

A kvantummechanika posztulátumai

October 29, 2006

1 A kvantummechanika posztulátumai

Célunk felépíteni a kvantummechanikát posztulátumok segítségével úgy ahogy az elemi hullámmechanika során eljártunk. Arra törekszünk, hogy ez minnél kevesebb posztulátummal ellentmondásmentesen sikerüljön.

1.1 I. Posztulátum

A kvantumfizikai rendszerünk állapotát egy végtelen dimenziós lineáris vektortér (Hilbert tér) -beli 'ket' vektor írja le ($|\psi\rangle$).

Megjegyzések:

1. A klasszikus mechanikával ellentétben a kvantummechanikában nem jellemezhetünk egy állapotot a térkoordináták és az impulzusvektorok egygyűttesével.
2. Egy állapotot csak a vektor "iránya" és nem a "nagysága" jellemez. Például, ha $\lambda \in \mathbb{C}$ akkor a $|\psi\rangle$ és a $\lambda|\psi\rangle$ állapotok ugyanazok.
3. Ha $|a\rangle$ és $|b\rangle$ a kvantummechanikai rendszer két megengedett állapota, akkor az $|a\rangle + |b\rangle$ is egy megengedett állapot (szuperpozíció elve).
4. Az állapotok vektortere egy absztrakt tér ! (Nem a valóságos konfigurációs tér és nem az impulzusok tere.)
5. A kvantummechanikai rendszer állapotának a megváltozása a rendszert leíró 'ket' vektor irányának a megváltozásával történik. Newtoni mozgásegyenlet $\longrightarrow$ a 'ket' vektor változására vonatkozó egyenlet.
6. Normált állapotról beszélünk, hogyha $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

1.2 II. Posztulátum

Minden fizikai mennyiséghez megfigyelhető operátorokat rendelünk. Ezen operátorok a 'ket' vektorokra hatnak, megváltoztatva őket.

1. Az operátorok lineárisak kell legyenek (a szuperpozíció elvéből következőleg), hermitikusak (hogyan valós legyen a sajátértékük) és sajátvektoraik egy bázist alkotnak a Hilbert téren (a megfigyelhetőség feltétele, erre szükségünk lesz a IV. Posztulátumnál).
2. A hozzárendelés módját a III. Posztulátum adja meg.

Két fontos operátor amit gyakran használunk: (1) a koordinátákat jellemző és (2) az impulzuskomponenseket jellemző operátorok. Ezek sajátvektoraik egy-egy speciális reprezentációt határoznak meg a Hilbert téren.

1.2.1 A Koordináta-operátorok és a koordináta-reprezentáció

A koordináta-reprezentációban a bázisvektorok a koordináta-operátorok sajátvektoraik.

- Tekintsük először az 1D esetet: $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$, a spektrum folytonos a $-\infty \leq x \leq \infty$ intervallumon.

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x) \quad (1)$$

$$\hat{P}_x = \int |x\rangle dx \langle x| = \hat{I} \quad (2)$$

a reprezentációnk alapegyenletei. Felírható, hogy:

$$\langle x|\hat{X}|x'\rangle = x'\langle x|x'\rangle = x'\delta(x - x').$$

Legyen $|\psi\rangle$ egy állapot (vektor) $\longrightarrow \psi$ koordinátái a koordináta-reprezentációban: $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$, ami meghatározza az adott állapot koordinátatérbeli hullámfüggvényét.

- Tekintsük most a 3D esetet: $x \longrightarrow \hat{X}; y \longrightarrow \hat{Y}; z \longrightarrow \hat{Z}$;
 $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle; \hat{Y}|y\rangle = y|y\rangle; \hat{Z}|z\rangle = z|z\rangle$; ahol az x, y, z sajátértékek folytonosan változnak a $(-\infty, \infty)$ intervallumon. A sajátvektorok által generált terek ϵ_x, ϵ_y és ϵ_z :
 $|x\rangle \in \epsilon_x; |y\rangle \in \epsilon_y; |z\rangle \in \epsilon_z$;
 Tekintsük az $\epsilon = \epsilon_x \otimes \epsilon_y \otimes \epsilon_z$ teret, amelynek elemei az $|x\rangle|y\rangle|z\rangle = |xyz\rangle = |\vec{r}\rangle$ vektorok. Az $\{|\vec{r}\rangle\}$ vektorok összessége egy bázist alkot az ϵ -on. A reprezentáció alapegyenletei:

$$\langle \vec{r}'|\vec{r}\rangle = \delta(\vec{r}' - \vec{r}) = \delta(x' - x)\delta(y' - y)\delta(z' - z) \quad (3)$$

$$\hat{P}_r = \int |\vec{r}\rangle d\vec{r} \langle \vec{r}| = \hat{I} \quad (4)$$

ahol $d\vec{r} = dxdydz$.

Azonnal belátható, hogy: $\langle \vec{r}|\hat{X}|\vec{r}'\rangle = \langle x|\hat{X}|x'\rangle \langle y|y'\rangle \langle z|z'\rangle = x'\delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z')$. Ha $|\psi\rangle$ egy állapotvektor, ennek koordinátái: $\langle \vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z)$, ami nem más mint az adott állapot koordinátatérbeli hullámfüggvénye.

1.2.2 Az impulzus-operátor és az impulzus reprezentáció

Az impulzus-reprezentációban a bázisvektorok az impulzus operátor sajátvektorai.

- A impulzus komponenseihez rendelt operátorok: $p_x \longrightarrow \hat{p}_x$; $p_y \longrightarrow \hat{p}_y$;
 $p_z \longrightarrow \hat{p}_z$;

Ezen operátorok sajátértékegyenlete:

$$\hat{p}_x |p_x\rangle = p_x |p_x\rangle; \bigcup |p_x\rangle \longrightarrow \epsilon_{p_x};$$

$$\hat{p}_y |p_y\rangle = p_y |p_y\rangle; \bigcup |p_y\rangle \longrightarrow \epsilon_{p_y};$$

$$\hat{p}_z |p_z\rangle = p_z |p_z\rangle; \bigcup |p_z\rangle \longrightarrow \epsilon_{p_z};$$

Az állapotvektorok teljes tere $\epsilon = \epsilon_{p_x} \otimes \epsilon_{p_y} \otimes \epsilon_{p_z}$ és ezen egy bázist képeznek a $|p_x\rangle |p_y\rangle |p_z\rangle = |p_x p_y p_z\rangle = |\vec{p}\rangle$ vektorok. $(\bigcup |\vec{p}\rangle)$ tehát egy bázist ad az ϵ -on). A bázisunk (reprezentációnk) alapegyenletei:

$$\langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = \delta(\vec{p}' - \vec{p}) = \delta(p'_x - p_x) \delta(p'_y - p_y) \delta(p'_z - p_z) \quad (5)$$

$$\hat{P}_p = \int |\vec{p}\rangle d\vec{p} \langle \vec{p}| = \hat{I} \quad (6)$$

ahol $d\vec{p} = dp_x dp_y dp_z$. Egy adott $|\psi\rangle$ állapot koordinátái ebben a reprezentációban: $\langle \vec{p} | \psi \rangle = \phi(\vec{p}) = \phi(p_x, p_y, p_z)$, ami megadja az adott állapotot leíró impulzustérbeli hullámfüggvényt.

Egy tetszőleges $|\psi\rangle$ állapotban a $\phi(\vec{p})$ és $\psi(\vec{r})$ hullámfüggvények közötti kapcsolatot a következőképpen adhatjuk meg:

$$\phi(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle = \langle \vec{p} | \hat{P}_r | \psi \rangle = \quad (7)$$

$$= \int \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle d\vec{r} = \int \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle^* \langle \vec{r} | \psi \rangle d\vec{r} \quad (8)$$

Ahol $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$ az impulzusvektor sajátvektorainak a koordináta-reprezentációbeli hullámfüggvényét jelöli:

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \quad (9)$$

Ezek alapján:

$$\phi(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (10)$$

1.2.3 III. Posztulátum:

- Az x és a p_x mennyiségekhez olyan operátorokat rendelünk, melyeknek mátrixelemei a koordinátareprezentációban:

$$\langle x | \hat{X} | x' \rangle = x \delta(x - x') \quad (11)$$

$$\langle x | \hat{p}_x | x' \rangle = -i\hbar \delta'(x - x') \quad (12)$$

ahol:

$$\delta'(x - x') = \frac{d}{dx}[\delta(x - x')] \quad (13)$$

- A többi fizikai mennyiséghez is operátorokat rendelünk, úgy, hogy ha $w = w(\vec{r}, \vec{p})$, akkor $\hat{w} = w(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})$.

Néhány megjegyzést teszünk, amelyek a következőkben fontosak lesznek:

1. Ezt az operátor-hozzárendelési eljárást a kanonikus kvantálásnak nevezzük.
2. Felírhatjuk, hogy:

$$\langle x | \hat{p}_x | x' \rangle = -i\hbar \delta'(x - x') = -i\hbar \frac{d}{dx} \delta(x - x') \quad (14)$$

$$\langle x' | \hat{p}_x | x \rangle = -i\hbar \delta'(x' - x) = -i\hbar \frac{d}{dx'} \delta(x' - x) \quad (15)$$

$$(16)$$

Mivel $\langle x | \hat{p}_x | x' \rangle = \langle x' | \hat{p}_x | x \rangle^*$, következik, hogy:

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \delta(x - x') = [-i\hbar \frac{d}{dx'} \delta(x' - x)]^* = i\hbar \frac{d}{dx'} \delta(x' - x) \quad (17)$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dx} [\delta(x - x')] = -\frac{d}{dx'} [\delta(x' - x)] = -\frac{d}{dx'} \delta(x - x') \quad (18)$$

Mert $\delta(x - x') = \delta(x' - x)$. Tehát:

$$\frac{d}{dx} [\delta(x - x')] = -\frac{d}{dx'} [\delta(x - x')] \quad (19)$$

3. **Tétel:** Az $\hat{x}$ és $\hat{p}_x$ operátorokra koordináta reprezentációban igaz, hogy:

$$\langle x | \hat{X} | \psi \rangle = x \cdot \psi(x) = x \cdot \langle x | \psi \rangle \quad (20)$$

$$\langle x | \hat{p}_x | \psi \rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \langle x | \psi \rangle \quad (21)$$

Hasonlóan felírhatjuk $\hat{\vec{r}}$ és $\hat{\vec{p}}$ -re:

$$\langle \vec{r} | \hat{\vec{r}} | \psi \rangle = \vec{r} \cdot \psi(\vec{r}) = \vec{r} \cdot \langle \vec{r} | \psi \rangle \quad (22)$$

$$\langle \vec{r} | \hat{\vec{p}} | \psi \rangle = -i\hbar \frac{d}{d\vec{r}} \psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{d}{d\vec{r}} \langle \vec{r} | \psi \rangle \quad (23)$$

Következmény: $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$; $[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar$; $[\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$

Ezen következmény bizonyítása ugyanúgy történik, mint a hullámmechanika keretében.

A tétel bizonyítása:

$$\langle x|\hat{x}|\psi\rangle = \langle x|\hat{x}\hat{I}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|\hat{x}|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx' = \quad (24)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x\delta(x-x')\psi(x')dx' = x\psi(x) = x\langle x|\psi\rangle$$

$$\langle x|\hat{p}_x|\psi\rangle = \langle x|\hat{p}_x\hat{I}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|\hat{p}_x|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx' = \quad (25)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} -i\hbar\delta'(x-x')\psi(x')dx' = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\delta(x-x')}{dx} \psi(x')dx' =$$

$$= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\delta(x-x')}{dx'} \psi(x')dx' = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x') \frac{d\psi(x')}{dx'} dx' =$$

$$= -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \langle x|\psi\rangle$$

Itt felhasználtuk a 2. pontban bizonyított állítást, valamint azt a tényt, hogy a hullámfüggvény a végtelenben nullához kell tartson vagy legalább korlátos kell legyen.

4. A $w(\vec{r}, \vec{p}) \longrightarrow w(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})$ hozzárendelés nem mindig egyértelmű.

Például legyen $w = xp_x$ egy fizikai mennyiség. A klasszikus mechanikában $xp_x = p_x x$, de a kvantummechanikában $\hat{x}\hat{p}_x \neq \hat{p}_x\hat{x}$. A kvantummechanikában választott megoldás az, hogy $w = xp_x$ -hez egy szimmetrikus formát rendelünk:

$$w = \frac{xp_x}{2} + \frac{p_x x}{2} \longrightarrow \hat{w} = \frac{\hat{x}\hat{p}_x}{2} + \frac{\hat{p}_x\hat{x}}{2} \quad (26)$$

5. Meglátjuk, hogy a kvantummechanikában sok olyan mennyiség van, amelyeknek nincs klasszikus megfelelője. Egy azonnali példa erre a spin. Felvetődik akkor a kérdés, hogy milyen operátorokat rendelünk ezekhez a mennyiségekhez? Meglátjuk, hogy ilyen esetekre nincs egy jól bevált recept, és ilyenkor szükség van intuícóra és kvázi-klasszikus megfontolásokra.

1.2.4 IV. Posztulátum (mérési posztulátum)

Tekintsünk egy kvantummechanikai részecskét amely a $|\Psi\rangle$ állapotban van. Legyen Ω egy mérhető fizikai mennyiség amelyhez a kvantummechanikában rendelt operátor $\hat{\Omega}$. Ennek az operátornak a sajátérték-egyenlete:

$$\hat{\Omega}|\omega\rangle = \omega|\omega\rangle \quad (27)$$

A mérési posztulátum alapján, az Ω fizikai mennyiség mérése során az $\hat{\Omega}$ operátor egy sajátértékét kapjuk. Két esetet tárgyalunk:

1. Ha $|\Psi\rangle$ normált és a mért ω sajátérték nem elfajult, akkor annak a valószínűsége, hogy az ω sajátértéket mérjük:

$$P(\omega) = |\langle \omega | \Psi \rangle|^2. \quad (28)$$

A mérés után a rendszer állapota az $|\omega\rangle$ tiszta állapotra változik: $|\Psi\rangle \rightarrow |\omega\rangle$.

Ha $|\Psi\rangle$ nem normált állapot, akkor:

$$P(\omega) = \frac{|\langle \omega | \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (29)$$

2. Ha a mért ω sajátérték elfajult, akkor annak a valószínűsége, hogy az ω sajátértéket mérjük

$$P(\omega) = \frac{\sum_i |\langle \omega_i | \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (30)$$

ahol $|\omega_i\rangle$ az ω sajátértékhez tartozó sajátvektorokat jelöli. Ilyen esetben a mérés után a kvantummechanikai rendszer a

$$|\chi\rangle = \sum_i \lambda_i |\omega_i\rangle, \quad (31)$$

($\lambda_i \in \mathbf{C}$) kevert állapotba kerül, ahol λ_i értékei ismeretlenek.

Néhány fontos megjegyzés a mérési posztulátummal kapcsolatosan:

1. A kvantummechanika mérési posztulátumának értelmében a mérési eredmény egy véletlenszerű (valószínűségi) változó.
2. Ha a kvantummechanikai rendszer $|\Psi\rangle$ állapota sajátállapota az $\hat{\Omega}$ operátornak, $\hat{\Omega}|\Psi\rangle = \omega_\Psi|\Psi\rangle$, akkor a $|\Psi\rangle$ állapotban az Ω fizikai mennyiség mérésének az eredménye garantáltan ω_Ψ lesz.
3. Az Ω fizikai mennyiség mérési eredményeink átlagértéke (várható értéke) egy $|\Psi\rangle$ kvantummechanikai állapotban (minden mérés után visszaállítva a kezdeti $|\Psi\rangle$ állapotot):

$$\langle \Omega \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (32)$$

Ezen kijelentésnek a bizonyítása azonnali:

$$\langle \Omega \rangle = \sum_i P(\omega_i) \omega_i = \frac{\sum_i |\langle \omega_i | \Psi \rangle|^2 \omega_i}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\sum_i \langle \Psi | \omega_i \rangle \langle \omega_i | \Psi \rangle \omega_i}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \quad (33)$$

$$= \frac{\langle \Psi | (\sum_i |\omega_i\rangle \omega_i \langle \omega_i|) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (34)$$

4. Két A és B fizikai mennyiséget **kompatibilisnek** nevezünk ha ezekre mért értékek nem változnak sokszori és tetszőleges sorrendbe történő egymásutáni mérésekre. A mérési posztulátum értelmében azonnal következik, hogy az A és B fizikai mennyiség akkor kompatibilis, ha a hozzájuk rendelt $\hat{A}$ és $\hat{B}$ operátoroknak létezik egy közös és teljes sajátvektor rendszere. A hullámmechanika keretében igazoltuk, hogy ennek a szükséges és elégséges feltétele az, hogy a két operátor kommutáljon, vagyis, hogy: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$. A bizonyítás ugyanúgy történik ahogy a hullámmechanika esetén végeztük. Javasoljuk, hogy gyakorlatként az érdekelt olvasó végezze el az általános formalizmus keretében is.
5. Több $A_1, A_2, \dots, A_n$ fizikai mennyiség kompatibilis, ha páronként kompatibilisek.
6. Azt mondjuk, hogy két A és B fizikai mennyiség **komplementáris** ha nem kompatibilis, vagyis ha $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$. Ilyen esetben egy tetszőleges kvantummechanikai állapotban a két fizikai mennyiség általában nem mérhető egymás után egzaktul.
7. Két A és B fizikai mennyiség **inkompatibilis**, ha $[\hat{A}, \hat{B}] = \lambda \in \mathbf{C}$. Ilyen esetben egy tetszőleges kvantummechanikai állapotban a két fizikai mennyiség sohasem mérhető egymás után egzaktul. Azonnal következik, hogy ha két fizikai mennyiség inkompatibilis, akkor komplementáris is!
8. Ha két A és B komplementáris fizikai mennyiségre igaz, hogy:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}. \quad (35)$$

akkor egy tetszőleges $|\Psi\rangle$ kvantummechanikai állapotban:

$$\Delta A_\Psi \Delta B_\Psi \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle_\Psi| \quad (36)$$

(A fenti egyenletben $\Delta A_\Psi = \langle A^2 \rangle_\Psi - \langle A \rangle_\Psi^2$, és hasonló jelölés érvényes a B -re is.). A fenti egyenlet a határozatlansági összefüggés általános alakja. Ennek a speciális esete az x és p_x inkompatibilis fizikai mennyiségekre ($[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$) a jólismert Heisenberg-féle határozatlansági reláció:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \hbar. \quad (37)$$

(Hasonló összefüggés érvényes az y és z tengely irányú komponensekre is.) Egy kvantummechanikai rendszer esetén ismert még a

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (38)$$

határozatlansági összefüggés is. Egy ellentmondásmentes értelmezése a fenti határozatlansági összefüggésnek a következő (Mandelstam-Tamm féle

értelmezés). Legyen egy mérhető A fizikai mennyiség, amelyre kiszámítható ΔA és $\langle A \rangle$ az adott kvantummechanikai állapotban. Bevezethető a következő idő-intervallum jellegű mennyiség:

$$\tau = \frac{\Delta A}{\frac{d\langle A \rangle}{dt}}, \quad (39)$$

aminek szemléletes és azonnali jelentése az időmérés bizonytalansága, ha az időt az A mennyiségen keresztül mérjük. A τ mennyiségre, illetve a rendszer E energiájára az adott kvantummechanikai állapotban szintén érvényes a (36) egyenlet, tehát:

$$\Delta E \Delta \tau \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (40)$$

Az általános határozatlansági relációt bizonyítottuk az elemi hullámmechanika tanulmányozása során. A bizonyítás teljesen hasonló formában történik az általános formalizmus keretében is. Gyakorlatként javasoljuk ennek a bizonyításnak a megismétlését.

9. Ha az $A_1, A_2, \dots, A_n$ kompatibilis mennyiségek mérésével a rendszer mindig egy jól meghatározott, ugynevezett "tisztá" állapotba kerül, és ez a kijelentés nem igaz a fenti halmaz egy részhalmazára sem, akkor azt mondjuk, hogy az $A_1, A_2, \dots, A_n$ mennyiségek egy **teljes megfigyelhető mennyiség rendszert** alkotnak.

1.2.5 V. Posztulátum: az evolúció posztulátuma

A kvantummechanikai rendszer evolúciójának a meghatározása azt jelenti, hogy ismerve a kvantummechanikai rendszer állapotát egy t_0 időpillanatban meghatározzuk a rendszer állapotát egy későbbi időpillanatban.

Az V. posztulátum értelmében, ha a kvantummechanikai rendszer állapota t_0 időpillanatban $\psi(t_0)$, egy későbbi időpillanatban a rendszer megkapható egy $\hat{U}(t, t_0)$ unitér transzformáció ($\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$) segítségével:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (41)$$

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I} \quad (42)$$

Az $\hat{U}$ operátort **evolúciós operátornak** nevezzük.

Ezen posztulátumnak néhány azonnali fontos következménye van:

1. Ha $\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1$ akkor $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$, vagyis az evolúciós operátor megőrzi a hullámfüggvény normáját.

Bizonyítás:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (43)$$

$$\langle \psi(t) | = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \quad (44)$$

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle &= \langle\psi(t_0)|\hat{U}^\dagger\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = \\ &= \langle\psi(t_0)|\hat{I}|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle\end{aligned}$$

2. Ha van 3 időpillanat, úgy, hogy $t_0 < t_1 < t$ akkor:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) \quad (45)$$

Bizonyítás:

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_1)|\psi(t_1)\rangle \\ |\psi(t_1)\rangle &= \hat{U}(t_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ \Rightarrow |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ \Rightarrow \hat{U}(t, t_0) &= \hat{U}(t, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)\end{aligned} \quad (46)$$

3. Az elemi evolúciós operátor:

$$\hat{U}(t, t - dt) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} dt \hat{H} \quad (47)$$

Ahol $\hat{H}$ egy hermitikus operátor, amelyről egyelőre csak az a fontos hogy energia dimenziója van. (Az energia dimenzió onnan következik, hogy a nevezőben $\hbar$ található, aminek energia×idő dimenziója van).

4. $\hat{U}(t, t_0)$ meghatározható egy differenciálegyenletből. Ez azonnal belátható végigkövetve az alábbi egyenleteket:

$$\begin{aligned}\hat{U}(t, t_0) &= \hat{U}(t, t - dt)\hat{U}(t - dt, t_0) \\ \hat{U}(t, t_0) &= (\hat{I} - \frac{i}{\hbar} dt \hat{H})\hat{U}(t - dt, t_0) \\ \hat{U}(t, t_0) - \hat{U}(t - dt, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} dt \hat{H} \hat{U}(t - dt, t_0) \\ i\hbar \frac{\hat{U}(t, t_0) - \hat{U}(t - dt, t_0)}{dt} &= \hat{H} \hat{U}(t - dt, t_0)\end{aligned} \quad (48)$$

Tehát a $dt \rightarrow 0$ határesetben:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \quad (49)$$

5. $|\psi(t)\rangle$ evolúciós egyenlete is felírható mint egy időben elsőfokú differenciálegyenlet:

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \hat{H} \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \hat{H} |\psi(t)\rangle\end{aligned} \quad (50)$$

6. $\hat{H}$: a rendszer Hamilton operátora (a Hamilton függvényhez rendelt operátor). Ezt a koreszpondencia-elv alapján igazoljuk.

Bizonyítás: Legyen a rendszerünket leíró Hamilton függvény időtől független, és legyen Q egy fizikai mennyiség, $\hat{Q}$ meg a hozzá rendelt operátor (amiről tételezzük újból fel, hogy időtől független). Számítsk ki a $\langle Q \rangle$ -t egy adott $|\psi(t)\rangle$ állapotban.

$$\begin{aligned}\langle Q \rangle &= \langle \psi(t) | \hat{Q} | \psi(t) \rangle \\ \frac{d\langle Q \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} (\langle \psi(t) | \hat{Q} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{Q} \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle)\end{aligned}\quad (51)$$

de:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | &= \langle \psi(t) | \frac{i}{\hbar} \hat{H}\end{aligned}\quad (52)$$

mivel $\hat{H}$ hermitikus. Vagyis:

$$\begin{aligned}\frac{d\langle Q \rangle}{dt} &= \langle \psi(t) | \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{Q} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | -\hat{Q} \frac{i}{\hbar} \hat{H} | \psi(t) \rangle \\ \frac{d\langle Q \rangle}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{H}, \hat{Q}] | \psi(t) \rangle\end{aligned}\quad (53)$$

A végeredmény:

$$\frac{d\langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [\hat{H}, \hat{Q}] | \psi \rangle \quad (54)$$

Ezen egyenlet a klasszikus mechanika

$$\frac{dQ}{dt} = \{H, Q\} \quad (55)$$

Poisson zárójelekkel felírt egyenletének a megfelelője, ahol H a rendszer Hamilton függvénye. A koreszpondencia elv értelmében tehát $\hat{H}$ a kvantummechanikai rendszer Hamilton operátora.

7. Ha a rendszer konzervatív ($\hat{H}$ időtől független), akkor:

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}\right] \quad (56)$$

A bizonyítás során a függvényekre ismert integrálási eljárásokat formálisan kiterjesztjük az operátorokra is (erről egy kicsit bővebben beszélünk a következő pontban):

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \quad (57)$$

$$\begin{aligned}\int_{t_0}^t \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{\hat{U}(t, t_0)} &= - \int_{t_0}^t \frac{i}{\hbar} \hat{H} dt \Rightarrow \\ \ln \hat{U}(t, t_0) &= - \frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t_0) \\ \hat{U}(t, t_0) &= \exp[-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \hat{H}]\end{aligned}$$

8. Ha a kvantummechanikai rendszer konzervatív és $|\psi(t_0)\rangle$ a $\hat{H}$ -nak a sajátvektora, akkor

$$|\psi(t)\rangle = \exp[-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0)] |\psi(t_0)\rangle, \quad (58)$$

ahol E a rendszer energiája.

Bizonyítás:

$$\begin{aligned}\hat{U}(t, t_0) &= \exp[-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \hat{H}] \quad (59) \\ |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = \exp[-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \hat{H}] |\psi(t_0)\rangle = \\ &= [\hat{I} - \frac{i}{\hbar} (t - t_0) \hat{H} + \frac{1}{2} (-\frac{i}{\hbar})^2 (t - t_0)^2 \hat{H}^2 + \dots] |\psi(t_0)\rangle = \\ &= [|\psi(t_0)\rangle - \frac{i}{\hbar} (t - t_0) \hat{H} |\psi(t_0)\rangle + \frac{1}{2} (-\frac{i}{\hbar})^2 (t - t_0)^2 \hat{H}^2 |\psi(t_0)\rangle + \dots] = \\ &= |\psi(t_0)\rangle - \frac{i}{\hbar} (t - t_0) E |\psi(t_0)\rangle + \frac{1}{2} (-\frac{i}{\hbar})^2 (t - t_0)^2 E^2 |\psi(t_0)\rangle + \dots = \\ &= \exp[-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0)] |\psi(t_0)\rangle \quad (60)\end{aligned}$$

Itt találkozunk egy olyan esettel ahol egy olyan operátorunk van, amely $f(\hat{A})$ alakú (f egy adott függvény). Értelmezzük most egy kissé rigurozusabban az ilyen típusú operátorokat. Egy azonnali lehetőség erre, hogy felhasználjuk az $f(x)$ függvény Taylor sorát:

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_i x^i + \dots \quad (61)$$

Értelmezés szerint:

$$f(\hat{A}) = a_0 + a_1 \hat{A} + a_2 \hat{A}^2 + \dots + a_i \hat{A}^i + \dots \quad (62)$$

Egy másik, a fentivel ekvivalens értelmezés az $\hat{A}$ operátor sajátvektoraival adható. Legyen:

$$\hat{A} |\Psi_\alpha\rangle = \alpha |\Psi_\alpha\rangle. \quad (63)$$

Ilyen esetben:

$$f(\hat{A}) |\Psi_\alpha\rangle = f(\alpha) |\Psi_\alpha\rangle. \quad (64)$$

Mivel tetszőleges Ψ állapot sorbafejthető a $|\Psi_\alpha\rangle$ vektorok szerint, és $\hat{A}$ egy lineáris operátor, a fenti értelmezés ekvivalens a Taylor sor alapján adottal.