1 Transformata Fouriera

1.1 Kilka przypomnień i nowych faktów dotyczących całek niewłaściwych

Całkę niewłaściwą

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\mathsf{d}x$$

definiowaliśmy jako

$$\lim_{\substack{N\to\infty\\ M\to-\infty}} \int\limits_{M}^{N} f(x)\,\mathsf{d}x$$

Def. Mówimy, że funkcja (ciągła , kawałkami ciągła) jest *całkowalna na* $\mathbb{R}$, jeżeli

$$\sup_{M,N\in\mathbb{R}} \int\limits_{M}^{N} |f(x)|\,\mathsf{d}x < \infty. \tag{1}$$

Stw. Jeżeli f – całkowalna, to istnieją granice

$$\lim_{N\to\infty} \int\limits_{0}^{N} f(x)\,\mathsf{d}x \quad \text{oraz} \quad \lim_{M\to-\infty} \int\limits_{0}^{M} f(x)\,\mathsf{d}x$$

Dow. Pokażemy, że

$$\forall_{\epsilon>0}\exists_{N_0}\forall_{N,N'>N_0}\left|\int\limits_{0}^{N} f(x)\,\mathsf{d}x - \int\limits_{0}^{N'} f(x)\,\mathsf{d}x\right| < \epsilon$$

Uwaga: To co jest po kwantyfikatorach można równoważnie zapisać jako

$$\left|\int\limits_{N}^{N'} f(x)\,\mathsf{d}x\right| < \epsilon$$

Koniec uwagi.

Z założenia mamy, że $\sup\limits_{N\in\mathbb{R}_+} \int\limits_{0}^{N} |f(x)|\,\mathsf{d}x < \infty$. Wobec tego funkcja

$$\phi(N) = \int\limits_{0}^{N} |f(x)|\,\mathsf{d}x$$

jest rosnąca i ograniczona. Istnieje więc granica

$$\lim_{N\to\infty} \int\limits_{0}^{N} |f(x)|\,\mathsf{d}x$$

Analogicznie jest dla drugiej całki (od $-N'$ do 0). Łącznie mamy:

$$\forall_{\epsilon>0}\exists_{N_0}\forall_{N,N'>N_0}\left|\int\limits_{N'}^{N}|f(x)|\,\mathrm{d}x\right|<\epsilon$$

co znaczy, że również

$$\forall_{\epsilon>0}\exists_{N_0}\forall_{N,N'>N_0}\left|\int\limits_{N'}^{N}f(x)\,\mathrm{d}x\right|<\epsilon$$

Tw. Lebesgue'a o zbieżności majoryzowanej.

Niech $\{f_n\}$ – ciąg funkcji (ciągłych lub kawałkami ciągłych) na $\mathbb{R}$ oraz f_∞ – funkcja (ciągła lub kawałkami ciągła) na $\mathbb{R}$, przy czym

$$\forall_{x\in\mathbb{R}}\lim_{n\to\infty}f_n(x)=f_\infty(x).$$

Załóżmy, że istnieje funkcja całkowalna $\varphi\geqslant 0$ taka, że

$$\forall_{x\in\mathbb{R}}\forall_{n\in\mathbb{N}}|f_n(x)|\leqslant\varphi(x)$$

(tzn. wszystkie funkcje $f_n(x)$ są majoryzowane przez tę samą funkcję całkowalną φ, niezależnie od n).

Wtedy:

$$\lim_{n\to\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}f_n(x)\,\mathrm{d}x=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}f_\infty(x)\,\mathrm{d}x; \tag{2}$$

innymi słowy, można przechodzić do granicy pod znakiem całki.

Dow. nie będzie.

CNBO (Co Nie Będzie Okazane)

Przykł. Niech $g(x)=\max\{0,1-x^2\}$. Weźmy rodzinę funkcji: $f_n(x)=g(x-n)$. W tym przypadku nie mamy szans na znalezienie funkcji $\varphi(x)$ z powyższego twierdzenia.

Nie zdziwmy się więc, że nie zachodzi też teza. Mamy bowiem:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty}g(x-n)\mathrm{d}x=\int\limits_{n-1}^{n+1}g(x-n)\mathrm{d}x=\int\limits_{-1}^{+1}g(x)\mathrm{d}x>0,$$

podczas gdy

$$f_\infty(x)=\lim_{n\to\infty}g(x-n)=0.$$

1.2 Transformata Fouriera i jej podstawowe własności

1.2.1 Definicja, motywacja i garść przykładów

Def. Niech f – całkowalna na $\mathbb{R}$. *Transformatą Fouriera* funkcji f, oznaczaną jako $\hat{f}(x)$ lub $(\mathcal{F}\, f)(x)$ nazywamy funkcję

$$\hat{f}(x) \equiv (\mathcal{F}\, f)(x) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(k)\, e^{ikx} \mathsf{d}k. \tag{3}$$

Motywacja. W jakich problemach przydaje się transformata Fouriera? Jako prototyp rozpatrzmy *rozszczepienie światła w pryzmacie*. Puśćmy wiązkę światła białego na pryzmat. **RYS.** Po przejściu przez pryzmat, obserwujemy na ekranie za pryzmatem wszystkie kolory tęczy; każdy kolor jest wiązką światła monochromatycznego o danej częstości i określonym natężeniu. Możemy zapytać: Ile w danej wiązce światła białego jest światła o określonej długości fali? Odpowiedź uzyskujemy, poddając wyjściową wiązkę transformacie Fouriera.

Wracając na grunt matematyczny, zapytajmy: Jakie funkcje $\hat{f}$ z (3) można zapisać w powyższej postaci? Jak dla danego $\hat{f}$ znaleźć f?

Zanim odpowiemy na powyższe pytania, rozpatrzmy garść przykładów.

1. Transformata Fouriera funkcji charakterystycznej odcinka.

2. Transformata Fouriera gaussianu.

1.2.2 Własności transformaty Fouriera

1. f – całkowalna $\Longrightarrow$ $\mathcal{F}f$ – ograniczona. (Bo:

   $$|(\mathcal{F}f)(x)| \leqslant \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |f(k)\, e^{ikx}| \mathsf{d}k = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |f(k)| \mathsf{d}k;$$

   a że f jest całkowalna, to całka po prawej stronie jest skończona i niezależna od x, czyli – jak było zapodawane – $\mathcal{F}f$ jest ograniczona).

2. Operacja $\mathcal{F}$ jest liniowa:

   - $\mathcal{F}(f+g) = \mathcal{F}f + \mathcal{F}g$;
   - • $\mathcal{F}(\lambda f) = \lambda \mathcal{F}f$, $\lambda \in \mathbb{C}$.

3. Jeżeli f i $\hat{f}$ są funkcjami całkowalnymi, to

$$\mathcal{F}(\frac{\mathsf{d}f}{\mathsf{d}x})(x) = -ix(\mathcal{F}f)(x). \tag{4}$$

Dow.

$$\mathcal{F}(f')(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f'(k)\, e^{ikx} \mathsf{d}k = \lim_{M,N\to\infty} \int_{-M}^{N} f'(k)\, e^{ikx} \mathsf{d}k$$

$$= \lim_{M,N\to\infty} \left[f(k)e^{ikx}\Big|_{-M}^{N} - \int_{-M}^{N} f(k)\, ix\, e^{ikx} \mathsf{d}k \right]$$

Pierwszy wyraz (granica) jest równy zeru (bo f – całkowalna). Drugi wyraz (całka) to $-ix(\mathcal{F}f)(x)$.

CBDO

4. Jeśli $f(k)$, $kf(k)$ są całkowalne, to

$$\mathcal{F}(kf)(x) = -i\frac{\mathsf{d}}{\mathsf{d}x}(\mathcal{F}f)(x). \tag{5}$$

Dow.

$$\frac{\mathsf{d}}{\mathsf{d}x}(\mathcal{F}f)(x) = \lim_{h\to 0} \frac{(\mathcal{F}f)(x+h) - (\mathcal{F}f)(x)}{h}$$

$$= \lim_{h\to 0} i \int_{-\infty}^{+\infty} kf(k) \frac{e^{ik(x+h)} - e^{ikx}}{ihk} \mathsf{d}k$$

$$= \lim_{h\to 0} i \int_{-\infty}^{+\infty} kf(k)e^{ikx} \frac{e^{ikh} - 1}{ihk} = (*);$$

ale iloraz $\frac{e^{it}-1}{it}$ jest ograniczoną funkcją t, i $\lim_{t\to 0} \frac{e^{it}-1}{it} = 1$, (co można zobaczyć np. z reguły de l'Hospitala), więc (z tw. Lebesgue'a o zbieżności majoryzowanej) można wejść z granicą pod znak całki, tak więc

$$(*) = i \int_{-\infty}^{+\infty} kf(k)e^{ikx} \mathsf{d}k,$$

tak więc

$$\int_{-\infty}^{+\infty} kf(k)e^{ikx} \mathsf{d}k = \mathcal{F}(kf)(x) = -i\frac{\mathsf{d}}{\mathsf{d}x}(\mathcal{F}f)(x).$$

CBDO

Wniosek. Jeżeli $f \in C^2(\mathbb{R})$ i f, f', f'' są całkowalne, to $\mathcal{F}f$ też jest całkowalna.

Dow. (wniosku). Z założenia, $\mathcal{F}f$ jest ciągła. Mamy też:

$$\mathcal{F}(f'')(x) = -x^2(\mathcal{F}f)(x) \tag{6}$$

i, skoro $\mathcal{F}(f)$ jest ciągła, to $\mathcal{F}(f'')(x)$ jest ciągła, a więc ograniczona na zbiorze zwartym, np. na odcinku $[-a, a]$; na tym odcinku jest więc całkowalna.

Pozostaje oszacować wkład od 'ogonów', tzn. dla $|x| > a$. Z wł. 1, transformata funkcji całkowalnej jest ograniczona. Mamy więc dla dowolnego $x \in \mathbb{R}$

$$x^2|(\mathcal{F}f)(x)| \leqslant M, \quad \text{gdzie} \quad M = \text{const}$$

co daje

$$|(\mathcal{F}f)(x)| \leqslant \frac{M}{x^2}.$$

Tak więc transformata $\mathcal{F}(f'')$ jest całkowalna na $]-\infty, a]$ i $[a, \infty[$, bo $\frac{1}{x^2}$ jest tam całkowalna.

Czyli $\mathcal{F}(f'')$ jest całkowalna na całym $\mathbb{R}$.

CBDO

Tw. Niech $f \in C^2(\mathbb{R})$ oraz f, f', f'' będą całkowalne. Wtedy

$$I = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} (\mathcal{F}f)(x)\mathsf{d}x = 2\pi f(0). \tag{7}$$

Dow. Mamy:

$$I = \lim_{\epsilon \to 0} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} (\mathcal{F}f)(x)e^{-\epsilon|x|}\mathsf{d}x; \tag{8}$$

(**RYS.** – przyjrzyjmy się wykresowi $e^{-\epsilon|x|}$), bowiem funkcja podcałkowa dla dowolnego $\epsilon > 0$ jest majoryzowana przez $|(\mathcal{F}f)(x)|$, która jest całkowalna – co wynika z Tw. udowodnionego dopiero co. Równość (8) wynika teraz z tw. Lebesgue'a o zbieżności majoryzowanej.

Dowód oparty jest na manipulacji granicami, co jest dozwolone znowu przez tw. Lebesgue'a o zbieżności majoryzowanej.

Mamy dalej:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} (\mathcal{F}f)(x)e^{-\epsilon|x|}\mathsf{d}x = \lim_{N \to \infty} \int\limits_{-N}^{+N} (\mathcal{F}f)(x)e^{-\epsilon|x|}\mathsf{d}x$$

$$= \lim_{N \to \infty} \int\limits_{-N}^{+N} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \left(f(k)e^{ikx}\mathsf{d}k\right) e^{-\epsilon|x|}\mathsf{d}x$$

$$= \lim_{N\to\infty} \int_{-N}^{+N} \left(\lim_{M\to\infty} \int_{-M}^{+M} f(k) e^{ikx} \mathsf{d}k \right) e^{-\epsilon|x|} \mathsf{d}x$$

$$= \lim_{N\to\infty} \lim_{M\to\infty} \int_{-N}^{+N} \left(\int_{-M}^{M} f(k) e^{ikx} e^{-\epsilon|x|} \mathsf{d}k \right) \mathsf{d}x = (**)$$

funkcja w wewnętrznej całce majoryzuje się przez pewną funkcję całkowalną od zmiennej x. [....]Mamy więc dalej, po zmianie kolejności całkowania:

$$(**) = \lim_{N\to\infty} \lim_{M\to\infty} \int_{-M}^{+M} f(k) \left(\int_{-N}^{+N} e^{ikx-\epsilon|x|} \mathsf{d}x \right) \mathsf{d}k = (***)$$

Policzmy tę wewnętrzną całkę:

$$\int_{-N}^{+N} e^{ikx-\epsilon|x|} \mathsf{d}x = \int_{-N}^{0} e^{(ik+\epsilon)x} \mathsf{d}x + \int_{0}^{+N} e^{(ikx-\epsilon)x} \mathsf{d}x = \left. \frac{e^{(ik+\epsilon)x}}{ik+\epsilon} \right|_{-N}^{0} + \left. \frac{e^{(ik-\epsilon)x}}{ik-\epsilon} \right|_{0}^{N}$$

$$= \frac{1}{ik+\epsilon} - \frac{1}{ik-\epsilon} + \text{coś dążącego do 0 przy } N \to \infty$$

Wykorzystując to w $(***)$, mamy:

$$(***) = \lim_{N\to\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(k) \frac{2\epsilon}{k^2+\epsilon^2} \mathsf{d}k + \text{coś dążącego do 0 przy } N \to \infty$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} f(k) \frac{2\epsilon}{k^2+\epsilon^2} \mathsf{d}k = |\text{podstawiamy } k = \epsilon l| = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\epsilon l) \frac{2\epsilon}{\epsilon^2 l^2 + \epsilon^2} \epsilon \mathsf{d}l$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} f(\epsilon l) \frac{2}{l^2+1} \mathsf{d}l,$$

czego granica, gdy $\epsilon \to 0$, jest równa

$$f(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2}{l^2+1} \mathsf{d}l = 2\pi f(0).$$

CBDO

1.2.3 Transformata odwrotna

Teraz poszukajmy transformaty odwrotnej. Mając daną funkcję f, zdefiniujmy

$$f_l(k) = f(k+l), \quad l \in \mathbb{R}$$

Mamy:

$$(\mathcal{F} f_l)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_l(k) e^{ikx} \mathsf{d}k = \int_{-\infty}^{+\infty} f(k+l) e^{ikx} \mathsf{d}k = \int_{-\infty}^{+\infty} f(k) e^{i(k-l)x} \mathsf{d}k$$

$$= e^{-ilx}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(k)e^{ikx}\mathsf{d}k = e^{-ilx}(\mathcal{F}f)(x); \tag{9}$$

a że, z wzoru udowodnionego w poprzedniej Subsection:

$$f_l(0) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}(\mathcal{F}f_l)(x)\mathsf{d}x,$$

to

$$f(l) = f_l(0) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}(\mathcal{F}f)(x)e^{-ilx}\mathsf{d}x \tag{10}$$

Podsumowanie – ważne wzorki:

- Transformata Fouriera:

$$(\mathcal{F}f)(x) \equiv \hat{f}(x) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(k)e^{ikx}\mathsf{d}k, \tag{11}$$

- Odwrotna transformata Fouriera:

$$(\mathcal{F}^{-1}g)(k) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} g(x)e^{-ikx}\mathsf{d}x. \tag{12}$$

1.2.4 Przestrzenie $\mathbb{C}^n$ z iloczynem skalarnym i $L^2(\mathbb{R})$

Przypomnijmy definicję wektorowej przestrzeni zespolonej z iloczynem skalarnym (przestrzeni unitarnej). Niech $x, y \in \mathbb{C}^N$, tzn.

$$x = (x^1, x^2, \ldots, x^N); \quad y = (y^1, y^2, \ldots, y^N), \quad \text{gdzie } x^i \in \mathbb{C}, \quad y^i \in \mathbb{C}.$$

Definiowaliśmy *iloczyn skalarny*:

$$(x|y) = \sum_{i=1}^{N} \bar{x}^i y^i$$

co dawało też definicję *normy* (długości wektora):

$$||x|| = \sqrt{(x|x)}$$

Łatwo sprawdzić, że tak zdefiniowany iloczyn skalarny ma własności:

1. $||x|| \geqslant 0$, $||x|| = 0 \Longleftrightarrow x = \mathbf{0}$;
2. $(x|\lambda y) = \lambda(x|y)$ oraz $(\lambda x|y) = \bar{\lambda}(x|y)$, gdzie $\lambda \in \mathbb{C}$ (liniowość w drugim argumencie, antyliniowość w pierwszym);

3. $(x|y+z) = (x|y) + (x|z)$ oraz $(x+y|z) = (x|z) + (y|z)$.

Zdefiniujmy teraz $L^2(\mathbb{R})$ – *przestrzeń funkcji o wartościach zespolonych, całkowalnych z kwadratem*. Należą do niej funkcje kawałkami ciągłe, całkowalne z kwadratem, tzn.

$$\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 \mathsf{d}x < \infty.$$

Wprowadźmy w $L^2(\mathbb{R})$ iloczyn skalarny wzorem

$$(f|g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{f(k)} g(k) \mathsf{d}k.$$

Łatwo się sprawdza, że spełnione są warunki 1. – 3. wyżej.

Iloczyn skalarny definiuje *normę* funkcji

$$||f|| = \int_{-\infty}^{+\infty} |f(k)|^2 \mathsf{d}k.$$

Obliczmy teraz *kwadrat normy transformaty Fouriera* funkcji:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |(\mathcal{F}f)(x)|^2 \mathsf{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{(\mathcal{F}f)(x)} (\mathcal{F}f)(x) \mathsf{d}x$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \overline{f(k)} e^{-ikx} \mathsf{d}k \right) (\mathcal{F}f)(x) \mathsf{d}x = \dots$$

Zmieniamy kolejność całkowania, i dostajemy...

$$\dots = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{f(k)} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} (\mathcal{F}f)(x) e^{-ikx} \mathsf{d}x \right) \mathsf{d}k = \dots$$

Ale! Wewnętrzna całka jest równa $2\pi f(k)$, więc ostatecznie dostajemy

$$\dots = 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} |f(k)|^2 \mathsf{d}k.$$

Udowodniona dopiero co równość nosi nazwę *wzoru Plancherela*:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |(\mathcal{F}f)(x)|^2 \mathsf{d}x = 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} |f(k)|^2 \mathsf{d}k \tag{13}$$

Interpretacja fizyczna.

1.3 Zasada nieoznaczoności

Zaczniemy od przypomnienia/(a jeśli ktoś nie miał do czynienia to od podania na nowo) niektórych postulatów i środków operacyjnych z mechaniki kwantowej.

Będziemy mieli do czynienia z cząstką, poruszającą się po prostej (sytuacja jednowymiarowa).

W mechanice kwantowej nie można (z reguły) przypisać cząstce konkretnego położenia. Zamiast tego operuje się *prawdopodobieństwami.* Służy do tego *funkcja falowa* $\Psi(x)$. Nie ma ona bezpośredniej interpretacji fizycznej. Ma ją natomiast kwadrat jej modułu: Wielkość:

$$|\Psi(x)|^2 \mathsf{d}x$$

jest prawdopodobieństwem tego, że cząstka (np. elektron) znajduje się w przedziale $[x, x + \mathsf{d}x]$.

Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki na całej prostej musi być równe 1, skąd otrzymujemy warunek *normalizacji* funkcji falowej:

$$\int_{\mathbb{R}} |\Psi(x)|^2 \mathsf{d}x = 1.$$

Mając funkcję falową, możemy otrzymać dowolne obserwable – w sensie statystycznym, tzn. otrzymać *wartości średnie* wielkości obserwowalnych. Weźmy np. położenie cząstki. Wartość średnia położenia jest

$$x_{\text{śr}} \equiv \langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} x |\Psi(x)|^2 \mathsf{d}x$$

Otrzymana z powyższego rachunku wartość średnia *nie znaczy*, że podczas pojedynczego pomiaru dostaniemy dokładnie $x_{\text{śr}}$; wartość tę dostaniemy jako *wartość średnią z wielu pomiarów.* Skoro tak, możemy mówić o *średnim odchyleniu kwadratowym*, obrazującym "rozrzut" wyników pomiarów wokół wartości średniej. Definiujemy je podobnie jak w statystyce. Tam, jeżeli mierzyliśmy jakąś wielkość, np. x, i w wyniku N pomiarów uzyskaliśmy wartość $x_{\text{śr}}$:

$$x_{\text{śr}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i,$$

to średnie odchylenie kwadratowe $(\Delta x)^2$ jest:

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (x_i - x_{\text{śr}})^2.$$

W naszym przypadku (mechanika kwantowa) mamy

$$(\Delta x)^2 = \int_{\mathbb{R}} (x - x_{\text{śr}})^2 |\Psi(x)|^2 \mathsf{d}x \tag{14}$$

Jedną z podstaw mechaniki kwantowej jest *dualizm korpuskularno-falowy.* Jednym z jego aspektów jest to, iż zamiast rozpatrywać funkcję falową jako funkcję *położenia*, można równoważnie rozpatrywać ją jako funkcję *pędu* cząstki. (Czasem jest to bardziej wygodne, czasem mniej, ale obie te przedstawienia są równoważne).

Zamiast *pędu* cząstki p, będziemy tutaj mieli do czynienia z *wektorem falowym* k, powiązanym z p prosto przez równość

$$p = \hbar k.$$

i będziemy rozpatrywać funkcję falową jako funkcję k.

Obie te postaci: Funkcja falowa jako funkcja położenia $\Psi(x)$, oraz jako funkcja wektora falowego $(\hat{\Psi}(k)$, są powiązane przez *transformację Fouriera*:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{ikx} \hat{\Psi}(k) \mathsf{d}k. \tag{15}$$

Funkcja falowa $\hat{\Psi}(k)$ ma analogiczną interpretację probabilistyczną, jak $\Psi(x)$: Wielkość

$$|\hat{\Psi}(k)|^2 \mathsf{d}k$$

jest prawdopodobieństwem tego, że wektor falowy cząstki jest zawarty między k a $k + \mathsf{d}k$; funkcja $\hat{\Psi}(k)$ jest *unormowana*, tzn. zachodzi

$$\int_{\mathbb{R}} |\hat{\Psi}(k)|^2 \mathsf{d}k = 1$$

co jest stwierdzeniem faktu, że suma prawdopodobieństw przyjmowania przez cząstkę wartósci pędu w przedziale $]-\infty, \infty[$ jest 1;

Wartością średnią wektora falowego cząstki w stanie opisywanym przez $\hat{\Psi}(k)$ jest liczba

$$k_{\text{śr}} \equiv \langle k \rangle = \int_{\mathbb{R}} k |\hat{\Psi}(k)|^2 \mathsf{d}k,$$

zaś średnie odchylenie kwadratowe dla wektora falowego cząstki w tym stanie jest równe

$$(\Delta k)^2 = \int_{\mathbb{R}} (k - k_{\text{śr}})^2 |\hat{\Psi}(k)|^2 \mathsf{d}k. \tag{16}$$

Mamy fundamentalnej ważności

Tw. (Zasada nieoznaczoności).

$$\Delta x \cdot \Delta k \geqslant \frac{1}{2}, \tag{17}$$

lub, co się częściej spotyka w fizyce – w wersji pędowej,

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2}. \tag{18}$$

Dow. Całka z kwadratu modułu dowolnej funkcji jest nieujemna, więc dla dowolnej $\lambda \in \mathbb{R}$ mamy

$$\int_{\mathbb{R}} |\Psi'(x) - x\lambda\Psi(x)|^2 \geqslant 0,$$

(tu prim oznacza pochodną). Rozpiszmy wyrażenie podcałkowe:

$$\int_{\mathbb{R}} |\Psi'(x)|^2 \mathsf{d}x + \lambda^2 \int_{\mathbb{R}} x^2 |\Psi(x)|^2 \mathsf{d}x - \lambda \int_{\mathbb{R}} x\bar{\Psi}(x)\Psi'(x)\mathsf{d}x - \lambda \int_{\mathbb{R}} x\bar{\Psi}'(x)\Psi(x)\mathsf{d}x \geqslant 0. \tag{19}$$

Przedostatni człon scałkujmy przez części:

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}} x\bar{\Psi}(x)\Psi'(x)\mathsf{d}x &= x\bar{\Psi}(x)\Psi(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{\mathbb{R}} (x\bar{\Psi}(x))'\Psi(x)\mathsf{d}x \\ &= 0 - \int_{\mathbb{R}} \bar{\Psi}(x)\Psi(x)\mathsf{d}x - \int_{\mathbb{R}} x\bar{\Psi}'(x)\Psi(x)\mathsf{d}x\end{aligned}$$

(skorzystaliśmy tu z faktu, iż $x\bar{\Psi}(x)\Psi(x)$ dąży w nieskończoności do zera). Wstawiając otrzymaną równość do (19) otrzymamy:

$$0 \leqslant \int_{\mathbb{R}} |\Psi'(x)|^2 \mathsf{d}x + \lambda^2 \int_{\mathbb{R}} x^2 |\Psi(x)|^2 \mathsf{d}x + \lambda \int_{\mathbb{R}} |\Psi(x)|^2 \mathsf{d}x.$$

Popatrzmy na powyższą nierówność jako na warunek nieujemności trójmianu kwadratowego w zmiennej λ. Trójmian jest *nieujemny*, co oznacza, że jego wyróżnik jest *niedodatni*; otrzymujemy więc:

$$\left(\int_{\mathbb{R}} |\Psi'(x)|^2 \mathsf{d}x\right) \cdot \left(\int_{\mathbb{R}} x^2 |\Psi(x)|^2 \mathsf{d}x\right) \geqslant \frac{1}{4}$$

Skorzystamy teraz z *wzoru Plancherela*; ostatnia nierówność jest równoważna:

$$\left(\int_{\mathbb{R}} k^2 |\Psi(k)|^2 \mathsf{d}k\right) \cdot \left(\int_{\mathbb{R}} x^2 |\Psi(x)|^2 \mathsf{d}x\right) \geqslant \frac{1}{4}$$

I to już jest prawie to co chcemy, bo wyrazy po lewej stronie to odpowiednio $(\Delta x)^2$ i $(\Delta k)^2$ – tyle że obliczane dla $x_{\text{śr}} = 0$ i $k_{\text{śr}} = 0$ (por. wzory (14) i (16). Na razie więc mamy

$$(\Delta x)^2 \cdot (\Delta k)^2 \geqslant \frac{1}{4} \quad \text{dla} \quad x_{\text{śr}} = 0 \ \text{ i } \ k_{\text{śr}} = 0.$$

Ale łatwo stąd otrzymać ogólny przypadek. Zmodyfikujmy funkcję $\Psi(x)$ następująco:

$$\Psi(x) \to e^{-ik_0 x}\Psi(x). \tag{20}$$

Przy takiej transformacji, kwadrat modułu funkcji falowej się nie zmienia:

$$|\Psi(x)|^2 \to |\Psi(x)|^2.$$

Teraz, ze względu na wzór (15) i wyrażenie na odwrotną transformatę Fouriera, mamy:

$$\hat{\Psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}\Psi(x)\mathsf{d}x,$$

skąd widzimy, że po modyfikacji (21), transformata $\hat{\Psi}(k)$ zmienia się na

$$\hat{\Psi}(k) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}e^{-ik_0x}\Psi(x)\mathsf{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(k+k_0)x}\Psi(x)\mathsf{d}x = \hat{\Psi}(k+k_0).$$

Mamy zatem

$$(\int_{\mathbb{R}} k^2|\Psi(k+k_0)|^2\mathsf{d}k)\cdot(\int_{\mathbb{R}} x^2|\Psi(x)|^2\mathsf{d}x) \geqslant \frac{1}{4}$$

co równoważnie można zapisać

$$(\int_{\mathbb{R}} (k-k_0)^2|\Psi(k)|^2\mathsf{d}k)\cdot(\int_{\mathbb{R}} x^2|\Psi(x)|^2\mathsf{d}x) \geqslant \frac{1}{4}.$$

Zróbmy teraz inną modyfikację:

$$\Psi(x) \to \Psi(x+x_0), \quad x_0 \in \mathbb{R}; \tag{21}$$

przy tej modyfikacji $|\hat{\Psi}(k)|^2$ *nie zmieni się*, bo

$$|\hat{\Psi}(k)|^2 \to \left|\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}\Psi(x+x_0)\mathsf{d}x\right| = \left|\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik(x-x_0)}\Psi(x)\mathsf{d}x\right|$$

$$= \left|e^{ikx_0}\hat{\Psi}(k)\right|^2 = \left|\hat{\Psi}(k)\right|^2$$

tak więc mamy

$$(\int_{\mathbb{R}} (k-k_0)^2|\Psi(k)|^2\mathsf{d}k)\cdot(\int_{\mathbb{R}} x^2|\Psi(x+x_0)|^2\mathsf{d}x) \geqslant \frac{1}{4},$$

co ostatecznie daje

$$(\int_{\mathbb{R}} (k-k_0)^2|\Psi(k)|^2\mathsf{d}k)\cdot(\int_{\mathbb{R}} (x-x_0)^2|\Psi(x)|^2\mathsf{d}x) \geqslant \frac{1}{4}.$$

Tak więc dla *dowolnych* $x_0 = x_{\text{śr}}$, $k_0 = k_{\text{śr}}$ mamy

$$(\Delta k)^2\cdot(\Delta x)^2 \geqslant \frac{1}{4}.$$

CBDO

2 Szeregi Fouriera

Niech f będzie funkcją na $\mathbb{R}$.

Def. Mówimy, że f jest *okresowa* o okresie T, jeżeli dla każdego $x \in \mathbb{R}$ zachodzi

$$f(x+T) = f(x).$$

Poniżej założymy, że okres rozpatrywanych funkcji jest równy $T = 2\pi$, co żadną stratą ogólności nie jest.

Tw. Każda funkcja okresowa o okresie 2π, przedziałami ciągła wraz ze swoją pochodną, przedziałami monotoniczna i spełniająca w punktach nieciągłości p warunek:

$$f(p) = \frac{f_+ + f_1}{2} \tag{22}$$

gdzie: $f_+ = \lim_{x \to p_+} f(x)$, $f_- = \lim_{x \to p_-} f(x)$ daje się rozwinąć w szereg Fouriera.

*************************************8

Def. *Rozwinięciem funkcji okresowej f w szereg Fouriera* nazywamy przedstawienie jej jako kombinacji liniowej (w ogólności, nieskończenie wielu) prostych funkcji okresowych $\{\phi_k(x)\}$:

$$f(x) = \sum_k c_k \phi_k(x) \tag{23}$$

Poniżej wybierzemy okres równy $T = 2\pi$, co żadną stratą ogólności nie jest.

Jako "prostych funkcji okresowych" najczęściej używamy (w zależności od sytuacji):

1. $\{\sin(kx)\}, \quad k \in \mathbb{N}$;
2. $\{\cos(kx)\}, \quad k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$;
3. $\{e^{ikx}\}, \quad k \in \mathbb{Z}$.

Pojawiają się naturalne pytania: • Czy każdą funkcję okresową można rozwinąć w szereg Fouriera? • • Jak otrzymać współczynniki szeregu? • • • Czy otrzymany szereg jest zbieżny?

W pełnej ogólności na te pytania nie odpowiemy[1] Zacznijmy od sytuacji, która jest stosunkowo łatwa, a jednocześnie dostatecznie ogólna.

[1]Historycznie, rozwój teorii szeregów Fouriera doprowadził na przełomie XIX i XX w. do wielu nowych pojęć, z których wyrosła spora część dwudziestowiecznej matematyki.

Oznaczmy przez $C^\infty(T)$ zbiór (przestrzeń wektorową) funkcji okresowych (o okresie 2π) na prostej, nieskończenie wiele razy różniczkowanych, tzn.

$$C^\infty(T) := \{f \in C^\infty(\mathbb{R}) : \forall_{x\in\mathbb{R}} : f(x) = f(x+2\pi).\}$$

Uwaga. Dla funkcji okresowej, gdy całkujemy po pełnym okresie, możemy wziąć *dowolny* przedział o długości okresu i całka od tego nie zależy: **RYS.**

$$\int\limits_a^{2\pi+a} f(x)\mathsf{d}x = \int\limits_0^{2\pi} f(x)\mathsf{d}x = \int\limits_{-\pi}^{\pi} f(x)\mathsf{d}x$$

Dow. Rachujemy:

$$\int\limits_a^{2\pi+a} f(x)\mathsf{d}x = \int\limits_a^{2\pi} f(x)\mathsf{d}x + \int\limits_{2\pi}^{2\pi+a} f(x)\mathsf{d}x = \int\limits_a^{2\pi} f(x)\mathsf{d}x + \int\limits_0^{a} f(x)\mathsf{d}x$$

$$= \int\limits_0^{2\pi} f(x)\mathsf{d}x.$$

CBDO

Za zbiór funkcji $\{\phi_k(x)\}$, w które będziemy rozwijać funkcje okresowe, weźmy teraz zbiór exponensów: $\{\phi_k(x) = e^{ikx}\}$, $k \in \mathbb{Z}$.

Mamy następującą prostą własność exponensów:

$$\int\limits_0^{2\pi} e^{ikx}\mathsf{d}x = \begin{cases} \frac{1}{ik}e^{ikx}|_0^{2\pi} = 0 & \text{dla} \quad k \neq 0 \\ 2\pi & \text{dla} \quad k = 0 \end{cases}$$

Wykorzystując tę własność, łatwo dostaniemy wzór na współczynniki rozwinięcia w szereg (23). Mamy:

$$\int\limits_0^{2\pi} f(x)e^{-inx}\mathsf{d}x = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \int\limits_0^{2\pi} c_k e^{i(k-n)x}\mathsf{d}x = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c_k\delta_{k,n} = 2\pi c_n,$$

czyli

$$c_n = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^{2\pi} f(x)e^{-inx}\mathsf{d}x.$$

3 Zadania

1. Znaleźć transformaty Fouriera następujących funkcji:

   (a) Funkcja charakterystyczna odcinka $[-a, a]$ (tzn. równa 1 dla $x \in [-a, a]$ oraz 0 poza nim)

   (b) Funkcja charakterystyczna odcinka $[0, 2a]$.

   (c) Funkcja równa $1 - x^2$ dla $x \in [-1, 1]$ oraz 0 poza tym odcinkiem.

   (d) Funkcja $f(x) = \frac{1}{x^2+a^2}$, $a > 0$.

   (e) Funkcja $f(x) = \frac{\cos mx}{x^2+a^2}$.

   (f) Funkcja $f(x) = \frac{1}{x^4+a^4}$.

   (g) Funkcja Gaussa $f(x) = e^{-ax^2}$.

2. Policzyć prawą stronę zasady nieoznaczoności dla funkcji z zadania 1 a, c, d, g. Dla której funkcji niepewność $\Delta x \cdot \Delta k$ jest najmniejsza? *Uwaga.* Przy porównywaniach trzeba pamiętać o *unormowaniu* funkcji!