

FRANCZIA TANÁS

A KVANTUMMECHANIKAI IMPULZUS ELTOLÁSI SZIMMETRIÁVAL TÖRTÉNŐ
BEVEZETÉSÉRŐL III.

ABSTRACT: *On the Introduction of the Quantum Mechanical
Momentum with the Method of Moving Symmetry III.*

*In this paper we continue building up the system of
the axioms, theorems and definitions necessary to
introduce the quantum mechanical momentum with the
method of moving symmetry. As some theorems given in
this paper are well-known from the literature their
verifications are omitted and the reader is referred
to the corresponding literature.*

*We investigate the conditions of being
time-independent for the average values of
quantum-mechanical quantities represented by
time-independent operators, and the relationships
between the above-mentioned conditions.*

Ez a dolgozat egy tanulmány harmadik része, melynek
célja egy lehetséges módszert adni a kvantummechanikai
impulzusnak a címben jelzett úton történő bevezetésére az
egyetemi oktatás szemináriumai számára.

A tanulmány előző két részében a kvantummechanikai
impulzus eltolási szimmetriával történő bevezetéséhez
szükséges definíció-, axióma- és tételrendszer közlésével
foglalkoztunk, így többek között bevezettük a Kronecker-,

III. Dirac-típusú ortonormáltsági feltételeket kielégítő állapotfüggvények fogalmát, az ezen állapotfüggvények hely szerinti és időbeli változását leíró időtől függő Schrödinger-egyenletet, melyet másképpen állapotegyenletnek is hívunk. Jelen dolgozatban folytatjuk a kvantummechanikai impulzus eltolási szimmetriával történő bevezetéséhez szükséges definíciók, axiómák, tételek megadását. A nem bizonyított tételeknél továbbra is III-re hivatkozunk a bizonyítást illetően.

A II. részben a 7. tétel, a VIII. axióma és együttes következményük alapján beláttuk, hogy $\hat{O}\psi = 0\psi$ esetén 0 mérési eredményként való felléptének valószínűsége 1, a 13. tételben pedig az adódott, hogy $\hat{O}\psi = 0\psi$ szükséges és elégséges feltétele annak, hogy az $\hat{O}$ operátorral reprezentált fizikai mennyiség szórása nulla legyen. Így nyilvánvaló, hogy $\hat{O}\psi \neq 0\psi$ esetén akármilyen $0 \in \mathbb{R}$ -re a fizikai mennyiség méréséhez zérustól különböző szórás fog tartozni, azaz a rendszer állapotfüggvénye, ψ ebben az esetben nem határozza meg egyértelműen az $\hat{O}$ operátorral reprezentált fizikai mennyiség mérésének eredményét. Mivel az állapotfüggvény a kvantummechanika szerint a rendszerről minden információt magában foglal, előző kijelentésünk úgy is fogalmazható, hogy $\hat{O}\psi \neq 0\psi$ esetén a rendszer állapota nem határozza meg egyértelműen az illető fizikai mennyiség mérésének eredményét. Ugyanakkor az eddigiek alapján $\hat{O}\psi = 0\psi$ esetén a rendszer állapota egyértelműen meghatározza az $\hat{O}$ operátorral reprezentált fizikai mennyiség mérésének eredményét.

12. definíció: Az $\hat{O}$ operátorral reprezentált fizikai mennyiség akkor, és csak akkor létezik a rendszer valamely ψ állapotában, ha ψ egyértelműen meghatározza e mennyiség

mérésének eredményét, azaz ha fennáll $\hat{O}\psi = 0\psi$, $0 \in R$, ahol 0 éppen a mérés eredménye.

XI. axióma: Legyen $\hat{O}$ egy fizikai mennyiség operátora a nem-relativisztikus, a spint figyelmen kívül hagyó kvantummechanikában. Ha a rendszer Schrödinger-féle konfigurációs térbeli állapotfüggvénye, ψ nem sajátfüggvénye $\hat{O}$ -nak, akkor az $\hat{O}$ által reprezentált fizikai mennyiség mérése a rendszerben két fázisból kell hogy álljon. Az első fázisban a rendszerben egy olyan állapotváltozást kell előidéznünk, melynek során az állapotfüggvény átmegy az $\hat{O}$ operátor valamelyik sajátfüggvényébe. Az így kapott állapotfüggvény az előbbiek alapján már egyértelműen meghatározza a fizikai mennyiség mérésének eredményét, melyet a mérés második fázisa szolgáltat.

Ezután vizsgáljuk meg két fizikai mennyiség egyidejű létezésének feltételét, azt, hogy milyen körülmények között határozza meg a rendszer állapotfüggvénye egyértelműen egyidejű mérésük egy-egy eredményét. Ha feltételként szabjuk, hogy a két mérés egymást ne zavarja, akkor nyilván most egyszerre kell fennállnia mind a két mennyiségre annak a feltételnek, melyet egyetlen mennyiség létezéséhez állapítottunk meg: az állapotfüggvény mindkét fizikai mennyiség operátorának sajátfüggvénye kell hogy legyen. Közös sajátfüggvénye viszont csak egymással felcserélhető operátoroknak lehet, így az együttlétező fizikai mennyiségekhez tartozó operátoroknak felcserélhetőeknek kell lenniük. A fizikai mennyiségekhez tartozó operátorok felcserélhetősége tehát szükséges feltétele az általuk reprezentált fizikai mennyiségek egyidejű létezésének. Most

vizsgáljuk meg e feltétel elégségességét, feltéve, hogy legalább az egyik mennyiség létezik. Ha két egymással felcserélhető lineáris operátor sajátértékspektrumai nem elfajultak, akkor a két operátor sajátfüggvényei közösek. Így nem elfajult spektrumu lineáris, hermitikus operátorokkal reprezentált fizikai mennyiségek együttlétezésének az operátorok felcserélhetősége szükséges és elégséges feltétele, ha legalább az egyik mennyiség létezik az adott kvantumállapotban.

Ha két fizikai mennyiség operátorai közül akár csak az egyik sajátértékspektruma is elfajult, akkor a két operátornak létezik ugyan közös teljes sajátfüggvény-rendszere, de nem feltétlenül közös minden egyes sajátfüggvényük. Emiatt logikailag lehetséges, hogy ebben az esetben két fizikai mennyiség egyidejű létezésének az őket reprezentáló operátorok felcserélhetősége csak szükséges és nem elégséges feltétele. Ugyanakkor nem zárható ki az elégséges mivolta sem a felcserélhetőségnek. A kérdés eldöntésére a későbbiekben még visszatérünk.

14. tétel: Valamely az időtől explicite függő operátorral reprezentált fizikai mennyiség mérésekor kapott várható érték idő szerinti teljes deriváltja:

$$\frac{d}{dt} \left(\psi, \hat{O} \psi \right) = \left(\psi, \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \psi \right) + \frac{2\pi i}{h} \left(\psi, (\hat{H} \hat{O} - \hat{O} \hat{H}) \psi \right), \quad (3)$$

ahol ψ a rendszer mérés előtti állapotfüggvénye, $\hat{O}$ az illető mennyiség operátora. $\hat{H}$ a rendszer Hamilton-operátora.

Következmény: Ha az illető fizikai mennyiség operátora nem függ explicite az időtől, akkor az általa reprezentált fizikai mennyiség várható értékének idő szerinti teljes

deriváltja:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi, \hat{O} \psi \rangle = \frac{2\pi i}{h} \langle \psi, [\hat{O} \hat{H} - \hat{H} \hat{O}] \psi \rangle \quad (4)$$

ld. [1] 118-119. oldal.

Következmény: Ha egy kvantummechanikai rendszerben mérhető, az időtől expliciten független operátorral reprezentált fizikai mennyiség operátora felcserélhető a rendszer Hamilton-operátorával, akkor várható értékének idő szerinti deriváltja nulla, így a várható érték az időben állandó.

13. definíció: Ha egy fizikai mennyiség várható értéke időben állandó, akkor a mennyiséget mozgásállandónak nevezzük.

15. tétel: Ha egy kvantummechanikai rendszer Hamilton-operátora nem függ expliciten az időtől, akkor a rendszer állapotegyenletének vannak

$$\varphi_k(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) \exp \left[-\frac{2\pi i}{h} E_k t \right]$$

alakú megoldásai, melyek a konfigurációs térbeli koordináta változóknak az időváltozótól való szorzatalaku szeparációjával kaphatók, ahol $\hat{H}\varphi_k = E_k \varphi_k$. A Hamilton-operátornak diszkrét sajátértékspektrum esetén megszámlálhatóan végtelen sok, folytonos sajátértékspektrum esetén pedig kontinuumszámosságban végtelen sok sajátfüggvénye van. Mivel az időtől függő Schrödinger-egyenlet homogén és lineáris, diszkrét nem elfajult sajátértékspektrum esetén

$$\sum_{k=1}^{\infty} c_k \varphi_k(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) \exp \left[-\frac{2\pi i}{h} E_k t \right],$$

folytonos nem elfajult sajátértékspektrum esetén

$$\int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} c_H \varphi_H(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) \exp\left(-\frac{2\pi i}{h} H t\right) dH,$$

vegyes típusu nem elfajult sajátértékspektrum esetén pedig

$$\sum_{k=1}^{\infty} c_k \varphi_k(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) \exp\left(-\frac{2\pi i}{h} H_k t\right) + \\ + \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} c_H \varphi_H(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) \exp\left(-\frac{2\pi i}{h} H t\right) dH$$

is megoldása az időtől expliciten független Hamilton-operátoru, időtől függő Schrödinger-egyenletnek, ahol a c_k , ill. c_H mennyiségek állandóak, és a normálási feltétel következtében ki kell hogy elégítsék a spektrum diszkrét, folytonos, vagy vegyes típusától függően a

$$\sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 = 1, \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} |c_H|^2 dH = 1, \text{ ill. } \sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 + \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} |c_H|^2 dH = 1 \quad (5)$$

összefüggéseket.

Az (5a), (5b), (5c) egyenleteknek megfelelő összefüggések elfajult spektrumu Hamilton-operátor esetében a következők:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{f_k} |c_{k_r}|^2 = 1, \quad (5a') \quad \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} \sum_{r=1}^{f_H} |c_{Hr}|^2 dH = 1, \quad (5b')$$

$$\sum_{l=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{f_l} |c_{l_r}|^2 + \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} \sum_{r=1}^{f_H} |c_{Hr}|^2 dH = 1$$

Ha egy időtől expliciten független Hamilton-operátor diszkrét, nem elfajult spektrumu, akkor a $\varphi_k(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) \exp\left(-\frac{2\pi i}{h} H_k t\right)$ függvények összessége, ha vegyes nem elfajult

spektrumu, akkor a

$$\varphi_l \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H_l t \right),$$

$$\varphi_H \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H t \right)$$

függvények összessége teljes függvényrendszert alkot. A megfelelő teljes függvényrendszerek elemel elfajult spektrumu Hamilton-operátor esetén rendre a következők: $l=1, \dots, \infty$

$$\varphi_{lr} \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H_l t \right), \quad l=1, \dots, \infty, \quad r=1, \dots, f_l,$$

$$\varphi_{Hr} \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H t \right) \quad H_\alpha \leq H \leq H_\beta, \quad r=1, 2, \dots, f_H$$

$$\varphi_{lr} \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H_l t \right) \text{ és}$$

$$\varphi_{Hr} \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H t \right), \text{ ahol } l=1, 2, \dots, \infty$$

$$r=1, \dots, f_l, H_\alpha \leq H \leq H_\beta$$

Ezért az időtől független Hamilton-operátorhoz tartozó, a Schrödinger-féle konfigurációs térrel azonos konfigurációs téren értelmezett állapotfüggvények rendre a

$$\psi = \sum_{l=1}^{\infty} c_l \varphi_l \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H_l t \right),$$

$$\psi = \int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H \varphi_H \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H t \right) dH$$

$$\psi = \sum_{l=1}^{\infty} c_l \varphi_l \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H_l t \right) +$$

$$+ \int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H \varphi_H \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H t \right) dH$$

alakokban írhatók fel attól függően, hogy a kifejtéshez használt teljes függvényrendszerhez tartozó, időtől expliciten független Hamilton-operátor sajátértékspektruma diszkrét,

folytonos vagy vegyes típusu. A fenti kifejtések nem elfajult spektrumu Hamilton-operátor sajátfüggvényrendszerének alkalmazása esetében érvényesek. Elfajult spektrumu Hamilton-operátor sajátfüggvényrendszerének alkalmazása esetén a megfelelő összefüggések diszkrét, folytonos ill. vegyes spektrum esetén rendre:

$$\psi = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{f_l} c_{lr} \varphi_{lr} \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} E_l t \right),$$

$$\psi = \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} \sum_{r=1}^{f_H} c_{Hr} \varphi_{Hr} \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H t \right) dH$$

$$\psi = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{f_l} c_{lr} \varphi_{lr} \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} E_l t \right) +$$

$$+ \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} \sum_{r=1}^{f_H} c_{Hr} \varphi_{Hr} \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H t \right) dH,$$

melyekhez a következő normálási feltételek tartoznak:

$$\sum_{l=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{f_l} |c_{lr}|^2 = 1,$$

$$\int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} \sum_{r=1}^{f_H} |c_{Hr}|^2 dH = 1,$$

és

$$\sum_{l=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{f_l} |c_{lr}|^2 + \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} \sum_{r=1}^{f_H} |c_{Hr}|^2 dH = 1.$$

A továbbiakban megvizsgáljuk a közölt megoldások fizikai realitásának feltételeit, és létezésük néhány következményét.

Először a $r_k \left(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n \right) \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H_k t \right)$ alakú állapotfüggvényekkel foglalkozunk. A fenti alakú egyre normált megoldások a Kronecker-típusú ortonormáltsági feltételeket elégítik ki. Mint láttuk a 15. tételben az ilyen alakú megoldások létezésének szükséges és elégséges feltétele az, hogy a rendszer Hamilton-operátora expliciten ne függjön az időtől.

Ilyen alakú megoldásokra azt is láttuk, hogy $\hat{H} \psi_k = O_k \psi_k$. Így ha $\hat{H}$ valamilyen fizikai mennyiség operátora lenne, akkor a szóbanforgó alakú állapotfüggvényekkel bíró rendszerekben létezne az általa reprezentált fizikai mennyiség. Ezekben a kvantumállapotokban bármely az időtől expliciten nem függő operátorral reprezentált fizikai mennyiség várható értéke időben állandó [1], ezért az ilyen kvantumállapotokat stacionárius állapotoknak hívjuk. Ilyen kvantumállapotban még abban az esetben is állandó a $(\psi, \hat{O} \psi)$ várható érték, ha $\hat{O} \hat{H} = \hat{H} \hat{O}$. Ez nem mond ellent az időtől expliciten független operátorral reprezentált fizikai mennyiségek várható értékének időben való változását megadó tételnek. E szerint:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\psi, \hat{O} \psi) &= \frac{2\pi i}{h} \left(\psi, (\hat{H} \hat{O} - \hat{O} \hat{H}) \psi \right) = \\ &= \frac{2\pi i}{h} \left[r_k e^{-\frac{2\pi i}{h} H_k t}, (\hat{H} \hat{O} - \hat{O} \hat{H}) r_k e^{-\frac{2\pi i}{h} H_k t} \right] = \\ &= e^{-\frac{2\pi i}{h} H_k t} e^{-\frac{2\pi i}{h} H_k t} \cdot \frac{2\pi i}{h} \left(r_k, (\hat{H} \hat{O} - \hat{O} \hat{H}) r_k \right) = \\ &= \frac{2\pi i}{h} \left[(r_k, \hat{H} \hat{O} r_k) - (r_k, \hat{O} \hat{H} r_k) \right] = \\ &= \frac{2\pi i}{h} \left[(\hat{H} r_k, \hat{O} r_k) - (r_k, \hat{O} \hat{H} r_k) \right] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{2\pi i}{\hbar} \left[\left(\hat{H}_k \varphi_k, \hat{O} \varphi_k \right) - \left(\varphi_k, \hat{H}_k \hat{O} \varphi_k \right) \right] = \\
 &= \frac{2\pi i}{\hbar} \left[\hat{H}_k^* \left(\varphi_k, \hat{O} \varphi_k \right) - \hat{H}_k \left(\varphi_k, \hat{O} \varphi_k \right) \right] = \\
 &= \frac{2\pi i}{\hbar} \left(\varphi_k, \hat{O} \varphi_k \right) \left(\hat{H}_k^* - \hat{H}_k \right).
 \end{aligned}$$

A $\left(\hat{H}_k^* - \hat{H}_k \right)$ különbség értéke nulla. Ez az állítás azon alapul, hogy $\hat{H}$ hermitikus operátor, s mint ilyen valós sajátértékekkel rendelkezik csak.

Időtől explicite független operátorral reprezentált fizikai mennyiség esetén $\hat{O}\hat{H} = \hat{H}\hat{O}$ tehát nem szükséges csak elégséges feltétele a fizikai mennyiség várható értéke időbeli állandóságának. Feltehető az a kérdés is, hogy a

$\psi = \varphi_k \exp \left(-\frac{2\pi i}{\hbar} \hat{H}_k t \right)$ állapotfüggvény alak vajon csupán elégséges feltétele-e egy időtől explicite független operátorral reprezentált fizikai mennyiség várható értéke időbeli állandóságának, vagy e feltétel szükséges is. A továbbiakban ezt vizsgáljuk meg, $\hat{H}\hat{O} = \hat{O}\hat{H}$ esetében.

XII. axióma. Legyen $\hat{H}$ egy időtől explicite független, a kvantummechanikai rendszer konfigurációs terében értelmezett állapotfüggvényekre ható Hamilton-operátor. Mint tudjuk tetszőleges állapotfüggvény kifejthető ezen operátor sajátfüggvényei szerint. Ha ez a Hamilton-operátor vegyes, nem elfajult spektrumu, akkor a kifejtés alakja, mint láttuk az alábbi:

$$\psi = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \varphi_k + \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} c_H \varphi_H \exp \left(-\frac{2\pi i}{\hbar} H t \right) dH$$

A vizsgált kvantummechanikai rendszer akkor rendelkezik a fenti állapotfüggvény-alakkal (ill. ennek speciális eseteivel, a diszkrét vagy a folytonos spektrumu alakkal), ha időtől független, nem elfajult spektrumu Hamilton-operátora úgy alakult ki, hogy a rendszer előzőleg időtől explicit függő Hamilton-operátorának explicit időfüggését megszüntettük. A $\psi \in$ Hilbert-tér feltételből levezethető

$$\sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 + \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} |c_H|^2 dH = 1 \quad \text{egyenlet valószínűségi jelentése}$$

pedig az, hogy az ezzel az állapotfüggvénnyel bíró rendszer biztosan spontán átmegy valamelyik $\varphi_k \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H_k t \right)$ vagy $\varphi_H \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H t \right)$ állapotfüggvényű állapotba. Mivel pedig a megfelelő átmeneti valószínűségek értéke $|c_k|^2$ ill. $|c_H|^2 dH$, ugyanakkor a lehetséges átmenetek összessége egymást kizáró események teljes rendszerét alkotja, ezen események összegének bekövetkezési valószínűsége 1. Nyilvánvaló, hogy a diszkrét spektrumu Hamilton-operátorral bíró rendszer esetében az egymást kizáró események összegét érintő

$$\text{összefüggés} \quad \sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 = 1 \quad \text{alaku, ugyanez az összefüggés}$$

folytonos spektrumu időtől független Hamilton-operátor

$$\text{esetében} \quad \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} |c_H|^2 dH = 1 \quad \text{alaku. A XII. axiómában eddig}$$

felírt összefüggések alakja elfajult spektrum esetén rendre a következő:

$$\psi = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{r_k} c_{kr} \varphi_{kr} e^{-\frac{2\pi i}{h} H_k t} + \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} \sum_{r=1}^{r_H} c_{Hr} \varphi_{Hr} e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} dH,$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{f_k} |c_{kr}|^2 + \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} \sum_{r=1}^{f_H} |c_{Hr}|^2 dH = 1 \quad ,$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{f_k} |c_{kr}|^2 = 1, \quad \text{ill.} \quad \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} \sum_{r=1}^{f_H} |c_{Hr}|^2 dH = 1 \quad .$$

Térjünk most vissza annak megvizsgálására hogyan válik $\bar{\psi} = (\psi, \hat{\psi})$ időben állandóvá, akkor ha

$$\psi = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \varphi_k e^{-\frac{2\pi i}{h} H_k t} + \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} c_H \varphi_H e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} dH \quad \text{és} \quad \hat{\psi} = \hat{\psi},$$

ahol $\hat{H}\varphi_k = H_k \varphi_k$, ill. $\hat{H}\varphi_H = H \varphi_H$ és $\hat{\psi}$ explicite független az időtől.

$$\bar{\psi} = (\psi, \hat{\psi}) = \left[\sum_{k=1}^{\infty} c_k \varphi_k e^{-\frac{2\pi i}{h} H_k t} + \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} c_H \varphi_H e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} dH \right],$$

$$\hat{\psi} \left[\sum_{l=1}^{\infty} c_l \varphi_l e^{-\frac{2\pi i}{h} H_l t} + \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} c_H \varphi_H e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} dH \right] -$$

$$= \left[\sum_{k=1}^{\infty} c_k \varphi_k e^{-\frac{2\pi i}{h} H_k t}, \hat{\psi} \sum_{l=1}^{\infty} c_l \varphi_l e^{-\frac{2\pi i}{h} H_l t} \right] +$$

$$+ \left[\sum_{k=1}^{\infty} c_k \varphi_k e^{-\frac{2\pi i}{h} H_k t}, \hat{\psi} \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} c_H \varphi_H e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} dH \right] +$$

$$\begin{aligned}
 & + \left[\frac{\Pi_\beta}{\int_{\Pi_\alpha} c_H r_H e^{-\frac{2\pi i}{h} \Pi t} d\Pi, \hat{\phi} \sum_{l=1}^{\infty} c_l r_l e^{-\frac{2\pi i}{h} \Pi_l t} \right], \\
 & + \left[\frac{\Pi_\beta}{\int_{\Pi_\alpha} c_H r_H e^{-\frac{2\pi i}{h} \Pi t} d\Pi, \hat{\phi} \int_{\Pi_\alpha} c_H r_H e^{-\frac{2\pi i}{h} \Pi t} d\Pi \right] = \\
 & = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} c_k^* c_l \left(r_k^*, \hat{\phi} r_l \right) e^{\frac{2\pi i}{h} (\Pi_k - \Pi_l) t} + \\
 & + \sum_{k=1}^{\infty} \int_{\infty} \left[c_k^* e^{\frac{2\pi i}{h} \Pi_k t} \frac{\Pi_\beta}{\int_{\Pi_\alpha} c_H r_k^* \hat{\phi} r_H e^{-\frac{2\pi i}{h} \Pi t} d\Pi} \right] dV + \\
 & + \sum_{l=1}^{\infty} c_l e^{-\frac{2\pi i}{h} \Pi_l t} \int_{\infty} \left[\frac{\Pi_\beta}{\int_{\Pi_\alpha} c_H r_H e^{-\frac{2\pi i}{h} \Pi t} d\Pi} \right]^* \hat{\phi} r_l dV + \\
 & + \int_{\infty} \left[\left[\frac{\Pi_\beta}{\int_{\Pi_\alpha} c_H r_H e^{-\frac{2\pi i}{h} \Pi t} d\Pi} \right]^* \cdot \frac{\Pi_\beta}{\int_{\Pi_\alpha} c_H \hat{\phi} r_H e^{-\frac{2\pi i}{h} \Pi t} d\Pi} \right] dV = \\
 & = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} c_k^* c_l e^{\frac{2\pi i}{h} (\Pi_k - \Pi_l) t} \left(r_k, \hat{\phi} r_l \right) + \\
 & + \sum_{k=1}^{\infty} \left[c_k^* e^{\frac{2\pi i}{h} \Pi_k t} \cdot \frac{\Pi_\beta}{\int_{\Pi_\alpha} c_H e^{-\frac{2\pi i}{h} \Pi t} \left(r_k, \hat{\phi} r_H \right) d\Pi} \right] +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \sum_{l=1}^{\infty} \left[c_l e^{-\frac{2n1}{h} \Pi_l t} \cdot \int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} c_{\Pi}^{*} e^{\frac{2n1}{h} \Pi t} \left(\varphi_{\Pi}, \hat{\partial} \varphi_l \right) d\Pi \right] + \\
 & + \int_{\infty} \left[\int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} \int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} c_{\Pi}^{*} c_{\Pi'} e^{\frac{2n1}{h} (\Pi - \Pi') t} \varphi_{\Pi}^{*} \hat{\partial} \varphi_{\Pi'} d\Pi d\Pi' \right] dV = \\
 & = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} c_k^{*} c_l e^{\frac{2n1}{h} (\Pi_k - \Pi_l) t} \left(\varphi_k, \hat{\partial} \varphi_l \right) + \\
 & + \sum_{k=1}^{\infty} c_k^{*} e^{\frac{2n1}{h} \Pi_k t} \cdot \int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} c_{\Pi} e^{-\frac{2n1}{h} \Pi t} \left(\varphi_k, \hat{\partial} \varphi_{\Pi} \right) d\Pi + \\
 & + \sum_{l=1}^{\infty} c_l e^{-\frac{2n1}{h} \Pi_l t} \cdot \int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} c_{\Pi}^{*} e^{\frac{2n1}{h} \Pi t} \left(\varphi_{\Pi}, \hat{\partial} \varphi_l \right) d\Pi + \\
 & + \int_{\infty} \left[\int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} \int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} c_{\Pi}^{*} c_{\Pi'} e^{\frac{2n1}{h} (\Pi - \Pi') t} \varphi_{\Pi}^{*} \hat{\partial} \varphi_{\Pi'} d\Pi d\Pi' \right] dV = \\
 & = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} c_k^{*} c_l e^{\frac{2n1}{h} (\Pi_k - \Pi_l) t} \left(\varphi_k, \hat{\partial} \varphi_l \right) +
 \end{aligned}$$

$$+ \sum_{k=1}^{\infty} c_k^* e^{\frac{2\pi i}{h} H_k t}, \int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} \left(r_k, \hat{O} r_H \right) dH =$$

$$+ \sum_{l=1}^{\infty} c_l e^{-\frac{2\pi i}{h} H_l t}, \int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H^* e^{\frac{2\pi i}{h} H t} \left(r_H, \hat{O} r_l \right) dH =$$

$$+ \int_{H_\alpha}^{H_\beta} \int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H^* c_H e^{\frac{2\pi i}{h} (H-H') t} \left(r_H^* \hat{O} r_{H'} \right) dH dH' =$$

A fenti egyenlőség sorban figyelembe vettük az alábbi egyenlőségeket:

$$(a) \quad \int_{\infty} \left[c_k^* e^{\frac{2\pi i}{h} H_k t}, \int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H r_k^* \hat{O} r_H e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} dH \right] dV =$$

$$= c_k^* e^{\frac{2\pi i}{h} H_k t}, \int_{H_\alpha}^{H_\beta} \left[\int_{\infty} c_H r_k^* \hat{O} r_H e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} dV \right] dH,$$

$$(b) \quad \int_{\infty} \left[\left[\int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H r_H \exp \left(-\frac{2\pi i}{h} H t \right) dH \right]^* \hat{O} r_l \right] dV =$$

$$= \int_{H_\alpha}^{H_\beta} \left[c_H^* e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} \left(\int_{\infty}^{\infty} \psi_H^* \hat{O} \psi_L dv \right) \right] dH = \int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H^* e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} (\psi_H, \hat{O} \psi_L) dH,$$

$$\int_{\infty}^{\infty} \left[\int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H^* \psi_H^* e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} dH \cdot \int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H \hat{O} \psi_H e^{-\frac{2\pi i}{h} H t} dH \right] dv =$$

$$= \int_{\infty}^{\infty} \left[\int_{H_\alpha}^{H_\beta} \int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H^* c_{H'} e^{\frac{2\pi i}{h} H t} \cdot e^{-\frac{2\pi i}{h} H' t} \psi_H^* \hat{O} \psi_{H'} dH dH' \right] dv$$

Mivel $\hat{O}H = H\hat{O}$, és egyik operátor sajátértékspektruma sem elfajult, a két lineáris hermitikus operátor sajátfüggvényei közösek. Így $\hat{O}\psi_L = O_L \psi_L$ és $\hat{O}\psi_H = O_H \psi_H$. Ezt valamint a sajátfüggvények Kronecker- ill. Dirac-típusú ortonormáltságát figyelembe véve Ő-ra kapott előző végeredményünk az alábbi alakot ölti:

$$\sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 O_k + O + O + \int_{H_\alpha}^{H_\beta} \int_{H_\alpha}^{H_\beta} c_H^* c_{H'} e^{\frac{2\pi i}{h} (H-H') t} O_{H'} \delta(H-H') dH dH',$$

ugyanis

$$\int_{\infty} \left[\int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} \int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} c_{\Pi}^* c_{\Pi'} e^{\frac{2\pi i}{h} (\Pi - \Pi') t} \left(\varphi_{\Pi} \hat{O} \varphi_{\Pi'} \right) d\Pi d\Pi' \right] dV =$$

$$= \int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} \int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} c_{\Pi}^* c_{\Pi'} e^{\frac{2\pi i}{h} (\Pi - \Pi') t} \left(\varphi_{\Pi} \hat{O} \varphi_{\Pi'} \right) d\Pi d\Pi' \quad \text{-ben}$$

$\left(\varphi_{\Pi} \hat{O} \varphi_{\Pi'} \right) = 0_{\Pi} \delta(\Pi - \Pi')$, továbbá a 2. és 3. tag azonosan nulla, mert ezek olyan határozott integrálok, melyek integrandusai nullák, ami a határozott integrálokat mint ismeretes nullává teszi. A szóbanforgó integrandusok azért tűnnek el, mert bennük szorzótényezőként $\left(\varphi_k, 0_{\Pi} \varphi_{\Pi} \right) = 0$, $\left(\varphi_{\Pi}, 0_l \varphi_l \right) = 0$ alakú és ilyen összefüggéseket kielégítő integrálok szerepelnek. Ezen integrálok azért zérusok, mert φ_k és φ_{Π} ill. φ_l és φ_{Π} egymásra ortogonálisak, hiszen $\hat{H}$ különböző sajátértékeihez kell tartozniuk. Látható, hogy a végeredményül kapott

$$\sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 0_k + \int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} \int_{\Pi_{\alpha}}^{\Pi_{\beta}} c_{\Pi}^* c_{\Pi'} e^{\frac{2\pi i}{h} (\Pi - \Pi') t} 0_{\Pi} \delta(\Pi - \Pi') d\Pi d\Pi'$$

kifejezés az időtől független. Ez az első tag esetében annak a következménye, hogy a c_k kifejtési együtthatók az időtől függetlenek. A második tag integrandusa expliciten függ az időtől, ezért ezen tag időtől való függetlenségét részletesebben kell megvizsgálnunk. Ezen tag alakja a következő:

$$\int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} c_H^* c_{H'} e^{\frac{2\pi i}{h} (H-H')t} \delta(H-H') dH dH' =$$

$$= \int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} \left[\int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} c_H^* c_{H'} e^{\frac{2\pi i}{h} (H-H')t} \delta(H-H') dH \right] dH'$$

Tekintsük most a szögletes zárójelen belüli integrált. Az integrációs tartomány azon részén, ahol $H \neq H'$, az integrál járuléka zérus a Dirac-féle deltafüggvény azon sajátossága miatt, hogy $\delta(H-H')=0$, ha $H \neq H'$. Az integrál zérustól különböző járulékot csak a $H = H'$ pontban ad, ahol $\delta(H-H')=\infty$. Ebben a pontban $\delta(H-H')$ olyan erősen válik végtelenné, hogy a végtelen kicsi pozitív dH -val való szorzata véges lesz. Mivel az integrációs tartomány $H = H'$ pontjában $\exp\left[\frac{2\pi i}{h}(H-H')t\right]=1$, és minden pontjában véges c_H és $c_{H'}$, az integrál is véges lesz a Dirac-féle δ -függvény előbb említett tulajdonságait is figyelembe véve. Ugyanakkor a tekintett integrál az időtől független is, mert ahol $\exp\left[\frac{2\pi i}{h}(H-H')t\right]$ explicite függ az időtől, azaz a $H \neq H'$ integrációs tartománybeli pontokban az integrandus azonosan nulla, ahol pedig az integrandus nem nulla, azaz a $H = H'$ integrációs tartománybeli pontban, ott $\exp\left[\frac{2\pi i}{h}(H-H')t\right]$ egyenlő eggyel minden t -re, azaz végeredményben integrandusunk említett független lesz az időtől. Így az adódott, hogy az

$$\int_{H_{\alpha}}^{H_{\beta}} c_{H H'}^* c_{H H'} e^{\frac{2\pi i}{h} (H-H')t} \delta(H-H') dH$$

kifejezés véges, és független az időtől. Az időtől expliciten független $\hat{O}$ operátorral reprezentált fizikai mennyiség átlagára kapott végeredményünk második tagja ezen integrál H' szerinti integrálja a $[H_{\alpha}, H_{\beta}]$ intervallumon. Emiatt ezen tag is véges, és az időtől független lesz. Mivel a szóbanforgó átlagértékre kapott végeredmény mindkét tagja időtől függetlennek bizonyult, maga az átlagérték is független lesz az időtől.

Összegezve azt kaptuk tehát, hogy ha egy rendszer Hamilton-operátora expliciten független az időtől, sajátérték-spektruma vegyes típusu és sajátértékei nem elfajultak, továbbá $\hat{O}\hat{H} = \hat{H}\hat{O}$, akkor egy az időtől expliciten független nem elfajult spektrumú lineáris, hermitikus operátorral reprezentált fizikai mennyiség várható értéke állandó lesz. A bizonyításban alapvetően támaszkodtunk az $\hat{O}\hat{H} = \hat{H}\hat{O}$ egyenlőségből fakadó azon tényre, hogy $\hat{O}$ és $\hat{H}$ sajátfüggvényei közösek. Ebből látszik, hogy $\psi_k = \varphi_k \cdot e^{-\frac{2\pi i}{h} H_k t}$ esetében $\hat{O}\hat{H} = \hat{H}\hat{O}$ szükséges $\forall$ időbeli állandósághoz, ellentétben azzal a már szintén részletesen tárgyalt esettel, amikor $\psi_k = \varphi_k \cdot e^{-\frac{2\pi i}{h} H_k t}$ állt fenn: ekkor $\hat{O}\hat{H} = \hat{H}\hat{O}$ csupán elégséges, de nem szükséges $\forall$ időbeli állandósághoz.

Ha $\hat{O}$ és $\hat{H}$ sajátérték-spektruma elfajultak, a fentiekben közölt bizonyítás lényegében nem változik, mer $\hat{O}$ -nak és $\hat{H}$ -nak létezik közös teljes sajátfüggvényrendszer, melyet ha szükséges a Schmidt-féle ortogonalizációs eljárással

ortogonálissá is tehetünk. (Természetesen itt is feltettük, hogy $\hat{O}\hat{H} = \hat{H}\hat{O}$.) Az állapotfüggvényt ebben az esetben ezen teljes ortogonális rendszer szerint kifejtve, majd képezve az $\bar{O} = (\psi, \hat{O}\psi)$ kvantummechanikai várható értéket, az előző bizonyítás lépéseinek megismétlésével azt kapjuk, hogy $\bar{O}$ most is időben állandó lesz. Ezt az eredményünket továbbfejlesztve egy fontos tételt vezethetünk le. Tegyük fel, hogy az időtől független Hamilton-operátoru rendszerállapotfüggvényét az elfajult spektrumu Hamilton-operátor és nem a fentiekben említett közös teljes ortogonális rendszer szerint fejtjük ki. $\bar{O}$ -ra ekkor is azt kell kapjuk, hogy időben állandó, hiszen $\bar{O}$ viselkedése nem függhet attól, hogy a rendszer állapotfüggvényét milyen teljes függvényrendszer szerint fejtjük ki. Mind a nem elfajult spektrumu, mind pedig az elfajult spektrumu esetben végzett bizonyítások elvégzésekor látszik, hogy $\bar{O}$ időbeli állandóságához feltétlenül szükséges az $\hat{O}\varphi_k = O_k \varphi_k$ és $\hat{O}\varphi_H = O_H \varphi_H$, ahol $\hat{H}\varphi_k = H_k \varphi_k$, $\hat{H}\varphi_H = H_H \varphi_H$ egyenlőségek fennállása, melyek mindkét esetben automatikusan teljesültek. Ha az állapotfüggvényt csak $\hat{H}$, vagy csak $\hat{O}$ sajátfüggvényei szerint fejtjük ki, akkor akármelyik operátor sajátérték-spektrumának elfajultsága esetén a fentiekben szükségesnek talált egyenlőségek nem teljesülnek automatikusan, ugyanakkor nem zárható ki az sem, hogy teljesülnek. Mivel $\hat{O}$ időbeli állandósága nem múlhat a kifejtéshez felhasznált teljes függvényrendszeren, és az említett egyenlőségek szükségesek $\bar{O}$ időbeli állandóságához, ezen egyenlőségeknek teljesülniük kell, amiből pedig az következik, hogy $\hat{O}$ és $\hat{H}$ sajátfüggvényei még abban az esetben is közösek, ha akármelyikük, vagy mindkettőjük spektruma elfajult.

IRODALOM:

- [1] Marx György: Kvantummechanika, Bűnzaki Könyvkiadó, Budapest, 1971.
- [2] Franczia Tamás: A kvantummechanikai impulzus eltolási szimmetriával történő bevezetéséről I. Acta Academiae Paedagogicae Agriensis XVII. Eger, 1984.
- [3] Franczia Tamás: A kvantummechanikai impulzus eltolási szimmetriával történő bevezetéséről II. Acta Academiae Paedagogicae Agriensis XVIII. Eger, 1987.

