

Kapitel 3

Zeitentwicklung und Symmetrien

3.1 Zeitliche Entwicklung von Zuständen und Operatoren

Ohne zeitliche Entwicklung gibt es keine Prozesse in dieser Welt. In der Quantenmechanik kann man die Zeitentwicklung entweder in die Wellenfunktionen oder in die Operatoren stecken, oder in beide.

Zeitunabhängige Operatoren

Wir betrachten zunächst einzelne Teilchen in einem Potential $V(\vec{x})$, das nicht explizit von der Zeit abhängen soll. Die Schrödinger'sche Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ genügt der Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(\vec{x}, t) = \mathbf{H} \psi(\vec{x}, t), \quad \mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(\vec{x}).$$

Die Operatoren $\mathbf{Q}_j =$ Multiplikation mit x_j sowie $\mathbf{P}_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j}$ sind zeitunabhängig, die Zeitabhängigkeit steht in $\psi(\vec{x}, t)$.

Zeitabhängige Operatoren

Es gibt Operatoren welche explizit von der Zeit abhängen. Sei z.B. $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\vec{\mathbf{P}}, \vec{\mathbf{Q}}, t)$ ein Operator, der von $\vec{\mathbf{P}}, \vec{\mathbf{Q}}$ und explizit von der Zeit t abhängt, z.B. via

$$\mathbf{A} = \vec{\mathbf{Q}} - \frac{1}{m} \vec{\mathbf{P}} \cdot t.$$

Klassisch entspricht $p/m = v$ der Geschwindigkeit, der Operator \mathbf{A} entspricht also in diesem Beispiel mit $x - vt$ dem relativen Aufenthaltsort eines sich frei bewegenden Teilchens.

Erwartungswerte

Für den zeitabhängigen Erwartungswert $\langle \mathbf{A} \rangle_\psi(t) \equiv \langle \psi(t) | \mathbf{A} | \psi(t) \rangle$ führt die Schrödingergleichung zu

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \mathbf{A} \rangle_\psi(t) &= \langle \dot{\psi} | \mathbf{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \dot{\mathbf{A}} | \psi \rangle + \langle \psi | \mathbf{A} | \dot{\psi} \rangle \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \mathbf{H} \mathbf{A} | \psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \mathbf{A} \mathbf{H} | \psi \rangle + \langle \partial_t \mathbf{A} \rangle_\psi, \end{aligned}$$

da \mathbf{H} selbstadjungiert ist. Es gilt somit

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{A} \rangle_{\psi}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [\mathbf{H}, \mathbf{A}] | \psi \rangle + \langle \partial_t \mathbf{A} \rangle_{\psi},$$

mit der Abkürzung $\partial_t = \partial/\partial t$. Dieser Zusammenhang, die Bewegungsgleichung für Operatoren, gilt für alle Wellenfunktionen $|\psi\rangle$.

Beispiel

Sei $\mathbf{A} = \vec{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$, dann hat man $\partial_t \vec{\mathbf{P}} = 0$ und

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}, \vec{\mathbf{P}}] \psi(\vec{x}, t) &= [V(\vec{x}), \vec{\mathbf{P}}] \psi(\vec{x}, t) = V(\vec{x}) \vec{\mathbf{P}} \psi(\vec{x}, t) - \vec{\mathbf{P}} (V(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t)) \\ &= -\frac{\hbar}{i} (\text{grad} V(\vec{x})) \psi(\vec{x}, t). \end{aligned}$$

Man erhält mit

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{\mathbf{P}} \rangle_{\psi} = -\langle \text{grad} V \rangle_{\psi}$$

das Analogon zur Newton'schen Bewegungsgleichung $\frac{d}{dt} \vec{p} = -\text{grad} V$; Die Erwartungswerte der Operatoren erfüllen das Korrespondenzprinzip.

Zeitentwicklungsoperator

Sei $u_0(\vec{x})$ der Zustand des Teilchens zur Zeit $t = 0$ (Anfangswertproblem). Dabei muß $u_0(\vec{x})$ nicht notwendigerweise ein Eigenzustand von \mathbf{H} sein, welcher zeitunabhängig sein soll: $\partial_t \mathbf{H} = 0$.

Das Anfangswertproblem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \mathbf{H} \psi(\vec{x}, t), \quad \psi(\vec{x}, t=0) \equiv \Psi_0(\vec{x}) = u_0(\vec{x})$$

hat die (formale) Lösung

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-i\mathbf{H}t/\hbar} u_0(\vec{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-it}{\hbar} \right)^n \frac{\mathbf{H}^n}{n!} u_0(\vec{x})$$

Beweis:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \psi(\vec{x}, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} n \left(\frac{-it}{\hbar} \right)^{n-1} \frac{\mathbf{H}^n}{n!} u_0(\vec{x}) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{-it}{\hbar} \right)^m \frac{\mathbf{H}^{m+1}}{m!} u_0(\vec{x}) = \mathbf{H} \psi(\vec{x}, t), \end{aligned}$$

wobei wir die Substitution $m + 1 = n$ gemacht haben. Die Transformation

$$\psi(\vec{x}, 0) = u_0(\vec{x}) \quad \rightarrow \quad \psi(\vec{x}, t) = U(-t)u_0(\vec{x})$$

definiert mit

$$U(t) = e^{i\mathbf{H}t/\hbar}$$

den *Zeitentwicklungsoperator* $U(t)$.

Unitarität

Das Skalarprodukt

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \phi(t) \rangle &= \langle \psi(0) | U^\dagger(-t)U(-t) | \phi(0) \rangle = \langle \psi(0) | e^{i\mathbf{H}t/\hbar} e^{-i\mathbf{H}t/\hbar} | \phi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \phi(0) \rangle, \end{aligned}$$

bleibt unter der Zeitentwicklung erhalten und somit auch die Norm. $U(t)$ ist somit *unitär*:

$$U^\dagger(t)U(t) = U(t)U^\dagger(t) = 1.$$

Zeitentwicklung von Operatoren

Setzt man $\psi(\vec{x}, t) = U(-t)\psi_0(\vec{x})$ in den Erwartungswert $\langle \mathbf{A} \rangle_\psi$ ein, so erhält man

$$\langle \mathbf{A} \rangle_\psi(t) = \langle \psi(t) | \mathbf{A} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | e^{+i\mathbf{H}t/\hbar} \mathbf{A} e^{-i\mathbf{H}t/\hbar} | \psi(0) \rangle.$$

Dieser Ausdruck legt es nahe, zeitabhängige Operatoren

$$\tilde{\mathbf{A}}(t) = U(t) \mathbf{A} U^\dagger(t) \quad U(t) = e^{i\mathbf{H}t/\hbar},$$

zu definieren.

Bewegungsgleichung von Operatoren

Aus $i\hbar \frac{d}{dt}U(t) = -\mathbf{H}U(t)$ folgt mit

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\mathbf{A}}(t) = -\mathbf{H}\tilde{\mathbf{A}}(t) + \tilde{\mathbf{A}}(t)\mathbf{H} + i\hbar \underbrace{U(t)\partial_t \mathbf{A} U^\dagger(t)}_{\equiv \partial_t \tilde{\mathbf{A}}}$$

die Bewegungsgleichung für den Operator \mathbf{A} , wobei wir mit $\partial_t \tilde{\mathbf{A}}$ im folgenden die Ableitung nach der expliziten Zeitabhängigkeit des Operators \mathbf{A} bezeichnen. Diese Bewegungsgleichung ist analog zu der für die Erwartungswerte von Operatoren.

Schrödinger- und Heisenberg-Bild

Sei nun $\partial_t \mathbf{A} = 0$, so haben wir dann zwei Möglichkeiten der Beschreibung von zeitabhängigen Erwartungswerten:

Schrödinger-Bild

Die Operatoren sind zeitunabhängig und alle Zeitabhängigkeit steckt in den Zuständen $\psi(\vec{x}, t)$, deren zeitliche Entwicklung durch $i\hbar\partial_t\psi = \mathbf{H}\psi$ gegeben ist.

Heisenberg-Bild

Die Zustände $\psi_0(\vec{x})$ sind zeitunabhängig und die Operatoren $\tilde{\mathbf{A}}(t)$ hängen von der Zeit ab. Die Bewegungsgleichung für die Operatoren ist

$$i\hbar\frac{d}{dt}\tilde{\mathbf{A}}(t) = [\tilde{\mathbf{A}}(t), \mathbf{H}] .$$

Invarianz der Observablen

Beide "Bilder" führen zu den selben Messgrößen, denn die Erwartungswerte

$$\langle\psi(t)|\mathbf{A}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\tilde{\mathbf{A}}(t)|\psi(0)\rangle$$

bleiben bei einem Wechsel von der Schrödinger- zur Heisenberg-Darstellung nach Konstruktion invariant. Zur Zeit $t = 0$ stimmen Zustände und Operatoren im Heisenberg- und Schrödinger-Bild überein. Da der Hamilton-Operator \mathbf{H} mit $U(t) = e^{it\mathbf{H}/\hbar}$ vertauscht gilt allgemein $\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{H}$.

Harmonischer Oszillator

Als Beispiel betrachten wir den harmonischen Oszillator

$$\mathbf{H} = \hbar\omega\left(\mathbf{a}^+\mathbf{a} + \frac{1}{2}\right), \quad [\mathbf{a}, \mathbf{a}^+] = 1 ,$$

mit den Auf- und Absteigeoperatoren \mathbf{a}^+ und \mathbf{a} . Es gilt

$$[\mathbf{a}^+, \mathbf{H}] = \hbar\omega(\mathbf{a}^+\mathbf{a}^+\mathbf{a} - \mathbf{a}^+\mathbf{a}\mathbf{a}^+) = \hbar\omega\mathbf{a}^+[\mathbf{a}^+, \mathbf{a}] = -\hbar\omega\mathbf{a}^+ .$$

Wegen $U^+(t)U(t) = 1$ und $\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{H}$ erhält man hieraus

$$[U(t)\mathbf{a}^+U(-t), U(t)\mathbf{H}U(-t)] = [\tilde{\mathbf{a}}^+(t), \mathbf{H}] = -\hbar\omega\tilde{\mathbf{a}}^+ .$$

also

$$i\hbar\frac{d\tilde{\mathbf{a}}^+(t)}{dt} = [\tilde{\mathbf{a}}^+(t), \mathbf{H}] = -\hbar\omega\tilde{\mathbf{a}}^+(t) .$$

Da die Bewegungsgleichungen für $\tilde{\mathbf{a}}(t)$ und $\tilde{\mathbf{a}}^+(t)$ zueinander konjugiert-komplex sind erhalten wir somit

$$\frac{d\tilde{\mathbf{a}}^+(t)}{dt} = i\omega\tilde{\mathbf{a}}^+(t) , \quad \frac{d\tilde{\mathbf{a}}(t)}{dt} = -i\omega\tilde{\mathbf{a}}(t) .$$

Diese Operator–Differentialgleichungen haben die Lösungen:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{a}}(t) &= e^{-i\omega t} \tilde{\mathbf{a}}(0) & \tilde{\mathbf{a}}(0) &= \mathbf{a} \\ \tilde{\mathbf{a}}^+(t) &= e^{i\omega t} \tilde{\mathbf{a}}^+(0) & \tilde{\mathbf{a}}^+(0) &= \mathbf{a}^+ .\end{aligned}$$

Für den Ortsoperator $\tilde{\mathbf{Q}}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\beta}} \left(\tilde{\mathbf{a}}(t) + \tilde{\mathbf{a}}^+(t) \right)$ und dem Impulsoperator $\tilde{\mathbf{P}}(t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left(\tilde{\mathbf{a}}(t) - \tilde{\mathbf{a}}^+(t) \right)$, mit $\beta^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$ erhält man somit mit

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{Q}}(t) &= \mathbf{Q}(0) \cos(\omega t) + \frac{1}{m\omega} \mathbf{P}(0) \sin(\omega t) \\ \tilde{\mathbf{P}}(t) &= \mathbf{P}(0) \cos(\omega t) - m\omega \mathbf{Q}(0) \sin(\omega t)\end{aligned}$$

die klassische Lösung des harmonischen Oszillators, welche man auch mit Hilfe der kohärenten Zustände hergeleiten kann.

Konstanten der Bewegung

Aus der klassischen Mechanik wissen wir, dass jede (zeitunabhängige) Funktion auf dem Phasenraum $F(P, Q)$ genau dann eine Konstante der Bewegung (Erhaltungsgrösse) ist, wenn die Poisson-Klammer von F und der Hamilton-Funktion verschwindet. Quantenmechanisch gilt:

$$\frac{d}{dt} \tilde{\mathbf{A}}(t) = 0, \quad \text{falls} \quad [\mathbf{H}, \tilde{\mathbf{A}}(t)] = 0 \quad \text{und} \quad \partial_t \mathbf{A} = 0 .$$

Jeder Operator $\tilde{\mathbf{A}}(t)$, (bzw. \mathbf{A}), der mit \mathbf{H} vertauscht, ist eine Konstante der Bewegung, liefert also einen Erhaltungssatz.

Somit geht im Rahmen des *Korrespondenzprinzips* die Poisson-Klammer der klassischen Mechanik in den Kommutator der Quantenmechanik über.

Kanonische Gleichungen

Im Heisenberg–Bild genügen die Operatoren $\tilde{\mathbf{Q}}_j(t)$ und $\tilde{\mathbf{P}}_j(t)$ den “kanonischen” Operator–Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \tilde{\mathbf{Q}}_j(t) = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \tilde{\mathbf{P}}_j(t)}, \quad \frac{d}{dt} \tilde{\mathbf{P}}_j(t) = -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \tilde{\mathbf{Q}}_j(t)} .$$

Diese Gleichungen folgen direkt aus dem Korrespondenzprinzip, man kann sie natürlich auch direkt mit Hilfe der fundamentalen Vertauschungsrelationen

$$\frac{d}{dt} \tilde{\mathbf{A}}(t) = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \tilde{\mathbf{A}}(t)], \quad [\tilde{\mathbf{P}}_j(t), \tilde{\mathbf{Q}}_k(t)] = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk}$$

herleiten.

Welchselwirkungsbild

Es sei $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{W}$, wobei \mathbf{H}_0 das System ohne Wechselwirkung (Störung) \mathbf{W} beschreibt. Die Zustände im Schrödinger-Bild sind

$$\psi(\vec{x}, t) = U(-t)\psi_0(\vec{x}) .$$

Verfolgt man nun die zeitliche Entwicklung von $\psi(\vec{x}, t)$ relativ zu \mathbf{H}_0 rückwärts, so bekommt man

$$\hat{\psi}(\vec{x}, t) = e^{it\mathbf{H}_0/\hbar}\psi(\vec{x}, t) = e^{it\mathbf{H}_0/\hbar}U(-t)\psi_0(\vec{x}) .$$

Man nennt $\hat{\psi}(\vec{x}, t)$ die Wellenfunktion im Wechselwirkungsbild. Die Operatoren $\hat{\mathbf{A}}(t)$ im Wechselwirkungsbild definieren wir nun via

$$\hat{\mathbf{A}}(t) = e^{it\mathbf{H}_0/\hbar}\mathbf{A}e^{-it\mathbf{H}_0/\hbar} .$$

Die Erwartungswerte bleiben nach Konstruktion invariant:

$$\langle \hat{\psi}(t) | \hat{\mathbf{A}}(t) | \hat{\psi}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \mathbf{A} | \psi(t) \rangle = \langle \psi_0 | \tilde{\mathbf{A}}(t) | \psi_0 \rangle .$$

Die Bewegungsgleichungen (für $\partial_t \mathbf{A} = 0$) sind jetzt:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{A}} &= [\hat{\mathbf{A}}(t), \mathbf{H}_0] , \\ i\hbar \partial_t \hat{\psi}(\vec{x}, t) &= \hat{\mathbf{W}}(t) \hat{\psi}(\vec{x}, t) , \end{aligned}$$

mit dem zeitabhängigen Störterm $\hat{\mathbf{W}}(t) = e^{it\mathbf{H}_0/\hbar}\mathbf{W}e^{-it\mathbf{H}_0/\hbar}$.

Das Wechselwirkungsbild spielt eine wichtige Rolle in der zeitabhängigen Störungstheorie. In dieser ist \mathbf{H}_0 bekannt und die Störung typischerweise ein Messvorgang. Da die Zeitentwicklung, welche aus der Störung resultiert, im Wechselwirkungsbild separat auftritt, kann man im Wechselwirkungsbild sehr einfach nach Potenzen in $\hat{\mathbf{W}}$ entwickeln.

3.2 Translationen, Drehungen und Galilei-Invarianz

3.2.1 Räumliche Translationen

Erzeugende von Transformationen

Analog zu den gerade diskutierten zeitlichen Translationen,

$$\psi \quad \rightarrow \quad \psi(\vec{x}, t + \tau) = e^{-i\tau\mathbf{H}/\hbar}\psi(\vec{x}, t) ,$$

kann man die räumlichen Translationen $\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \vec{a}$ behandeln. Die Verschiebung des Koordinatenursprungs um einen konstanten Vektor \vec{a} wird durch den Operator $U(\vec{a})$ bewirkt, mit

$$U(\vec{a})u(\vec{x}) = u(\vec{x} + \vec{a})$$

$$U(\vec{a}) = e^{i\vec{a}\cdot\vec{\mathbf{P}}/\hbar} ,$$

wobei $u(\vec{x})$ eine (beliebig oft differenzierbare) Wellenfunktion ist, und $\vec{\mathbf{P}} = \hbar \vec{\nabla} / i$ der Impulsoperator. Wegen dieser Exponentialdarstellung nennt man $\vec{\mathbf{P}}$ die *Erzeugende* des Translationsoperators.

Fall einer Dimension

Wir betrachten den Fall einer räumlichen Dimension,

$$U(a)u(x) = e^{ia\mathbf{P}/\hbar}u(x) = e^{a\partial/\partial x}u(\vec{x}) = \sum_n \frac{a^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial^n x} u(x) \equiv u(x+a), \quad (3.1)$$

was zu beweisen war.

Unitarität

Mit

$$\left(U(\vec{a})u(\vec{x}), U(\vec{a})u(\vec{x}) \right) = \int d^3\vec{x} u^*(\vec{x} + \vec{a})u(\vec{x} + \vec{a}) = \int d^3\vec{x} u^*(\vec{x})u(\vec{x}) = (u(\vec{x}), u(\vec{x}))$$

ist das Skalarprodukt erhalten und

$$u(\vec{x}) \rightarrow U(\vec{a})u(\vec{x}) = e^{i\vec{a}\cdot\vec{\mathbf{P}}/\hbar}u(\vec{x})$$

eine unitäre Transformation.

N-Teilchen Wellenfunktion

Bei N Teilchen hat der Gesamtimpuls-Operator die Form

$$\vec{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \sum_{n=1}^N \vec{\nabla}_n \quad \text{und} \quad u(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N).$$

Man muss nun alle N Koordinaten \vec{x}_n gleichzeitig transformieren:

$$U(\vec{a})u(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = e^{i\vec{a}\cdot\vec{\mathbf{P}}/\hbar}u(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = u(\vec{x}_1 + \vec{a}, \dots, \vec{x}_N + \vec{a}).$$

Gesamtimpuls-Erhaltung

Es sei nun

$$\mathbf{H} = \sum_{n=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m_n} \Delta_n + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^N V_{jk}(\vec{x}_j - \vec{x}_k),$$

dann folgt wegen der Translations-Invarianz von \mathbf{H} aus

$$\begin{aligned} \mathbf{H}u(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) &= Eu(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N), \\ \mathbf{H}u(\vec{x}_1 - \vec{a}, \dots, \vec{x}_N - \vec{a}) &= Eu(\vec{x}_1 - \vec{a}, \dots, \vec{x}_N - \vec{a}), \end{aligned}$$

sodaß

$$\mathbf{H}U(-\vec{a})u(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = EU(-\vec{a})u(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N).$$

Multiplikation von links mit $U(\vec{a})$ ergibt

$$\begin{aligned} U(\vec{a})\mathbf{H}U(-\vec{a})u(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) &= U(\vec{a})EU(-\vec{a})u(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = Eu(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \\ &= \mathbf{H}u(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N). \end{aligned}$$

Da diese Beziehung für alle Eigenfunktionen des selbstadjungierten Operators \mathbf{H} gilt, folgt dass

$$U(\vec{a})\mathbf{H}U(-\vec{a}) = \mathbf{H}, \quad \boxed{U(\vec{a})\mathbf{H} - \mathbf{H}U(\vec{a}) = 0}.$$

Der Hamilton-Operator vertauscht also mit allen Translationen. Dieser Zusammenhang gilt für alle Symmetrien.

Infinitesimale Translationen

Entwickelt man $U(\vec{a}) = \exp[i\vec{a} \cdot \vec{\mathbf{P}}/\hbar]$ nach Potenzen von \vec{a} bis zur Ordnung \vec{a} , so erhält man

$$\left(1 + i\vec{a} \cdot \vec{\mathbf{P}}/\hbar\right)\mathbf{H} - \mathbf{H}\left(1 + i\vec{a} \cdot \vec{\mathbf{P}}/\hbar\right) = 0$$

für kleinen \vec{a} , und somit

$$\boxed{[\mathbf{H}\mathbf{P}_j - \mathbf{P}_j\mathbf{H}] = [\mathbf{H}, \mathbf{P}_j] = 0} \quad j = 1, 2, 3.$$

Der Gesamt-Impuls $\vec{\mathbf{P}}$ kommutiert also mit \mathbf{H} und ist demnach eine Konstante der Bewegung (Erhaltungssatz). Dieser Zusammenhang gilt allgemein:

Invarianz unter Symmetrien

Ein Operator \mathbf{A} ist invariant unter einer Symmetrie dann und nur dann wenn er mit der Erzeugenden \mathbf{E} der Symmetrie vertauscht, also wenn $[\mathbf{A}, \mathbf{E}] = 0$.

In unserem obigen Beispiel war $\mathbf{A} = \mathbf{H}$ und $\mathbf{E} = \vec{\mathbf{P}}$.

3.2.2 Drehungen

Erzeugende für Drehungen

Der Drehimpuls-Operator

$$\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{x}} \times \vec{\mathbf{P}}, \quad \mathbf{L}_j = \frac{\hbar}{i} \varepsilon_{jkl} \mathbf{x}_k \partial_l$$

ist die *Erzeugenden* endlicher Drehungen.

Sei φ der Drehwinkel einer Drehung $R_{\vec{n}}(\varphi)$ um die normierte Richtung \vec{n} , mit $\vec{n}^2 = 1$. Ist $\psi(\vec{x}, t)$ die Wellenfunktion von einem spinlosen Teilchen, so gilt

$$\begin{aligned} U(\vec{n}, \varphi)\psi(\vec{x}, t) &\equiv e^{i\vec{L}\cdot\vec{n}\varphi/\hbar} \psi(\vec{x}, t) \\ &= \psi(R_{\vec{n}}(\varphi)\vec{x}, t) . \end{aligned}$$

Der Beweis geht analog zu dem für Translationen, siehe (3.1). Die 3×3 Drehmatrix $R_{\vec{n}}(\varphi)$ erhält die Norm,

$$\begin{aligned} \int d^3\vec{x} \psi^*(R_{\vec{n}}(\varphi)\vec{x}, t) \psi(R_{\vec{n}}(\varphi)\vec{x}, t) &= \int d^3(R_n^{-1}(\varphi)\vec{x}) \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \\ &= \int d^3\vec{x} \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) , \end{aligned}$$

und somit ist auch $U(\vec{n}, \varphi)$ ein unitärer Operator. Falls $V(\vec{x}) = V(\|\vec{x}\|)$, so folgt

$$e^{i\vec{L}\cdot\vec{n}\varphi/\hbar} \mathbf{H} e^{-i\vec{L}\cdot\vec{n}\varphi/\hbar} = \mathbf{H} , \quad \text{oder}$$

oder

$$[\mathbf{H}, \vec{n} \cdot \vec{\mathbf{L}}] = 0 , \quad [\mathbf{H}, \mathbf{L}_j] = 0 .$$

Die Komponenten des Drehimpulsoperators \mathbf{L}_j sind also Konstanten der Bewegung.

Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}\hbar$

Der Gesamtdrehimpuls eines Teilchens mit Spin ist $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Um die Erzeugenden für Drehungen von Spionoren zu erhalten muss man daher $\vec{n} \cdot \vec{\mathbf{L}}$ in $U(\vec{n}, \varphi)$ durch

$$\vec{n} \cdot \vec{\mathbf{S}}, \quad \vec{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3),$$

ersetzen, mit den Pauli-Matrizen σ_i . Man erhält

$$\begin{aligned} e^{i\vec{n}\cdot\vec{\mathbf{S}}\varphi/\hbar} &= e^{i\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\varphi/2} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left(\frac{i\varphi}{2}\right)^j (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^j \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j)!} \left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2j} + i(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j+1)!} \left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2j+1} , \end{aligned}$$

wobei wir

$$(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^{2j} = 1, \quad (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^{2j+1} = \vec{n} \cdot \vec{\sigma}$$

verwendet haben. Also gilt

$$U_S(\vec{n}, \varphi) = e^{i\vec{n}\cdot\vec{\mathbf{S}}\varphi/\hbar} = \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) + i(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) .$$

Offensichtlich ergibt $U_S(\vec{n}, 2\pi) = -1$ und nicht $+1$, wie man vielleicht erwartet hätte. Die Drehungen von Spinoren werden daher von der $SU(2)$ Gruppe beschrieben, und nicht von der Gruppe für räumliche Drehungen in drei Dimensionen, $O(3)$.

Die $SU(2)$ Gruppe

Aus

$$\cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) + i(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} + in_3 \sin\frac{\varphi}{2} & (n_2 + in_1) \sin\frac{\varphi}{2} \\ -(n_2 - in_1) \sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} - in_3 \sin\frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

folgt für die Determinante

$$\det[U_S(\vec{n}, \varphi)] = \cos^2\left(\frac{\varphi}{2}\right) + n_3^2 \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right) + (n_1^2 + n_2^2) \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right) = 1,$$

also

$$\det[U_S(\vec{n}, \varphi)] = 1.$$

Da außerdem

$$\begin{aligned} U_S(\vec{n}, \varphi) U_S^+(\vec{n}, \varphi) &= \left(\cos\frac{\varphi}{2} + i\vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin\frac{\varphi}{2}\right) \left(\cos\frac{\varphi}{2} - i\vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin\frac{\varphi}{2}\right) \\ &= \cos^2\frac{\varphi}{2} + (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 \sin^2\frac{\varphi}{2} = 1 \end{aligned}$$

gilt, folgt $U_S^+(\vec{n}, \varphi) = U_S^{-1}(\vec{n}, \varphi)$, also dass $U_S(\vec{n}, \varphi)$ ein Element der Gruppe von unitären 2×2 -Matrizen mit Determinante=1 ist. Diese Gruppe nennt man $SU(2)$.

Allgemeine Quantisierungsachse

In Kap. 1.3.1 kam die Matrix

$$\underline{x} = \vec{x} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & -x_3 \end{pmatrix}$$

im Zusammenhang mit den Projektionsoperatoren $P = (1 \pm \vec{x} \cdot \vec{\sigma})/2$ auf eine allgemeine Quantisierungsachse $\vec{x}/|\vec{x}|$ vor, sie spielt daher auch bei $SU(2)$ Drehungen eine zentrale Rolle.

$\vec{x} \cdot \vec{\sigma}$ ist hermitisch, es gilt

$$\underline{x}^+ = \underline{x}, \quad \det(\underline{x}) = -\vec{x}^2, \quad \text{Sp}(\underline{x}) = 0.$$

$SU(2)$ Drehungen

Die transformierte Matrix \underline{x}_S

$$\underline{x}_S = U_S(\vec{n}, \varphi) \underline{x} U_S^+(\vec{n}, \varphi)$$

ist wiederum hermitisch,

$$(\underline{x}_S \underline{x}_S^+)^+ = U_S^{++} \underline{x}^+ U_S^+ = U_S \underline{x} U_S^+,$$

mit einer verschwindenden Spur:

$$\text{Sp}(U_S \underline{x} U_S^+) = \text{Sp}(U_S^+ U_S \underline{x}) = \text{Sp}(\underline{x}) .$$

Es gibt also ein \vec{x}_S , so dass

$$U_S(\vec{n}, \varphi) \underline{x} U_S^+(\vec{n}, \varphi) = \underline{x}_S \equiv \vec{\sigma} \cdot \vec{x}_S .$$

Die Zuordnung $\vec{x}_S = \mathbf{A}(\vec{n}, \varphi) \vec{x}$ definiert eine lineare Transformation der $\vec{x} \rightarrow \vec{x}_S$. Wegen

$$\begin{aligned} -\vec{x}_S^2 &= \det(\underline{x}_S) = \det(U_S(\vec{n}, \varphi) \underline{x} U_S^+(\vec{n}, \varphi)) \\ &= \det(U_S) \det(U_S^+) \det(\underline{x}) = \det \underline{x} \\ &= -\vec{x}^2 \end{aligned}$$

ist $\mathbf{A}(\vec{n}, \varphi)$ eine 3×3 Drehmatrix, $\mathbf{A}(\vec{n}, \varphi) = R_{\vec{n}}(\varphi)$.

Darstellungstheorie

Dieses ist ein Beispiel aus der Darstellungstheorie.

Darstellungen der SU(2) Gruppe

Jeder unitären 2×2 -Matrix $U_S(\vec{n}, \varphi)$ mit Determinante 1 ist eine 3-dim. Drehmatrix $R_{\vec{n}}(\varphi)$ zugeordnet.

Man spricht von einer 3-dimensionalen *Darstellung* der SU(2)-Gruppe. Jedem Element aus SU(2) wird eine 3×3 -Matrix zugeordnet, so dass die Gruppenoperationen erhalten bleiben.

Allgemein werden in der Darstellungstheorie die Repräsentation einer allg. Gruppe durch $n \times n$ Matrizen behandelt.

- Die Darstellungstheorie der Krystalsymmetrien bildet die Grundlage zur Klassifizierung von Eigenfunktionen in der Festkörperphysik.
- Die Darstellungstheorie von Feldtheorien bestimmen in der Hochenergiephysik die Einteilung der Elementarteilchen. Die Symmetriegruppe des Standardmodells ist $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$.

Drehung um die z-Achse

Als Beispiel betrachten wir eine Drehung um die z-Achse,

$$\begin{aligned} \vec{n} &= (0, 0, 1), \\ U_S &= \cos \frac{\varphi}{2} + i \sigma_3 \sin \frac{\varphi}{2} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

Wir bemerken, dass $U_S(\vec{n}, \varphi + 2\pi) = -U_S(\vec{n}, \varphi)$. Erst eine Rotation um 4π führt eine SU(2) Matrix in sich selber über. In Komponenten gilt

$$U_S \underline{x} U_S^+ = \begin{pmatrix} x_3 & (x_1 - ix_2)e^{i\varphi} \\ (x_1 + ix_2)e^{-i\varphi} & -x_3 \end{pmatrix}$$

für $\vec{n} = (0, 0, 1)$, so dass

$$\begin{aligned} (x_1)_S &= x_1 \cos(\varphi) + x_2 \sin(\varphi) \\ (x_2)_S &= -x_1 \sin(\varphi) + x_2 \cos(\varphi) \\ (x_3)_S &= x_3 \end{aligned}$$

Wir erhalten also mit

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}_S = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix},$$

unsere bekannte 3×3 Drehmatrix um die z -Achse.

Allgemeine Drehungen

Es ist eine gute Übung für den Umgang mit den Pauli-Matrizen die allgemeine Transformationsvorschrift

$$U_S(\vec{n}, \varphi) \vec{\sigma} U_S^+(\vec{n}, \varphi) = \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) - \vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{\sigma}) \cos \varphi + \vec{n} \times \vec{\sigma} \sin \varphi.$$

auszurechnen.

Drehung der Wellenfunktion

Ist

$$\tilde{\Psi}(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{x}, t) \\ \Psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix}$$

ein zweikomponentiger Spinor, so transformiert er sich bei einer Drehung $\vec{x} \rightarrow \vec{x}_S = R_{\vec{n}}(\varphi)\vec{x}$ folgendermaßen

$$\tilde{\Psi}(\vec{x}, t) \rightarrow \tilde{\Psi}_S(\vec{x}_S) = U_S(\vec{n}, \varphi)\tilde{\Psi},$$

ganz in Analogie zu der Transformationseigenschaft einer Wellenfunktion unter Rotationen des Koordinatensystems.

3.3 Zeitumkehrinvarianz

Klassisch

In der klassischen Mechanik ist die ‘Zeit’- oder ‘Bewegungs’-Umkehr durch

$$\Theta : \begin{array}{l} t \rightarrow -t \\ \vec{x}(t) \rightarrow \vec{x}^\Theta(t) = \vec{x}(-t) \\ \vec{p}(t) \rightarrow \vec{p}^\Theta(t) = m \frac{d}{dt} \vec{x}^\Theta(t) = -\vec{p}(-t) \end{array}$$

definiert. Die durch \vec{x}^Θ , \vec{p}^Θ beschriebene Bahn ist geometrisch dieselbe wie die durch \vec{x} , \vec{p} beschriebene, sie wird nur in umgekehrter Richtung durchlaufen. Die Newton’schen (Lagrange’schen) Bewegungsgleichungen sind i.a. invariant gegenüber der Transformation Θ .

Quantenmechanisch

Quantenmechanisch definieren wir im Schrödinger-Bild

$$\mathbf{Q}_j^\Theta = \mathbf{Q}_j, \quad \mathbf{P}_j^\Theta = -\mathbf{P}_j.$$

Wir verlangen die Invarianz der Schrödinger Gleichung unter Θ :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \psi(\vec{x}, t) &= \mathbf{H} \psi(\vec{x}, t), \\ -i\hbar \frac{d}{dt} \psi^*(\vec{x}, t) &= \mathbf{H}^* \psi^*(\vec{x}, t), \\ i\hbar \frac{d}{d(-t)} \psi^*(\vec{x}, -t) &= \mathbf{H}^\Theta \psi^*(\vec{x}, -t). \end{aligned}$$

Dabei ist im allgemeinen

$$\mathbf{H}^\Theta(\vec{\mathbf{P}}, \vec{\mathbf{Q}}) = \mathbf{H}(-\vec{\mathbf{P}}, \vec{\mathbf{Q}}) = \mathbf{H}(\vec{\mathbf{P}}, \vec{\mathbf{Q}}),$$

wie z.B. für $\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \vec{\mathbf{P}}^2 + V(\vec{\mathbf{Q}})$. Damit ist Θ eine *antilineare* Transformation,

$$(\lambda_1 \mathbf{A} + \lambda_2 \mathbf{B})^\Theta = \lambda_1^* \mathbf{A}^\Theta + \lambda_2^* \mathbf{B}^\Theta, \quad (\mathbf{AB})^\Theta = \mathbf{A}^\Theta \mathbf{B}^\Theta,$$

d.h. man muss dabei zusätzlich die Wellenfunktion komplex konjugieren.

Zeitentwicklungsoperator

Der Zeitentwicklungsoperators $U(t)$ verhält sich unter Zeitumkehr wie erwartet,

$$U^\Theta(t) = \left(e^{it\mathbf{H}/\hbar} \right)^\Theta = e^{-it\mathbf{H}^\Theta/\hbar} = e^{-it\mathbf{H}/\hbar} = U(-t).$$

Spinlose Teilchen

Der Operation Θ entspricht ein *antiunitärer* Operator $\hat{U}(\Theta)$, mit folgenden Eigenschaften:

$$\begin{aligned}\hat{U}(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) &= \lambda_1^*\hat{U}\psi_1 + \lambda_2^*\hat{U}\psi_2, \\ (\hat{U}\psi_1, \hat{U}\psi_2) &= (\psi_1, \psi_2)^* = (\psi_2, \psi_1).\end{aligned}$$

Für ein Teilchen ohne Spin definiert man

$$\begin{aligned}\hat{U}(\Theta)\psi(\vec{x}, t) &\equiv \psi^\Theta(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, -t), \\ \hat{U}^2(\Theta) &= 1, \\ \hat{U}(\Theta) &= \hat{U}(\Theta)^{-1}.\end{aligned}$$

Elektromagnetische Felder

Elektrische und magnetische Felder haben unterschiedliche Transformationsseigenschaften.

- Elektrische Felder

Elektrische Felder werden von Ladungen erzeugt, das elektrische Potential $\phi(\vec{x})$ ist zeitumkehrinvariant.

Bezgl. einer Inversion $\vec{x} \rightarrow (-\vec{x})$ transformieren sich elektrische Felder wie Vektoren und kehren die Richtung um.

- Magnetische Felder

Magnetische Felder werden durch bewegte Ladungen erzeugt, sie kehren daher unter einer Zeitinversion ihre Richtung um.

Unter Inversionen $\vec{x} \rightarrow (-\vec{x})$ transformieren sich magnetische Felder wie axiale Vektoren und kehren die Richtung nicht um.

Der Hamilton-Operator für ein Teilchen in einem äusserem Vektorfeld $\vec{A}(\vec{x}, t)$ und äusserem elektrischem Potential $\phi(\vec{x}, t)$ ist

$$\mathbf{H}(\vec{A}) = \frac{1}{2m} \left(\vec{\mathbf{P}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q\phi(\vec{x}).$$

Damit ist

$$\hat{U}(\Theta)\mathbf{H}(\vec{A})\hat{U}(\Theta)^{-1} = \mathbf{H}(-\vec{A}) \neq \mathbf{H}(\vec{A}).$$

Im Gegensatz zu einem äusseren elektrischen Feld bricht ein äusseres magnetisches Feld die Invarianz gegenüber Zeitumkehr.

In einem Magneten wie Eisen werden spontan innere magnetische Felder erzeugt. Magnetismus bricht also spontan die Zeitumkehrinvarianz, denn die Schrödinger-Gleichung für Eisen ist natürlich Zeitumkehr-invariant (siehe Festkörperphysik).

Zeitumkehr vom Spin der Elektronen

Der Spin der Elektronen entspricht einem magnetischen Moment und wird daher bei der Zeitumkehr invertiert, die beiden Komponenten des Spinors

$$\tilde{\Psi}(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{x}, t) \\ \Psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix}$$

werden also bei der Zeitumkehr vertauscht und müssen zudem noch das relative Vorzeichen umkehren. Um dies zu sehen, betrachten wir die Erwartungswerte $\langle \sigma_j \rangle$ der drei Pauli-Matrizen

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & \langle \sigma_1 \rangle &= \Psi_+^* \Psi_- + \Psi_-^* \Psi_+, \\ \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, & \langle \sigma_2 \rangle &= -i(\Psi_+^* \Psi_- - \Psi_-^* \Psi_+), \\ \sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & \langle \sigma_3 \rangle &= \Psi_+^* \Psi_+ - \Psi_-^* \Psi_-. \end{aligned}$$

Man sieht leicht, dass die Forderung $\langle \sigma_j \rangle_{\Theta} = -\langle \sigma_j \rangle$ für alle drei Komponenten $j = 1, 2, 3$ erfüllt ist falls

$$\tilde{\Psi}^{\Theta}(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} i\Psi_-^*(\vec{x}, -t) \\ -i\Psi_+^*(\vec{x}, -t) \end{pmatrix}.$$

Insbesondere bleibt mit

$$\begin{aligned} (\tilde{\Psi}^{\Theta}(t), \tilde{\Psi}^{\Theta}(t)) &= [-i\Psi_-(-t)][i\Psi_-^*(-t)] + [i\Psi_+(-t)][-i\Psi_+^*(-t)] \\ &= \Psi_-(-t)\Psi_-^*(-t) + \Psi_+(-t)\Psi_+^*(-t) \end{aligned} \quad (3.2)$$

die Norm erhalten (wir haben hier die Ortskoordinate \vec{x} unterdrückt).

Zeitumkehroperator für Teilchen mit Spin-1/2

Bezeichnen wir die *komplexe Konjugation* mit \mathbf{K} , und definieren den Zeitumkehroperator $\hat{U}(\Theta)$ für Teilchen mit Spin-1/2 nun als

$$\hat{U}(\Theta) = \mathbf{K} \otimes \sigma_2,$$

wobei das *äußere Produkt* \otimes andeutet, dass \mathbf{K} im Raum der quadratintegrablen Funktionen wirkt und σ_2 im Raum der Spinoren. Es gilt

$$\hat{U}^2(\Theta) = \mathbf{K} \otimes \sigma_2 \cdot \mathbf{K} \otimes \sigma_2 = -\sigma_2^2 = -\mathbf{1},$$

da $\mathbf{K}\sigma_2 = -\sigma_2\mathbf{K}$. Für N Elektronen bekommt man analog

$$\hat{U}(\Theta) = \mathbf{K} \bigotimes_{n=1}^N \sigma_2^{(n)}, \quad \hat{U}(\Theta)^2 = (-1)^N \mathbf{1}. \quad (3.3)$$

Man bemerke den Unterschied zwischen ungeraden und geraden Werten von N .

Kramers Entartung

Diese Relation hat folgende wichtige Anwendung:

Kramers Entartung

Der Hamilton-Operator \mathbf{H} sei zeitumkehrinvariant,

$$\hat{U}(\Theta)\mathbf{H}\hat{U}(\Theta)^{-1} = \mathbf{H},$$

und habe den Eigenwert E , $\mathbf{H}\tilde{\psi}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = E\tilde{\psi}$.
Dann sind $\tilde{\psi}$ und $\hat{U}(\Theta)\tilde{\psi}$ für ungerades N linear unabhängig und E ist mindestens 2-fach entartet.

Die zweifache Entartung folgt direkt aus der Zeitumkehr-Invarianz des Hamilton-Operators,

$$\mathbf{H}(\hat{U}(\Theta)\tilde{\psi}) = \hat{U}(\Theta)(\mathbf{H}\tilde{\psi}) = E\hat{U}(\Theta)\tilde{\psi}.$$

Für lineare Unabhängigkeit verwenden wir die Entartung,

$$\tilde{\psi}(\vec{x}, t) = e^{-iEt/\hbar}\tilde{\psi}(\vec{x}), \quad \tilde{\psi}^\Theta(\vec{x}, t) = e^{-iEt/\hbar}\tilde{\psi}^\Theta(\vec{x}),$$

sowie $\tilde{\psi}^\Theta(\vec{x}) = (i\psi_-^*(\vec{x}), -i\psi_+^*(\vec{x}))$, und erhalten

$$\left(\tilde{\psi}^\Theta, \tilde{\psi}\right) = -i\psi_- \psi_+ + i\psi_+ \psi_- = 0, \quad (3.4)$$

analog zu (3.2). Was zu beweisen war. Die Herleitung (3.4) gilt für ein Teilchen, $N = 1$, und kann auf ungerade N verallgemeinert werden, wegen (3.3) nicht aber für gerade N . In einem äußeren elektrischen Feld sind die Energie-Niveaus einer ungeraden Anzahl von Elektronen also immer mindestens 2-fach entartet. Die Entartung kann durch Anlegen eines Magnetfeldes aufgehoben werden.