^\infty a_v^2 (v - v_0)^2 dv}{\int_0^\infty a_v^2 dv}$$

kifejezést pontosan kiszámítva ugyanez az eredmény adódik.

138. Proc. Roy. Soc. 114 (1927). Lásd még WEYL, Gruppentheorie und Quantenmechanik, 2. kiadás 91. oldal, Leipzig, 1931.

139. Az érdeklődő olvasó a sugárzás elektromágneses elméletét illetően bármely kézikönyvben talál anyagot, például ABRAHAM és BECKER: Theorie der Elektrizität, Berlin, 1930. Ez a Maxwell-féle elmélethez tartozó további megfontolásainkhoz is hasznos.

140. Lásd COURANT és HILBERT: Methoden der mathematischen Physik I, 358—363. oldal. Berlin, 1924.

141. Ha $a \times b$ normális komponense H határán eltűnik ($a \times b$ az a és b külső, vagy vektori szorzata), akkor

$$[a, \text{rot } b] - [\text{rot } a, b] = \text{grad } [a \times b]$$

miatt

$$\iiint_H [a, \text{rot } b] dx dy dz = \iiint_H [\text{rot } a, b] dx dy dz.$$

Mivel $a \times b$ mind a -ra, mind pedig b -re merőleges, biztosan ez a helyzet, ha a vagy b merőleges H -ra. Minthogy $a = \text{rot } a_n$, $b = a_n$, tehát az előző eset valóban teljesül.

142. Lásd például a 138. jegyzet hivatkozását.

143. A P_v^x a Q_v^y -nal és Q_v^z -vel felcserélhető, de Q_v^x -szel nem, ezért a transzformáció jogosultságához a következő összefüggést kell igazolni (a felesleges indexeket elhagyjuk és \mathfrak{A} helyébe F -et írunk):

$$PF(Q) - F(Q)P = \frac{\hbar}{2\pi i} F'(Q),$$

ha $P = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \dots$, $Q = q \dots$. Ezt a mátrixelméletben különösen fontos összefüggést legegyszerűbben közvetlen számolással lehet igazolni.

144. Azt, hogy a k, M_1, M_2, \dots indexrendszerek összessége sorozatot alkot, a legegyszerűbben a következőképpen lehet megmutatni. Legyen $\pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots$ a 2, 3, 5, ... prímszámok sorozata. A

$$\pi_1^k \cdot \pi_2^{M_2} \cdot \pi_3^{M_3} \dots$$

szorzatok végesek, mert véges számútól eltekintve valamennyi $M_n = 0$, vagyis

$$\pi_{n+1}^{M_{n+1}} = 1.$$

Így, miközben k, M_1, M_2, \dots az indexrendszerek halmazát futja be, a fenti szorzat az 1, 2, 3 számokon fut át s minden értéket egyszer vesz fel. Így

$$\pi_1^k \cdot \pi_2^{M_2} \cdot \pi_3^{M_3} \dots$$

az $a_{kM_1M_2\dots}$ számára egyszerű futó indexet szolgáltat.

145. A fénykvantum koordinátái gyanánt például p_x, p_y, p_z impulzuskomponenseit és a polarizációs állapotát leíró π koordinátát akarjuk használni. A p_x, p_y és p_z a fénykvantum irányát, vagyis $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ ($\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2 = 1$) iránykoszinuszait és rezgésszámát, azaz a hullámhosszát, illetve az energiáját határozza meg, EINSTEIN szerint ugyanis az impulzusvektor hossza $h\nu/c$ (134. jegyzet). Így

$$p_x = \frac{h\nu}{c} \alpha_x, \quad p_y = \frac{h\nu}{c} \alpha_y, \quad p_z = \frac{h\nu}{c} \alpha_z,$$

vagyis

$$v = \frac{c}{h} \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}, \quad \lambda = \frac{c}{\nu}, \quad \text{energia} = h\nu,$$

$$\alpha_x = \frac{cp_x}{h\nu}, \quad \alpha_y = \frac{cp_y}{h\nu}, \quad \alpha_z = \frac{cp_z}{h\nu}.$$

Kicsit zavaró, hogy az $\mathfrak{U}_n(x, y, z) \cdot \gamma \cos 2\pi\rho_n(t - \tau)$ sajátrezgések állóhullámok — a tükröző falú **H** üregben más nem lehetséges — így \mathfrak{U}_n nem kapcsolható egyértelmű $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ „sugárirányhoz”. Azonnal belátható, hogy $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ mellett az ellenkező irányú $-\alpha_x, -\alpha_y, -\alpha_z$ is szerepel és ugyanez érvényes az impulzusra. Ezért **H**-ban nem a p_x, p_y, p_z és π koordinátákat kell használnunk.

Nemrég e tárgyban ezt a kényelmetlenséget a következő feltevéssel kerülték el. Legyen **H** paralelepipedon:

$$-A < x < A, \quad -B < y < B, \quad -C < z < C,$$

és az $x = \pm A, y = \pm B, z = \pm C$ határfelületeket nem tekintik tükröző falnak, hanem $x = A - t$ $x = -A - t$, $y = B - t$ $y = -B - t$, $z = C - t$ pedig $z = -C - t$ vel azonosítják, vagyis $x = A$ -ra az A, y, z pontba beeső sugárzás a $-A, y, z$ pontból ugyanolyan irányban halad tovább (**H** belseje felé), mintha mi sem történt volna. (Lásd például L. LANDAU és R. PEIERLS: Z. Physik, 62 (1930). Úgy is mondhatjuk, hogy a tér x, y, z -ben periodikus $2A, 2B$, illetve $2C$ periódussal.

Az analitikus eljárás ugyanaz, a határfeltételek azonban a következők:

$$\mathfrak{U}(A, y, z) = \mathfrak{U}(-A, y, z), \quad \mathfrak{U}(x, B, z) = \mathfrak{U}(x, -B, z), \quad \mathfrak{U}(x, y, C) = \mathfrak{U}(x, y, -C)$$

(a határon kirótt $\frac{\partial}{\partial n} \mathfrak{U} = 0$ helyett), és a kifejtéseket a

$$\cos \left[2\pi\nu(t - c(\alpha_x x + \alpha_y y + \alpha_z z)) \right]$$

elemi megoldások szerint végezzük ($\mathfrak{U}(x, y, z) \cdot \tilde{\rho}(t)$ helyett). Könnyen meghatározható a sajátmegoldásoknak megfelelő

$$v = \rho_n, \quad \alpha_x = \alpha_{n,x}, \quad \alpha_y = \alpha_{n,y},$$

$$\alpha_z = \alpha_{n,z} \quad (n = 1, 2, \dots)$$

és az elmélet további kimunkálása megegyezik a fentiekkel.

146. Az $S \rightarrow +\infty$ határártmenet különbözik az elektromágneses elmélet $N \rightarrow +\infty$ határártmenetétől. Ha ugyanis M_1, M_2, \dots a fénykvantumok száma, akkor N az inkoherens fénykvantumok [vagyis a nem ugyanolyan rezgésszámú, irányú és polarizációjú, de impulzusát együtt szolgáltató fénykvantumok (lásd a 143. jegyzetet)] száma, míg S az összes fénykvantum száma.

147. Az, hogy $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ helyett $\mathfrak{R}_\infty^{(S)}$ -et vezetjük be, a közönséges statisztikának a *Bose—Einstein*-statisztikával történő helyettesítésével egyenértékű, ha a kvantummechanikára nem hivatkozunk. Lásd DIRAC-nak a 138. jegyzetben szereplő művét.

148. Az olvasó a továbbiakat arról, hogy e „kettős természet” az egykorú irodalomban hogy fogták fel és értelmezték, például a 6. jegyzetben szereplő munkákban találhat.

Gyakran mondták, hogy a kvantummechanikában ugyanez a kettős természet bukkan elő, hiszen a diszkrét részecskéket (elektronokat és protonokat) hullámfüggvény írja le, és amikor rácson elhajlanak, akkor tipikusan hullámszerű a viselkedésük [lásd DAVISON és GERMER kísérletét *Phys. Rev.* 50 (1927), *Proc. Mat. Acad. Sci. U.S.A.* 15 (1928), C. F. THOMPSON: *Proc. Roy. Soc.* 117 (1928), RUPP: *Ann. Physik* 85 (1928)]. Ezzel szemben azonban meg kell jegyeznünk, hogy a kvantummechanikában mindkét viselkedés az elemi jelenségek elméletéből következik. A korábbi kvantumelméletben a paradox helyzet az volt, hogy két egymásnak ellentmondó elképzelés közül hol az egyikre, hol pedig a másikra kellett támaszkodni (a *Maxwell—Hertz*-féle elektromágneses sugárzáselméletre és az *Einstein*-féle fénykvantumelméletre) a tapasztalatok megmagyarázása során.

149. E differenciálegyenlet egzakt megoldását WEISSKOPF és WIGNER adta meg [*Z. Physik* 63 (1930)], s ebből a fenti állítások leolvashatók.

150. N. BOHR — amint az ismeretes — azt az alapelvet, hogy a $W^{(1)}$ energiájú stacionárius állapotból a $W^{(2)}$ energiájúba történő átmenet során az atom $(W^{(1)} - W^{(2)})/h$ ($W^{(1)} > W^{(2)}$) rezgésszámú sugárzást bocsát ki, 1913-ban mondta ki. Esetünkben a rezgésszám $(W_k - W_k)/h$.

151. Ugyanis

$$|e^{ix} - 1|^2 = (e^{ix} - 1) \overline{(e^{ix} - 1)} = (e^{ix} - 1) (e^{-ix} - 1) = 2 - e^{ix} - e^{-ix} = 2 - 2 \cos x = 2(1 - \cos x)$$

152. Azt kapjuk, hogy (lásd COURANT és HILBERT, 49. oldal)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - \cos x}{x^2} dx = 2 \int_0^{\infty} \frac{1 - \cos x}{x^2} dx = \int_0^{\infty} \frac{1 - \cos(2y)}{y} dy = 2 \int_0^{\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy = \pi.$$

153. A $Q_\mu^x, Q_\mu^y, Q_\mu^z, P_\mu^x, P_\mu^y, P_\mu^z$ mind felcserélhető P_ν^x -szel, Q_ν^x -et kivéve. Valóban,

$$P_\nu^x Q_\nu^x - Q_\nu^x P_\nu^x = \frac{h}{2\pi i} \cdot 1.$$

Igy

$$H_0 Q_\nu^x - Q_\nu^x H_0 = \frac{1}{2m_\nu} (P_\nu^x) Q_\nu^x - Q_\nu^x \frac{1}{2m_\nu} (P_\nu^x)^2 = \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{m_\nu} P_\nu^x,$$

lásd a 143. jegyzetet.

154. *Z. Physik* 18 (1917).

155. Hangsúlyozni kell a fogalmi különbséget a rendszer mint olyan és bizonyos állapotú rendszer között. A rendszerre példa a hidrogénatom, vagyis a proton és az elektron és a köztük ható ismert erők. Ezt formálisan a 6-dimenziós tér q_1, \dots, q_6 koordinátáival és a p_1, \dots, p_6 impulzuskomponensekkel írjuk le: A *Hamilton*-függvény

$$H(q_1, \dots, q_6, p_1, \dots, p_6) = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m_e} + \frac{p_4^2 + p_5^2 + p_6^2}{2m_p} + \frac{e^2}{\sqrt{(q_1 - q_4)^2 + (q_2 - q_5)^2 + (q_3 - q_6)^2}}.$$

Az állapotot még további adatok határozzák meg. A klasszikus mechanikában ez a koordináták és az impulzusok $q_1^0, \dots, q_6^0, p_1^0, \dots, p_6^0$ numerikus értékeinek felsorolásával, a kvantummechanikában a $\varphi(q_1, \dots, q_6)$ hullámfüggvény megadásával történik. Ennél többre nincs szükség, ha mind a rendszer, mind pedig annak állapota ismert, akkor az elmélet megszabta számolással minden kérdésre egyértelmű válasz adható.

156. Az ilyen, kollektívának is nevezett sokaságokra a valószínűség- és gyakoriságelméletnél van mindig szükség. Ezeket R. V. Mises vezette be, aki felismerte jelentőségüket a valószínűségi számításban, s ebből kiindulva teljes elméletet épített ki (lásd a könyvét: *Wahrscheinlichkeit, Statistik und Wahrheit*, Berlin, 1928).

157. A $w(a')$ az $a \leq a'$ valószínűsége, tehát a $-\infty, a'$ intervallum tartozik hozzá. E $w(c)$, vagy, hogy függését \mathfrak{R} -től hangsúlyozzuk, $w_{\mathfrak{R}}(a)$ tulajdonságai — amint az könnyen belátható — a következők: $w_{\mathfrak{R}}(a) \rightarrow 0$, ha $a \rightarrow -\infty$, $w_{\mathfrak{R}}(a) \rightarrow 1$, ha $a \rightarrow +\infty$. Ha $a \geq a_0$, $a \rightarrow a_0$, akkor $w_{\mathfrak{R}}(a) \rightarrow w_{\mathfrak{R}}(a_0)$, $w_{\mathfrak{R}}(a') \leq w_{\mathfrak{R}}(a'')$, ha $a' \leq a''$. (Ha a kvantummechanikában az R -hez tartozó egységfelbontás $E(\lambda)$, akkor

$$w_{\mathfrak{R}}(a) = \|E(a)\varphi\|^2 = (E(a)\varphi, \varphi).$$

Ha $w_{\mathfrak{R}}(a)$ differenciálható, akkor helyette a

$$\frac{d}{da} w_{\mathfrak{R}}(a)$$

valószínűsége-sűrűség vezethető be, ha az $a = a_0$ pontban nem folytonos (balról), akkor az $a = a_0$ pont diszkrét valószínűsége $w_{\mathfrak{R}}(a_0) - w_{\mathfrak{R}}(a_0 - 0)$. A mindig értelmes általános fogalom azonban $w_{\mathfrak{R}}(a)$. Lásd a 156. jegyzet hivatkozását.

158. Ez a nagy számok *Bernoulli*-féle törvényéből következik.

159. Az elektromos tér meghatározása során például alapvető nehézségnek tekintették, hogy az alkalmazott elektromos próbatest nem lehet az elektronnál kisebb.

160. Az a_0 diszkrét érték a következő valószínűségfüggvénynek felel meg:

$$w_{\mathfrak{R}}(a) = \begin{cases} 1, & \text{ha } a \geq a_0, \\ 0, & \text{ha } a < a_0, \end{cases}$$

ekkor és csak ekkor tűnik el az ε^2 szórásnégyzet. Az ε^2 -et és a ρ átlagos értéket így kell kiszámítani (*Stieltjes*-integrálok):

$$\begin{aligned} \rho &= \int_{-\infty}^{+\infty} a d w_{\mathfrak{R}}(a), \\ \varepsilon^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} (a - \rho) d w_{\mathfrak{R}}(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 d w_{\mathfrak{R}}(a) - 2\rho \int_{-\infty}^{+\infty} a d w_{\mathfrak{R}}(a) + \rho^2 = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 d w_{\mathfrak{R}}(a) - \rho^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 d w_{\mathfrak{R}}(a) - \left(\int_{-\infty}^{+\infty} a d w_{\mathfrak{R}}(a) \right)^2. \end{aligned}$$

(Lásd a III. 4. fejezetet és a 130. jegyzetet.)

161. Ez a több rendszeren végrehajtott független mérés esete: ugyanazon a rendszeren egymás után végrehajtott mérésekben mindig ugyanazt az eredményt kapnánk (lásd a III. 3. fejezetet).

162. Meggondolhatjuk, hogy mi történik, ha \mathfrak{R} és \mathfrak{S} helyébe például (határozatlansági összefüggések miatt) egyszerre nem mérhető q *Descartes*-koordinátákat és p impulzusokat képzeljünk. Ha a sokaságon q szórása nagyon kicsiny, akkor az ε pontossággal (szórással) végrehajtott p mérés legalább $h/4\pi\varepsilon$ szórást ébreszt, s így mindent tönkretesz.

163. Az $a\mathfrak{R}$, \mathfrak{S}^2 , $\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots$ azt jelenti, hogy az \mathfrak{R} , \mathfrak{S} mennyiséget az $f(x) = ax$, $f(x) = x^2$, $f(x, y, \dots) = x + y + \dots$ függvénybe helyettesíthetjük a fent adott definíciók értelmében.

164. A $V(x, y, z)$ potenciál terében pl. a mozgó elektron energiaoperátora a *Heisenberg*-féle elméletben

$$H_0 = \frac{(P^x)^2 + (P^y)^2 + (P^z)^2}{2m} + V(Q^x, Q^y, Q^z)$$

(lásd például a III. 6. fejezetet), két nem felcserélhető operátor összege:

$$R = \frac{(P^x)^2 + (P^y)^2 + (P^z)^2}{2m}, \quad S = V(Q^x, Q^y, Q^z).$$

Míg az R -hez tartozó \mathfrak{R} mennyiség mérése impulzusmérés, az S -hez tartozó \mathfrak{S} -é pedig koordinátamérés, a $H_0 = R + S$ -hez tartozó $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ mennyiség mérése egészen más: például a kötött elektron által kibocsátott spektrumvonal rezgésszámának mérését jelenti, e vonalak a Bohr-féle rezgésszámfeltétel alapján meghatározzák az energiaértékeket, vagyis $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ értékeit. Azonban mindig igaz, hogy

$$V(\mathfrak{R} + \mathfrak{S}) = V(\mathfrak{R}) + V(\mathfrak{S}).$$

165. Szórásmentes sokaságoknál azonban bevezethetjük a helyes várható értékeket is.

166. Vagyis

$$U\varphi_m = \sum_n u_{mn}\varphi_n,$$

ahol

$$\sum_n |u_{mn}|^2$$

szükségképpen véges. Ez a következőképpen állapítható meg. Ha

$$\sum_n |x_n|^2 = 1,$$

akkor $R = P_{[\varphi]}$ mátrixa $\bar{x}_\mu x_\nu$,

$$\varphi = \sum_n x_n \varphi_n$$

esetén és a hozzá tartozó \mathfrak{R} várható értéke

$$\sum_{m,n} u_{nm} \bar{x}_m x_n.$$

Ez pozitív és $V(1)$ -nél, illetve helyesen normált $V(\mathfrak{R})$ esetén 1-nél kisebb, mert

$$P_{[\varphi]} = P_{[\varphi]}^2, \quad 1 - P_{[\varphi]} = (1 - P_{[\varphi]})^2.$$

Ha $x_{N+1} = x_{N+2} = \dots = 0$, akkor ez azt jelenti, hogy a

$$\sum_{m,n=1}^N u_{nm} \bar{x}_m x_n$$

hermitikus forma értéke 0 és 1 közé esik, ha

$$\sum_{n=1}^N |x_n|^2 = 1,$$

vagyis a $u_{\rho\sigma}$ ($\rho, \sigma = 1, \dots, N$) mátrix sajátértékei is 0 és 1 közé esnek. Így az

$$y_m = \sum_{n=1}^N u_{mn} x_n$$

vektor mindig rövidebb, mint az x_m vektor. Ha

$$x_m = \begin{cases} 1, & \text{ha } m = \bar{m}, \\ 0, & \text{különben,} \end{cases}$$

akkor

$$y_m = u_{m\bar{m}}.$$

így

$$\sum_{m=1}^N |x_m|^2 \geq \sum_{\bar{m}=1}^N |y_{\bar{m}}|^2, \quad 1 \geq \sum_{m=1}^N |u_{m\bar{m}}|^2.$$

Mivel ez minden N -re igaz, azt kapjuk, hogy

$$\sum_n |u_{nn}|^2 \leq 1.$$

167. Az egész megfontolás csak akkor szigorú, ha valamennyi $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ R értelmezési tartományához tartozik. Ugyan minden R -hez találhatunk ilyen teljes ortonormált $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszert (lásd a II. 11. fejezetet), azonban ha R nincs mindenütt értelmezve, akkor e rendszer függ R -től. Így minden teljes ortonormált $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszerhez tartozik olyan U , mely e rendszertől függ és

$$V(\mathfrak{R}) = \text{Sp}(UR),$$

de ez azokra az R -ekre igaz csupán, amelyek értelmezési tartományát $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ kifeszíti.

Ezek az U -k azonban mind egyenlők egymással. Ha ugyanis U' és U'' ilyen, akkor a fenti formula mindkettőre igaz, ha R mindenütt értelmezve van, vagyis $\text{Sp}(U'R) = \text{Sp}(U''R)$. Tehát $R = P_{[\varphi]}$ esetén

$$(U'\varphi, \varphi) = (U''\varphi, \varphi), ((U' - U'')\varphi, \varphi) = 0,$$

ez minden φ -re ($\|\varphi\| = 1$), tehát a Hilbert-tér minden elemére igaz, tehát $U' - U'' = 0$, így $U' = U''$.

168. Az $\mathfrak{C} = \sqrt{\mathfrak{R}}$ vagyis $\mathfrak{C} = h(\mathfrak{R})$, ahol $h(x)\sqrt{x}$ közvetlenül nem helyettesíthető, mert csak minden valós x -re valós értékű függvényeket tekintettünk és \sqrt{x} nem ilyen, mert negatív x -ekre imaginárius.

169. Egyszerű, közvetlen bizonyítást is lehet adni. Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszer,

$$a_{\mu\nu} = (A\varphi_\mu, \varphi_\nu), b_{\mu\nu} = (B\varphi_\mu, \varphi_\nu),$$

$$\text{Sp}(AB) = \sum_{\mu\nu} a_{\mu\nu} b_{\nu\mu}.$$

Ez nem negatív, ha

$$\sum_{\mu, \nu=1}^N a_{\mu\nu} b_{\nu\mu} \geq 0.$$

Legyen

$$f = \sum_{\mu=1}^N x_\mu \varphi_\mu,$$

ekkor

$$(Af, f) = \sum_{\mu, \nu=1}^N a_{\mu\nu} x_\mu \bar{x}_\nu \geq 0,$$

$$(Bf, f) = \sum_{\mu, \nu=1}^N b_{\mu\nu} x_\mu \bar{x}_\nu \geq 0,$$

s így a véges $a_{\mu\nu}$ és $b_{\mu\nu}$ ($\mu, \nu = 1, \dots, N$) mátrix is definit. Ám mind a definitésg, mind pedig

$$\sum_{\mu, \nu=1}^N a_{\mu\nu} b_{\nu\mu}$$

értéke ortogonálisan invariáns az N -dimenziós térben. Mivel $b_{\mu\nu}$ hermitikus (az N -dimenziós térben!) ortogonális transzformációval diagonális alakra hozható. Így feltételezhetjük, hogy $b_{\mu\nu} = 0$, ha $\mu \neq \nu$, ekkor

$$\sum_{\mu, \nu=1}^N a_{\mu\nu} b_{\nu\mu} = \sum_{\mu=1}^N a_{\mu\mu} b_{\mu\mu}.$$

Mivel mindkét mátrix definit, $a_{\mu\mu} \geq 0$, $b_{\mu\mu} \geq 0$, ez azt jelenti, hogy a fenti összeg is nemnegatív; elég az

$$x_\nu = \begin{cases} 1, & \text{ha } \nu = \mu, \\ 0, & \text{ha } \nu \neq \mu \end{cases}$$

vektort tekinteni.

170. Ez világos, ha $\varphi' = \varphi''$. Legyen most $\varphi' \neq \varphi''$. A φ' és φ'' ortogonalizálásával (II. 2. fejezet) olyan φ_1 -et kapunk, melyre $\|\varphi_1\| = 1$, φ_1 ortogonális φ' -re és φ'' lineáris kombinációja φ' -nek és φ_1 -nek: $\varphi'' = a\varphi' + b\varphi_1$, $\|\varphi''\| = |a|^2 + |b|^2 = 1$. Legyen $|a| = \cos \Theta$, $|b| = \sin \Theta$, így $a = e^{i\alpha} \cos \Theta$, $b = e^{i\beta} \sin \Theta$. Legyen

$$a^{(x)} = e^{ix\alpha} \cos(x\Theta),$$

$$b^{(x)} = e^{ix\beta} \sin(x\Theta),$$

így

$$|b^{(x)}|^2 + |a^{(x)}|^2 = 1,$$

tehát

$$\varphi^{(x)} = a^{(x)}\varphi' + b^{(x)}\varphi$$

esetén

$$\|\varphi^{(x)}\|^2 = 1$$

és $\varphi^{(x)}$ folytonosan megy át φ' -ből ($x=0$) φ'' -be ($x=1$).

171. Valójában 2. miatt azt kellene megkövetelni, hogy $W \neq 0$, $V \neq 0$. A $V=0$ vagy $W=0$ esetet azonban $c'=0$, $c''=1$, illetve $c'=1$, $c''=0$ magába foglalja.

172. A két utolsó szakasz megfontolásai, melyek a homogén sokaság fogalmához vezettek, a szerzőtől származnak [Gött. Nachr. (1927)]. A homogén sokaságok létezését és kapcsolatukat az általános sokaságokkal a szerző (lásd az előbbi hivatkozást) és tőle függetlenül H. WEYL [Z. Phys. 46 (1927)] fedezte fel. Az általánosabb sokaságok egy esete (nevezetesen két csatolt rendszerre) J. LANDAULTól ered [Z. Physik. 45 (1927)].

173. Ha a rejtett paraméterek, amelyeket együtt π -vel jelölünk, csak a diszkrét $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_n$ ($n > 1$) értéket vehetik fel, akkor feltéve, hogy azok a rendszerek, melyekre $\pi = \pi_1$, egy sokaságba, melyekre viszont $\pi \neq \pi_1$, egy másik sokaságba tartoznak, két sokaságot kapunk, melyek szuperpozíciója az eredeti. Ha π folytonosan változik a Π tartományban és Π' Π -nek résztartománya, akkor az egyik sokaságba azok a rendszerek tartozzanak, amelyekre π Π' -be esik, a másikba pedig azok, amelyekre ez nem Π' -be esik.

174. A fázistér hatdimenziós, melynek hat koordinátája a tömegpont q_1, q_2, q_3 Descartes-féle koordinátája és a megfelelő p_1, p_2, p_3 impulzus. A III. 4. fejezet alapján az $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \eta_1, \eta_2, \eta_3$ relatív szórásokra

$$\varepsilon_1 \eta_1 \geq \frac{h}{4\pi}, \varepsilon_2 \eta_2 \geq \frac{h}{4\pi}, \varepsilon_3 \eta_3 \geq \frac{h}{4\pi},$$

vagyis

$$\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3 \eta_1 \eta_2 \eta_3 \geq \left(\frac{h}{4\pi}\right)^3,$$

tehát a klasszikus mechanika fázissterében a hely e térfogat erejéig határozatlan.

175. Lásd SCHRÖDINGER igen világos elemzését e tárgyról: Naturwiss. 17 (1929) 37. oldal.

176. Az $u_\mu \rightarrow -u_\mu$ (vagy $u_\nu \rightarrow -u_\nu$ és $v_\mu \rightarrow -v_\mu$) K szimmetriaoperációja, melynek során az előbbi integrandusok előjelet váltanak, s így integráljuk eltűnik. Az $u_\mu \rightarrow v_\mu$, $v_\mu \rightarrow u_\mu$ vagy $u_\mu \rightarrow u_\nu$, $u_\nu \rightarrow u_\mu$ ugyancsak K szimmetriaoperációja, mely során az utóbbi integrandusok egymásba mennek át.

Integráljaik így egyenlők egymással, tehát egyenlők összegük $\frac{1}{2S}$ -szeresével

$$\int_K \dots \int_K (u_1^2 + v_1^2 + \dots + u_3^2 + v_3^2) d0 = \int_K \dots \int_K d0 = K \text{ felszíne,}$$

ezt C -vel jelöljük.

177. Ha $\text{Sp } U$ végtelen, akkor az utóbbi kivonással kapott képletek kétségesnek tűnhetnek. Ám ezek a következőképpen is beláthatók: Az, hogy \mathfrak{R} értéke λ^* , azt jelenti, hogy $w(a', a'') = 0$, vagyis $\text{Sp } [U(E(a'') - E(a'))] = 0$, ha $a'' < \lambda^*$, vagy $a' \geq \lambda^*$. Mivel e spur sohasem negatív és a'' -vel monoton nő, a' -vel pedig monoton csökken, elég a

$$\lim_{a'' \rightarrow +\infty} \text{ha } a'' < \lambda^*, \quad \lim_{a' \rightarrow +\infty} \text{ha } a' \geq \lambda^*$$

eseteket megvizsgálja. Más szóval:

$$\text{Sp}[U(1 - E(a'))] = 0, \text{ ha } a' \geq \lambda^*$$

és

$$\text{Sp}[UE(a'')] = 0, \text{ ha } a'' < \lambda^*.$$

178. Ha \mathfrak{E} teljesül, akkor az állapot φ . Ha nem teljesül, akkor „nem \mathfrak{E} ” teljesül, ahol $E = P_{[\varphi]}$, illetve \mathfrak{R} helyett $1 - E = 1 - P_{[\varphi]}$, illetve $\mathfrak{R} - \mathfrak{R} = \mathfrak{R} - [\varphi]$ szerepel. Ez nem határozza meg U -t egyértelműen. (Valóban E „az állapot φ -e?” kérdésnek felel meg.) Az a mérés, mely az állapotot egyértelműen meghatározza, olyan \mathfrak{R} mennyiség mérése, melynek R operátora tisztán diszkrét spektrumú és sajátértékei egyszerűek. Lásd a III. 3. fejezetet. A mérés után a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (ezek R sajátfüggvényei) közül az egyik lesz jelen, tehát S állapotát a mérés általában megváltoztatja. Ennek mintájára \mathfrak{E} mérése is megváltoztatja az állapotot, hiszen igenlő eredmény esetén $U = P_{[\varphi]}$, nemleges esetén pedig $U(1 - P_{[\varphi]}) = U$, $UP_{[\varphi]} = 0$, tehát $U\varphi = 0$, míg a mérés előtt egyik eset sem teljesül feltétlenül. A kvantummechanikában tehát — amint az várható volt — az állapot „meghatározása” az állapotot megváltoztatja.

179. Például azért, mert

$$RP_{[\varphi_n]}f = R((f, \varphi_n) \cdot \varphi_n) = (f, \varphi_n)R\varphi_n = \lambda_n(f, \varphi_n)\varphi_n,$$

$$P_{[\varphi_n]}Rf = (Rf, \varphi_n)\varphi_n = (f, R\varphi_n)\varphi_n = \lambda_n(f, \varphi_n)\varphi_n.$$

180. E kapcsolat a klasszikus (*Hamilton-féle*) mechanika bármely kézikönyvében fellelhető.

181. Gyakran megvizsgálták az idő—energia pár határozatlansági összefüggését. Lásd például HEISENBERG átfogó munkáját: *Die Physikalischen Prinzipien der Quantentheorie*, Leipzig, 1930, II. 2. d.

182. A mérő elrendezés minden további részlete csupán a kérdéses \mathfrak{R} mennyiség, vagy a megfelelő R operátor és az itt megnevezett M_n vagy P^x, P^y, P^z , illetve Q^x, Q^y, Q^z kapcsolatára vonatkozik. Természetesen a mérési technikának ez a legfontosabb gyakorlati vonatkozása.

183. Lásd például NERNST: *Theoretische Chemie*, Stuttgart (számos kiadás 1893 óta) IV. kötetben a tömeghatás törvényének termodinamikai bizonyítását.

184. Az ezen az alapon felépített termodinamika fenomenológiai rendszerét számos kézikönyv tartalmazza. Például M. PLANCK: *Vorlesung über Thermodynamik*, Berlin, 1930. A továbbiak szempontjából e törvények statisztikus vonatkozásai a legfontosabbak. Ezt a következő munkákban elemezték: EINSTEIN, *Verh. d. dtsh. Physik. Ges.* 12 (1914). SZILÁRD, *Z. Physik* 32 (1925).

185. Ez a statisztikus mechanika Maxwell—Boltzmann-féle módszere (lásd P. és T. EHRENFEST összefoglalását, *Enzykl. d. Math. Wiss.* Vol. II. 4. D., Leipzig, 1907). A gázelméletben például a nagyon bonyolult rendszer a gáz, amely sok (egymással kölcsönható) molekulából áll és a molekulákat vizsgálják statisztikusan.

186. Ez a Gibbs-féle módszer (lásd a 185. jegyzet hivatkozását). Itt az individuális rendszer a gáz, s ennek (ugyanazon gáznak) nagyszámú másolatát tekintik egyszerre és számítják ki tulajdonságait statisztikusan.

187. Lásd a 184. jegyzet hivatkozását. Ezt SZILÁRD LEÓ fejlesztette tovább.

188. A gázok kinetikus elmélete — amint az jól ismert — ilyen módon azt a folyamatot írja le, melynek során a falak az általuk bezárt gáznak átadják a hőmérsékletüket. Lásd a 184. és 185. jegyzet hivatkozásait.

189. E folyamatban, ha a Q_1, Q_2, \dots, Q_i hőmennyiségre van szükség a megfelelő T_1, \dots, T_i hőmérsékleten, akkor az entrópiakülönbség

$$\frac{Q_1}{T_1} + \dots + \frac{Q_i}{T_i},$$

lásd a 184. jegyzet hivatkozását.

190. Ha a gáz vizsgált mennyiségének a fajhője $c(T)$ a T hőmérsékleten, akkor a $T, T_i \rightarrow dT$ hőmérsékletintervallumban a gáz $c(T)dT$ hőmennyiséget vesz fel. A 189. jegyzet szerint

$$\int_{T_1}^{T_2} \frac{c(T)dT}{T}$$

az entrópiakülönbség.

191. Ideális gázra $c(T)$ állandó, nagyon kicsiny T -re ez biztosan nem igaz. Lásd például a 6. jegyzet hivatkozását.

192. Ezenkívül azt is megköveteljük, hogy a \mathbb{K} -nak a V térfogata legyen nagy $\mathbb{K}_1, \dots, \mathbb{K}_N$ összes térfogatához képest, és azt is, hogy a „szabadsági fokenkénti” κT energia (κ a Boltzmann-állandó) legyen nagy a

$$\frac{h^2}{\mu V^{2/3}}$$

mennyiséghez képest (h a Planck-állandó, μ a molekula tömege; e mennyiség energia dimenziójú). Lásd például E. FERMI: Z. Physik, 36 (1926).

193. Lásd például a 184. jegyzet hivatkozását.

194. Lásd a 185. jegyzet hivatkozását. A Maxwell-démonnal kapcsolatos nehézségek vizsgálatát az olvasó SZILÁRD LÉO cikkében találhatja meg: Z. Physik, 53 (1929).

195. Ha az ideális gáz M molekulát tartalmaz, akkor nyomása

$$p = \frac{M\kappa T}{V}.$$

A V_1 térfogatról V_2 -re összenyomva

$$\int_{V_1}^{V_2} p dV = M\kappa T \int_{V_1}^{V_2} \frac{1}{V} dV = M\kappa T \ln \frac{V_2}{V_1}$$

munkát végzünk.

196. Az ideális gáz energiája — amint az jól ismert — csak a hőmérsékletétől függ.

197. Meghatározzuk az $aP_{[\varphi]} + bP_{[\psi]}$ sajátértékeit. A követelmény

$$(aP_{[\varphi]} + bP_{[\psi]})f = \lambda f.$$

A jobb oldal φ és ψ lineáris kombinációja, ha $\lambda \neq 0$, hiszen a baloldal is az. A $\lambda = 0$ biztosan végtelen sokszoros sajátérték, hiszen minden olyan f -hez hozzátartozik, amely φ -re és ψ -re ortogonális. Elég tehát csak a $\lambda \neq 0$ esetet vizsgálni, ekkor $f = x\varphi + y\psi$. (Legyen φ lineárisan független ψ -től, különben ugyanis $\varphi = c\psi$, $c = 1$ és a két állapot azonos egymással.) Ekkor a fenti egyenlet így írható:

$$a(x + y(\psi, \varphi))\varphi + b(x(\varphi, \psi) + y)\psi = \lambda x\varphi + \lambda y\psi,$$

vagyis

$$ax + \overline{a(\varphi, \psi)}y = \lambda x,$$

$$b(\varphi, \psi)x + by = \lambda y.$$

E rendszer determinánsának el kell tűnnie:

$$\begin{vmatrix} a - \lambda & \overline{a(\varphi, \psi)} \\ b(\varphi, \psi) & b - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

$$(a - \lambda)(b - \lambda) - ab|(\varphi, \psi)|^2 = 0,$$

$$\lambda^2 - (a + b)\lambda + ab(1 - \alpha^2) = 0,$$

$$\lambda = \frac{a+b \pm \sqrt{(a+b)^2 - 4ab(1-\alpha^2)}}{2} = \frac{a+b \pm \sqrt{(a-b)^2 + 4ab\alpha^2}}{2}.$$

Ha ebbe rendre az $a=1, b=0; a=\frac{1}{2}, b=\frac{1}{2}; a=\frac{1}{3}, b=\frac{2}{3}$ értékeket írjuk be, megkapjuk a fenti formulákat.
198. Mivel

$$(x \ln x)' = \ln x + 1,$$

így

$$\left(\frac{1+y}{2} \ln \frac{1+y}{2} + \frac{1-y}{2} \ln \frac{1-y}{2} \right)' = \frac{1}{2} \left(\ln \frac{1+y}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\ln \frac{1-y}{2} + 1 \right) = \frac{1}{2} \ln \frac{1+y}{1-y}.$$

A kifejezésünk deriváltja:

$$\begin{aligned} & -3 \frac{1}{2} \ln \frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{3-\sqrt{1+8\alpha^2}} \cdot \frac{1}{3} \frac{8\alpha}{\sqrt{1+8\alpha^2}} + 4 \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} = \\ & = 2 \left(\ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} - \frac{2\alpha}{\sqrt{1+8\alpha^2}} \ln \frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{3-\sqrt{1+8\alpha^2}} \right). \end{aligned}$$

Ha ez pozitív, akkor

$$\ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} > \frac{2\alpha}{\sqrt{1+8\alpha^2}} \ln \frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{3-\sqrt{1+8\alpha^2}},$$

vagyis

$$\frac{1}{2\alpha} \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} > \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1+\beta}{1-\beta}, \quad \beta = \frac{\sqrt{1+8\alpha^2}}{3}.$$

Bebizonyítjuk ezt úgy is, hogy $\frac{2}{3}$ helyett $\frac{8}{9}$ áll. Tekintve, hogy $1-\beta^2 = \frac{8}{9}(1-\alpha^2)$ és $\alpha < \beta$ (ami az előbbi következménye, hiszen $\alpha < 1$), ez azt jelenti, hogy

$$\frac{1-\alpha^2}{2\alpha} \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} > \frac{1-\beta^2}{2\beta} \ln \frac{1+\beta}{1-\beta},$$

s ez igaz, ha

$$\frac{1-x^2}{2x} \ln \frac{1+x}{1-x}$$

monoton nő $0 < x < 1$ esetén. Ez az utóbbi tulajdonság azonban például a következő hatványsor következménye:

$$\frac{1-x^2}{2x} \ln \frac{1+x}{1-x} = (1-x^2) \left(1 + \frac{x^2}{3} + \frac{x^4}{5} + \dots \right) = 1 - \left(1 - \frac{1}{3} \right) x^2 - \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{5} \right) x^4 - \dots$$

199. Lásd. például a 184. jegyzet hivatkozását, ezt a fenomenológiai termodinamikára jellemző gondolatkísérletet illetően.

200. Természetesen az $N\kappa$ tényező nélkül $-\text{Sp}(U \ln U)$ -t is, vagy az N -nel az arányosságot megőrizve $-N \text{Sp}(U \ln U)$ -t is vizsgálhatnánk.

201. Lásd például M. PLANCK: Theorie der Wärmestrahlung, Leipzig, 1913.

202. SZILÁRD LEÓ megmutatta (lásd a 194. jegyzet hivatkozását), hogy nem tehetünk szert erre az „ismeretre” anélkül, hogy a $\kappa \ln 2$ entrópiánövekedést ellensúlyoznánk. A $\kappa \ln 2$ az olyan információ „termodinamikai értéke”, amely két eset alternatívájára vonatkozik. Minden olyan törekvés, hogy e folyamatot anélkül hajtsuk végre, hogy ismernénk azt, hogy a molekula a tartály melyik felében van, bebizonyíthatóan reménytelen, bár esetenként igen bonyolult automatákhoz vezet.

203. A makroszkopikus megfigyelő e jellemzése E. WIGNERTől származik.

204. Ha E_n a H -val s így A -val is felcserélhető, az egyenlőség érvényes marad, mert

$$\text{Sp}(AUA^{-1}E_n) = \text{Sp}(UA^{-1}E_nA) = \text{Sp}(UA^{-1}AE_n) = \text{Sp}(UE_n).$$

Azonban minden E_n , tehát minden makroszkopikusan megfigyelhető mennyiség biztosan nem cserélhető fel H -val. Valóban, sok ilyen mennyiség, például a diffundáló gáz tömegközéppontja, lényegesen változik az időben, vagyis $\text{Sp}(UE_n)$ nem állandó. Mivel minden makroszkopikus mennyiség felcserélhető egymással, H sohasem makroszkopikus mennyiség, vagyis az energiát nem lehet makroszkopikusan teljesen pontosan megmérni. Ez minden további nélkül kézenfekvő.

205. A klasszikus H -tétellel kapcsolatban lásd BOLTZMANN: Vorlesungen über Gastheorie, Leipzig, 1896, és a P. és T. EHRENFESTnek a 185. jegyzetben megemlített rendkívül tanulságos cikkét. A kvantummechanikában a Boltzmann-féle feltételek helyére lépő rendezetlenségi feltevéseket W. PAULI fogalmazta meg (Sommerfeld-Festschrift, 1928) és a H -tételt ezek segítségével bizonyította be. Nemrég a szerzőnek is sikerült bebizonyítania a klasszikus mechanikai ergodikus tételt (lásd Proc. Nat. Ac. 1932. január és március), G. D. BIRKHOFF javított állításával együtt (Proc. Nat. Ac. 1931. december és 1932. március).

206. Z. Physik, 57 (1929).

207. N. BOHR volt az első, aki rámutatott arra [Naturwiss. 17 (1929)], hogy a természet kvantummechanikai jellemzők szűkségképpen fellépő kettős leírás mód a jelenségek fizikai természetével és a pszichofizikai parallelizmussal összhangban van.

208. Az itt következő és a VI. 3. fejezetben követett okfejtés SZILÁRD LEÓVAL folytatott beszélgetéseknek köszönhető lényeges gondolatokat tartalmaz. Lásd még HEISENBERG hasonló megfontolásait a 181. jegyzetben említett hivatkozásban.

209. Könnyen megmutatható, hogy ha A hipermaximális, vagy hermitikus, akkor \mathbf{A} is az.

210. Az I. és II. esetében ez világos, ha polinomokról van szó. Általános függvények esetében abból következik, hogy a hermitikus operátor és az egységfelbontás között a megfeleltetés nem sérül meg az $A \rightarrow \mathbf{A}$ átmenet során.

211. A sokféle és nagyszámú index miatt a mátrix jelölésére ezt a korábitól némileg különböző módszert használjuk.

212. Az I + II állapotainak projekciója I-re és II-re általában keverék. Ezt LANDAU mutatta meg [Z. Physik 45 (1927)].

213. A matematikai okoskodás E. SCHMIDT egy cikkén alapul [Math. Ann. 83 (1907)].

214. E magyarázatnak még több változata is van, de ezeket hasonló okoknál fogva kell elvetni.

215. A helymérésre vonatkozó és a III. 4. fejezetben tárgyalt számítást WEIZSÄCKER egyik cikke tartalmazza [Z. Physik, 70 (1931)].

NÉV- ÉS TÁRGYMUTATÓ

A

Abraham, M.: 270
absztrakt Hilbert-tér: 25, 26
adjungált operátor: 57

B

Becker, R.: 270
Birkhoff, G. D.: 280
Bohr, N.: 11, 14, 147, 167, 171, 202, 255,
256, 268, 269, 272, 274, 280
Bohr-elmélet: 22, 148, 268
Boltzmann, L.: 211, 225, 226, 228, 280
Boltzmann-féle H-tétel: 237
Born, M.: 11, 16, 122, 267, 268
Bose—Einstein-statisztika: 205, 272
Bothe, W.: 268
Brown-mozgás: 186

C

Carathéodory, C.: 258
Carleman, T.: 261
Cauchy-konvergenciakritérium: 32, 35, 97
Cayley-transzformáció: 92, 93, 96, 97, 98,
99, 100
Compton, A. H.: 124
Compton-effektus: 114, 230
Compton—Simons-kísérlet: 124, 191, 268
Courant, R.: 155, 257, 261, 270, 272

D

Dawisson—Germer-kísérlet: 271
differenciáloperátor: 20

Dirac, P. A. M.: 9, 10, 11, 16, 20, 22, 147,
172, 255, 256, 257, 262, 267, 272
Dirac-féle deltafüggvény: 20, 21, 22, 257
diszkrét spektrum: 64
Doppler-effektus: 141, 230

E

egyidejű eldönthetőség: 146
egységfelbontás: 71
egységoperátor felbontás: 71
P. Ehrenfest: 277, 280
T. Ehrenfest: 277, 280
Einstein, A.: 11, 147, 158, 159, 164, 172, 255,
268, 271, 272, 277
elektrospin: 12
energiaoperátor: 45
entrópia: 205
Epstein, P.: 255
ergodikus tétel: 280

F

fázistér: 14
felcserélési szabályok: 13
felcserélési tulajdonság: 135
felcserélhető operátorok: 101
Fermi, E.: 278
Fermi—Dirac-statisztika: 205
fénykvantum-hipotézis: 159
folytonos operátor: 60
Fourier-analízis: 142
Fourier-integrál: 79, 269
Fredholm, E. I.: 257
Frenkel, A.: 255
funkcionáloperátor: 20

G

Galilei-vonatkoztatási rendszer: 12
 gázok kinetikus elmélete: 122
 Gibbs-féle sokaság: 205
 Gibbs-módszer: 277
 Gordon, W.: 257
 Goudsmit, S. A.: 12

H

Hamilton-függvény: 12, 143, 152, 255, 256, 272
 Hamilton-operátor: 14
 határozatlansági relációk: 133, 186
 Hausdorff, F.: 258, 259
 Heisenberg, W.: 11, 135, 138, 147, 172, 268, 277, 280
 Hellinger, E.: 9, 263, 257, 267
 hermitikus mátrix: 13
 hermitikus operátor: 59
 hermitikus skalárszorzat: 28
 hermitikus szimmetria: 28
 Hertz, H.: 272
 Hilbert, D.: 9, 64, 69, 87, 92, 100, 155, 257, 261, 263, 270, 272
 Hilbert-tér: 9, 22, 26, 44, 62, 64, 83, 115, 116, 129, 156, 157, 162
 hipermaximális kiterjesztés: 101
 hipermaximális operátor: 100
 homogén sokaság: 104, 185
 hullámfüggvény: 64
 hullámmechanika: 11, 115

I

integráloperátor: 20
 ítéletkalkulus: 147
 izometria: 23
 izomorfia: 23

J

Jordan, P.: 11, 12, 16, 22, 255, 256, 267, 268

K

Kamke, E.: 258
 kauzalitás: 120, 122, 186
 Kennard, E. H.: 268
 kevert állapotok: 189
 klasszikus mechanika: 120, 122, 128, 138
 konfigurációs-tér: 14, 26
 korrespondencia-elv: 11
 kölcsönhatási energia: 164
 Kramers, H. A.: 268
 kvantumstatisztika: 115

L

Landau, L. D.: 271, 280
 Landau, J.: 276
 Landé, A.: 255
 Laplace-transzformáció: 79
 Lebesgue-integrál: 39, 257, 288
 Lebesgue-mérték: 76
 lineáris operátor: 56
 lineáris sokaság: 28
 London, F.: 255
 Lorentz-transzformáció: 202

M

maximális hermitikus operátor: 91
 Maxwell—Boltzmann-módszer: 277
 Maxwell-egyenletek: 149, 152
 Maxwell-féle démon: 209, 210, 278
 Maxwell-féle sebességeloszlás: 205
 mátrixmechanika: 12, 256
 Mises, R. v.: 273
 Moore, E. H.: 257

N

nagy számok törvénye: 122, 186, 273
 Nernst, W.: 277
 Newton, I.: 10
 normálás: 23

O

okság-elve: 122
 operátorok: 54, 55
 operátorok értelmezési tartományai: 55
 operátorok felcserélhetősége: 133
 operátorok invariánsai: 105
 operátorok kiterjesztése: 89
 operátorok legkisebb zárt kiterjesztése: 89
 operátorok spektruma: 74
 operátorok szórása: 134
 operátorok várható értéke: 130
 oszcillátorállapotok: 148
 ortogonalitás: 32
 ortonormált halmaz: 32

Ö

önadjungált operátor: 57

P

Pauli, W.: 280
 Peano-görbe: 105
 Peierls, R.: 271
 Perron, O.: 261
 Plancherel, M.: 263
 Planck, M.: 11, 255, 277, 279
 pontspektrum: 64
 projekció: 48
 projektor: 49
 pszichofizikai parallelizmus: 239, 280

R

Reiche, F.: 255
 rejtett paraméter: 10, 122, 185, 186
 relativitáselmélet: 186
 reverzibilitás: 198
 Riemann, B.: 261
 Riesz, F.: 9, 23, 264
 Riesz—Fischer-tétel: 23
 Robertson, H. P.: 268
 Rupp.: 272

S

sajátértékprobléma: 14
 Schmidt, E.: 9, 265, 280
 Schmidt-féle ortogonalizálási eljárás: 37
 Schrödinger, E.: 11, 14, 15, 16, 22, 56, 57, 60, 63, 115, 116, 255, 256, 257, 261, 276
 Schrödinger-egyenlet: 121, 126, 137, 147, 165, 199, 200, 207
 Schwarz-egyenlőtlenség: 62, 135
 skaláris szorzat: 26
 Slater, J. C.: 268
 Sommerfeld, A.: 255
 spin: 12
 spur: 105
 stacionárius állapot: 15
 statisztikus értelmezés: 120, 122
 statisztikus operátor: 190
 statisztikus sokaság: 174
 Stieltjes-integrál: 68, 69, 73, 126, 261, 263, 264, 273
 Stirling-formula: 225
 Stone, M.: 269
 sugárzáselmélet: 147
 szabadsági fok: 120
 szeparabilitás: 32
 Szilárd L.: 210, 277, 278, 279, 280
 szimmetrikus különbség-halmaz: 44
 szórásmentes sokaság: 178, 185

T

teljes rendszer: 36
 Thomson, C. F.: 272
 tiszta sokaság: 179
 Titchmarsh, E. C.: 263
 Toeplitz, O.: 9, 89, 237, 265, 267
 transzformációelmélet: 9, 10, 11, 12, 16

U

Uhlenbeck, G. E.: 12
 Unitér operátor: 59

V

várható érték: 130

W

Weisskopf, V. F.: 272

Weyl, H.: 155, 168, 258, 263, 270, 279

Weizsäcker, C. F.: 280

Wigner, E. P.: 272, 279

Z

zárt lineáris sokaság: 33, 47

zárt operátor: 88, 89

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Felelős szerkesztő: Banai Miklós Műszaki szerkesztő: Fülöp Antal

Terjedelem: 24.15 (A/5) iv AK 1002k 8083

80.7521 Akadémiai Nyomda, Budapest Felelős vezető: Bernát György

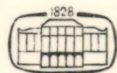
*Az Akadémiai Kiadó
gondozásában jelent meg*

WIGNER JENŐ

CSOPORTELMÉLETI MÓDSZER
A KVANTUMMECHANIKÁBAN

Kivételes jelenség, hogy egy olyan kvantummechanika-könyv, amelynek gyökereit a Zeitschrift für Physik-ben 1926-ban és 1927-ben megjelent tanulmányok képezik, és amelynek első kiadása 1931-ben jelent meg német nyelven, ma is változtatás nélkül érvényes és hasznos. *Wigner Jenő* könyve a modern fizika klasszikus, tiszta alkotása – írja a könyvről Marx György.

391 oldal · Ára kötve 102, – Ft



AKADÉMIAI KIADÓ
BUDAPEST

Ára: 80,-Ft

ISBN 963 05 2295 0