

Chapter 9

Zeitentwicklung und Symmetrien

9.1 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 selber 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 abhängen kann, z.B. wie

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

Klassisch entspricht $p/m = v$ der Geschwindigkeit, der Operator \mathbf{A} entspricht also in diesem Beispiel 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

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

hier mit der Abkürzung $\partial_t = \partial/\partial t$. Dieses ist die grundlegende Bewegungsgleichung für Operatoren.

Beispiel

Sei $\mathbf{A} = \vec{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \text{grad}$, dann gilt $\partial_t \vec{\mathbf{P}} = 0$ und

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

Hieraus folgt mit

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

das Analogon zur Newton'schen Bewegungsgleichung $\frac{d}{dt} \vec{p} = -\text{grad}V$.

Erwartungswerte 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

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

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 $m+1 = n$ vorgenommen 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*:

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

9.1.1 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

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

Dieser Ausdruck legt es nahe, *zeitabhängige Operatoren*

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

zu definieren.

Bewegungsgleichung von Operatoren

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

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

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, $i\hbar dt \tilde{\mathbf{A}}/dt = [\tilde{\mathbf{A}}, \mathbf{H}] + i\hbar \partial_t \tilde{\mathbf{A}}$, ist analog zu jener für die Erwartungswerte von Operatoren.

Schrödinger ↔ Heisenberg Bild

Wir haben zwei Möglichkeiten der Beschreibung zeitabhängiger Erwartungswerte, hier für den Fall $\partial_t \mathbf{A} = 0$:

Schrödinger-Bild

Die Operatoren sind zeitunabhängig und die 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, dafür hängen Operatoren $\tilde{\mathbf{A}}(t)$ von der Zeit ab. Die Bewegungsgleichung für 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

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

Wir multiplizieren von links mit $U(t)$ und von rechts mit $U(-t) = U^+(t)$. Wegen

$$U(t)U(-t) = 1, \quad \tilde{\mathbf{a}}^+ = U(t)\mathbf{a}^+U(-t), \quad \tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{H} ,$$

ergibt sich

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

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

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

Diese Operator-Differentialgleichungen haben die Lösungen:

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

Observable

Für den Ort- und Impuls-Operator,

$$\tilde{\mathbf{Q}}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}\beta} (\tilde{\mathbf{a}}(t) + \tilde{\mathbf{a}}^+(t)), \quad \tilde{\mathbf{P}}(t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\beta}{\sqrt{2}} (\tilde{\mathbf{a}}(t) - \tilde{\mathbf{a}}^+(t)), \quad \beta^2 = \frac{m\omega}{\hbar},$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{Q}}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}\beta} (e^{i\omega t} \tilde{\mathbf{a}}^+(0) + e^{-i\omega t} \tilde{\mathbf{a}}(0)) \\ &= \frac{\cos \omega t}{\sqrt{2}\beta} (\tilde{\mathbf{a}}^+(0) + \tilde{\mathbf{a}}(0)) + \frac{i \sin \omega t}{\sqrt{2}\beta} (\tilde{\mathbf{a}}^+(0) - \tilde{\mathbf{a}}(0)) \end{aligned}$$

Wir erhalten also mit

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

die klassische Lösung des harmonischen Oszillators (eine Ellipse im Zustandsraum). Eine alternative Herleitung benutzt kohärente Zustände, welche im Abschnitt ?? diskutiert wurden.

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 ist, also eine Erhaltungsgröße, 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. Dies wurde schon im Abschnitt ?? erwähnt.

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 mit Hilfe der Bewegungsgleichung und der Vertauschungsrelationen

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

herleiten.

9.1.2 Wechselwirkungsbild

Es sei $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{W}$, wobei \mathbf{H}_0 das System ohne Wechselwirkung (Störung) \mathbf{W} beschreibt. Um das volle System approximativ zu lösen, möchte man nun ausnutzen, dass die Eigenzustände von \mathbf{H}_0 bekannt sind.

- *Schrödinger Bild*

Die Wellenfunktion ist eine Funktion der Zeit, Operatoren nicht (falls ein Operator nicht explizit von der Zeit abhängt).

- *Heisenberg Bild*

Die Wellenfunktion ist nicht Zeit-abhängig, nur Operatoren.

- *Wechselwirkungs-Bild*

Die Zeit-Abhängigkeit der Wellenfunktion wird durch die Wechselwirkung \mathbf{W} bestimmt, die der Operatoren von \mathbf{H}_0 (modulo explizite Zeitabhängigkeiten).

Im Schrödinger-Bild werden Zustände durch

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

beschrieben. Man kann nun die zeitliche Entwicklung von $\psi(\vec{x}, t)$ relativ zu \mathbf{H}_0 rückwärts verfolgen und

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

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

$$\widehat{\mathbf{A}}(t) = e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar} \mathbf{A} e^{-i\mathbf{H}_0 t/\hbar}$$

Erwartungswerte bleiben nach Konstruktion invariant,

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

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

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

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 direkt nach Potenzen in $\widehat{\mathbf{W}}$ entwickeln.

9.2 Translationen, Drehungen und Galilei-Invarianz

Die zeitliche Entwicklung einer Wellenfunktion von t zu $t + \tau$,

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

hier im Schrödinger Bild, kann man auch als eine *Translatione in der Zeit* auffassen. Analog betrachten wir nun *räumlichen Translationen* $\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \vec{a}$.

9.2.1 Räumliche Translationen

Erzeugende von Transformationen

Bei räumlichen Translationen wird die Verschiebung des Koordinatenursprungs um einen konstanten Vektor \vec{a} durch den Operator $U(\vec{a})$ bewirkt, mit

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

wobei $u(\vec{x})$ die Wellenfunktion ist (beliebig oft differenzierbar), 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

Für den Beweis betrachten wir den Fall einer räumlichen Dimension,

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

wobei wir im letzten Schritt die Definition der Taylor-Entwicklung benutzt haben.

Unitarität

Mit

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

ist das Skalarprodukt erhalten. Räumliche Translationen,

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

entsprechen daher unitären Transformationen.

N-Teilchen Wellenfunktion

Bei N Teilchen hat der Gesamtimpuls-Operator die Form

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

Alle N Koordinaten \vec{x}_n müssen gleichzeitig transformiert werden:

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

Gesamtimpuls-Erhaltung

Es sei nun

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

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

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

daß

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

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

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

Da diese Beziehung für alle Eigenfunktionen des selbstadjungierten Operators \mathbf{H} gelten soll, hat man

$$U(\vec{a})\mathbf{H}U(-\vec{a}) = \mathbf{H},$$

$$U(\vec{a})\mathbf{H} - \mathbf{H}U(\vec{a}) = 0$$

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

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

für kleinen \vec{a} , und damit

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

Der Gesamtimpuls $\vec{\mathbf{P}}$ vertauscht 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 $\mathbf{E} = \vec{\mathbf{P}}$.

9.2.2 Drehungen

Wir erinnern an die Definition der Drehimpuls Operatoren,

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

Drehungen $\vec{x} \rightarrow R_{\vec{n}}(\varphi)\vec{x}$ sind durch zwei Größen definiert:

- φ , der Drehwinkel einer Drehung, und
- \vec{n} , die Drehachse, mit $\vec{n}^2 = 1$.

Man kann auch beides zu $\vec{\varphi} = \varphi \vec{n}$ zusammenfassen. Analog schreibt man $R_{\vec{\varphi}} = R_{\vec{n}}(\varphi)$ für die 3×3 Dreh-Matrizen.

Erzeugende für Drehungen

War der Impuls die Erzeugenden für Translationen, sind die Drehimpuls-Operatoren analog die Erzeugende für endliche Drehungen.

Ist $\psi(\vec{x}, t)$ die Wellenfunktion eines spinlosen Teilchen, so gilt

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

Der Beweis lässt sich analog zu Translationen führen (Taylor-Reihe), ist rechenstechnisch aber etwas aufwendiger.

Norm

Die 3×3 Drehmatrix $R_{\vec{\varphi}}$ erhält die Norm,

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

wobei wir im letzten Schritt verwendet haben, dass Drehmatrixen orthogonale Transformationen sind. Somit ist $U(\vec{\varphi})$ ein unitärer Operator.

Rotationsinvariantes Potential

Falls das Potential $V(\vec{x}) = V(|\vec{x}|)$, nur vom Radius abhängt, wie beim Wasserstoff-Atom, so folgt

$$e^{i\vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\varphi} / \hbar} \mathbf{H} e^{-i\vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\varphi} / \hbar} = \mathbf{H} .$$

Mit $\vec{\varphi} = \varphi \vec{n}$ gilt also

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

Die Komponenten des Drehimpulsoperators \mathbf{L}_j sind damit 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

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

Offensichtlich ergibt $U_S(\vec{n}, 2\pi) = -1$ und nicht $+1$, wie man vielleicht erwartet hätte.

Spins werden durch Drehungen um 4π in sich übergeführt, nicht um 2π .

Die Gruppe von Drehungen von Spinoren heisst $SU(2)$, jene für räumliche Drehungen in drei Dimensionen $O(3)$.

Die $SU(2)$ Gruppe

Aus

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

folgt

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

also

$$\det(U_S(\vec{\varphi})) = 1$$

Mit

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

ist $U_S(\vec{n}, \varphi)$ unitär,

$$U_S^+(\vec{n}, \varphi) = U_S^{-1}(\vec{n}, \varphi)$$

Die Gruppe von unitären 2×2 Matrizen mit Einheits-Determinante nennt man $SU(2)$.

Allgemeine Quantisierungsachse

In Kap. 7.2.1 definierten wir die Matrix,

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

welche wir im Zusammenhang mit $P = (1 \pm \vec{x} \cdot \vec{\sigma})/2$ benutzten, dem Projektionsoperator auf eine allgemeine Quantisierungsachse $\vec{x}/|\vec{x}|$. Diese Matrix spielt auch bei $SU(2)$ Drehungen eine zentrale Rolle. Mit

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

ist $\vec{x} \cdot \vec{\sigma}$ hermitisch.

$SU(2)$ 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

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

und hat die Spur 0,

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

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

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

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-dimensionale 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

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

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

$$\begin{aligned} U_S(\vec{n}, \varphi) \vec{\sigma} U_S^\dagger(\vec{n}, \varphi) &= \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) - \vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{\sigma}) \cos \varphi \\ &+ \vec{n} \times \vec{\sigma} \sin \varphi \end{aligned}$$

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 Koordiantensystems.

9.3 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 :

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

da 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,

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

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 Operator $\hat{U}(\Theta)$ hat die Eigenschaften

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

was einen *antiunitären Operator* Operator definiert. Zusammengefaßt gilt

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

für spinlose Teilchen. Ist $\mathbf{H}^\Theta = \mathbf{H}$, so ist mit $\psi(\vec{x}, t)$ auch $\psi^\Theta(\vec{x}, t)$ eine Lösung von $i\hbar\partial_t\psi = \mathbf{H}\psi$. Dies bedeutet, dass sowohl $\Re\psi$ und $\Im\psi$ separat Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind.

Elektromagnetische Felder

Elektrische und magnetische Felder haben unterschiedliche Transformations-eigenschaften.

- Elektrische Felder

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

Bezgl. einer Inversionen $\vec{x} \rightarrow (-\vec{x})$ 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 $\varphi(\vec{x}, t)$ ist (\rightarrow QM2)

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

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 (isoliertes) Eisen Zeitumkehr-invariant ist (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 $j = 1, 2, 3$ für

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

erfüllt ist.

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 gilt analog

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

was die *Kramers Entartung* zur Folge hat.

Kramers Entartung

Die obrige Relation hat eine wichtige Anwendung:

Kramers Entartung

Der Hamilton-Operator \mathbf{H} sei zeitumkehr-invariant,

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

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 damit 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 die lineare Unabhängigkeit berechnen wir

$$\begin{aligned} (\hat{U}(\Theta)\tilde{\psi}, \hat{U}(\Theta)\tilde{\psi}) &= (\tilde{\psi}, \tilde{\psi}) = 1 \\ (\hat{U}\tilde{\psi}, \tilde{\psi}) &= (\hat{U}^2\tilde{\psi}, \hat{U}\tilde{\psi})^* = (-1)^N (\tilde{\psi}, \hat{U}\tilde{\psi})^* \\ &= (-1)^N (\hat{U}\tilde{\psi}, \tilde{\psi}) \end{aligned}$$

Das bedeutet: $\hat{U}(\Theta)\tilde{\psi}$ ist zu $\tilde{\psi}$ orthogonal, falls N ungerade, gehört aber zum selben Eigenwert E . 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.