Kapitel 10

Zeitentwicklung und Symmetrien

10.1 Zeitliche Entwicklung von Zuständen und Operatoren

Zeitunabhängige Operatoren
Wir betrachten zunächst wieder 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

$$\boxed{i\hbar\partial_t\psi(\vec{x},t) \;=\; \mathbf{H}\psi(\vec{x},t)\;, \qquad \mathbf{H} \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V(\vec{x})\;\;.}$$

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

Zeitabhängige Operatoren
Es sei $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\vec{\mathbf{P}}, \vec{\mathbf{Q}}, t)$ ein Operator, der von $\vec{\mathbf{P}}$, $\vec{\mathbf{Q}}$ und explizit von der Zeit t abhängen kann, z.B.

$$\mathbf{A} \;=\; \vec{\mathbf{Q}}_0 + \frac{1}{m}\vec{\mathbf{P}}\cdot t\;.$$

Erwartungswerte
Für den zeitabhängigen Erwartungswert $<\mathbf{A}>_\psi(t) \equiv <\psi(t)|\mathbf{A}|\psi(t)>$ führt die Schrödingergleichung zu

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

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

$$\boxed{\frac{d}{dt}<\mathbf{A}>_\psi(t) \;=\; \frac{i}{\hbar}<\psi|\left[\mathbf{H},\mathbf{A}\right]|\psi> + <\partial_t\mathbf{A}>_\psi\;.}$$

Beispiel

Es sei $\mathbf{A} = \vec{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i}\text{grad}$, 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

$$
\boxed{\frac{d}{dt} < \vec{\mathbf{P}} >_\psi \;=\; - < \text{grad}V >_\psi ,}
$$

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

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

$$
i\hbar\partial_t\psi(\vec{x},t) \;=\; \mathbf{H}\psi(\vec{x},t)\ , \qquad \psi(\vec{x},t=0) \equiv \psi_0(\vec{x}) = u_0(\vec{x})
$$

hat die (formale) Lösung

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

denn

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

Die Transformation

$$
\boxed{
\begin{aligned}
\psi(\vec{x},0) \;=\; u_0(\vec{x}) \quad \to \quad \psi(\vec{x},t) &= U(-t)\,u_0(\vec{x})\ , \\
U(t) &= e^{i\mathbf{H}t/\hbar}\ ,
\end{aligned}
}
$$

definiert den *Zeitentwicklungsoperator* $U(t)$.

Unitarität

Das Skalarprodukt

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

bleibt unter der Zeitentwicklung erhalten und somit auch die Norm. $U(t)$ ist somit nach Kap. 4.2.2 *unitär*:

$$\boxed{U^+(t)\,U(t) \;=\; U(t)\,U^+(t) \;=\; 1\;.}$$

Zeitentwicklung von Operatoren

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

$$\boxed{\begin{aligned} < \mathbf{A} >_\psi (t) \;&=\; < \psi(t)|\mathbf{A}|\psi(t) > \\ &=\; < \psi(0)|e^{+\frac{i}{\hbar}t\mathbf{H}}\,\mathbf{A}\,e^{-\frac{i}{\hbar}t\mathbf{H}}|\psi(0) > \quad : \end{aligned}}$$

Dieser Ausdruck legt es nahe, zeitabhängige Operatoren

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

zu definieren.

Bewegungsgleichung von Operatoren

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

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

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.

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

$$< \psi(t)|\mathbf{A}|\psi(t) > = < \psi(0)|\tilde{\mathbf{A}}(t)|\psi(0) >$$

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

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

Es gilt

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

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

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

also

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

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

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

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

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

die klassische Lösung des harmonischen Oszillators, welche wir auch schon mit Hilfe der kohärenten Zustände, siehe Kap. 4.3 , hergeleitet hatten.

Konstanten der Bewegung

Aus der klassichen 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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\boxed{\widehat{\mathbf{A}}(t) \;=\; e^{i\mathbf{H}_0 t/\hbar}\, \mathbf{A}\, e^{-i\mathbf{H}_0 t/\hbar} \quad .}$$

Die Erwartungswerte bleiben nach Konstruktion invariant:

$$\boxed{< \widehat{\psi}(t) | \widehat{\mathbf{A}}(t) | \widehat{\psi}(t) > \,=\, < \psi(t) | \mathbf{A} | \psi(t) > \,=\, < \psi_0 | \tilde{\mathbf{A}}(t) | \psi_0 > \quad .}$$

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

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

Das Wechselwirkungsbild spielt eine wichtige Rolle in der zeitabhängigen Störungstheorie.

10.2 Translationen, Drehungen und Galilei–Invarianz

10.2.1 Räumliche Translationen

Analog zu den gerade diskutierten zeitlichen Translationen

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

kann man die räumlichen Translationen $\vec{x} \to \vec{x} + \vec{a}$ behandeln: $u(\vec{x})$ sei beliebig oft stetig differenzierbar und falle für große $\|\vec{x}\|$ genügend stark ab. Dann gilt für $\vec{\mathbf{P}} = \vec{\nabla}$

$$\begin{aligned} U(\vec{a})\; u(\vec{x}) &= e^{i\,\vec{a}\cdot\vec{\mathbf{P}}/\hbar}\; u(\vec{x}) \;=\; e^{\vec{a}\cdot\vec{\nabla}}\; u(\vec{x}) \\ &= \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{a_1^{n_1} a_2^{n_2} a_3^{n_3}}{n_1! n_2! n_3!}\, \partial_1^{n_1} \partial_2^{n_2} \partial_3^{n_3}\; u(\vec{x}) \\ &= u(\vec{x} + \vec{a})\, . \end{aligned}$$

Da

$$\begin{aligned}\int d^3\vec{x}\, u^*(\vec{x}-\vec{a})u(\vec{x}-\vec{a}) &= \int d^3\vec{x}\, u^*(\vec{x}+\vec{a})u(\vec{x}+\vec{a}) \\ &= \int d^3\vec{x}\, u^*(\vec{x})u(\vec{x}) \ ,\end{aligned}$$

ist somit

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

eine unitäre Transformation.

N-Teilchen Wellenfunktion

Bei N Teilchen hat der Gesamtimpuls-Operator die Form

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

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

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

Gesamtimpuls-Erhaltung

Es sei nun

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

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

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

daß

$$\boxed{\mathbf{H}U(-\vec{a})\, u(\vec{x}_1,\ldots,\vec{x}_N) \;=\; E\, U(-\vec{a})\, u(\vec{x}_1,\ldots,\vec{x}_N)\ .}$$

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

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

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

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

Der Hamilton-Operator vertauscht also mit allen Translationen.

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 damit

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

Der Gesamt–Impuls $\vec{\mathbf{P}}$ kommutiert also mit $\mathbf{H}$ und ist demnach eine Konstante der Bewegung (Erhaltungssatz).

10.2.2 Drehungen

Erzeugende für Drehungen
Hier sind die Drehimpuls–Operatoren $\mathbf{L}_j = \frac{\hbar}{i}\epsilon_{jkl}x_k\partial_l$ die *Erzeugenden* von endlichen Drehungen, s. auch Kap. 5.1.3.

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

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

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

$$\boxed{\begin{aligned} e^{i\vec{\mathbf{L}}\cdot\vec{n}\,\varphi/\hbar}\,\mathbf{H}\,e^{-i\vec{\mathbf{L}}\cdot\vec{n}\,\varphi/\hbar} \;&=\; \mathbf{H}\;, \qquad \text{oder} \\ [\mathbf{H},\vec{n}\cdot\vec{\mathbf{L}}] \;&=\; 0\;, \qquad [\mathbf{H},\mathbf{L}_j] \;=\; 0\;. \end{aligned}}$$

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

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

Ersetzt man $\vec{n}\cdot\vec{\mathbf{L}}$ in $U(\vec{n},\varphi)$ durch $\vec{n}\cdot\vec{\mathbf{S}}$, $\vec{\mathbf{S}}=\frac{\hbar}{2}(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)$, so erhält man

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

wobei wir

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

verwendent haben. Also gilt

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

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

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

also

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

Da außerdem

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

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

Allgemeine Quantisierungsachse

In Kap. 8.2.1 kam die Matrix

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

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 haher auch bei SU(2) Drehnungen eine zentrale Rolle.

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

$$\boxed{\underline{x}^+ = \underline{x}\,, \qquad \det \underline{x} = -\vec{x}^2, \qquad \mathrm{Sp}\ \underline{x} = 0\,.}$$

SU(2) Drehungen

Die transformierte Matrix $\underline{x}_S$

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

ist wiederum hermitisch und hat die Spur 0:

$$\begin{aligned} \left(U_S\,\underline{x}\,U_S^+\right)^+ &= U_S^{++}\,\underline{x}^+\,U_S^+ = U_S\,\underline{x}\,U_S^+ \ , \\ \mathrm{Sp}\ (U_S\underline{x}\,U_S^+) &= \mathrm{Sp}\ (U_S^+U_S\,\underline{x}\,) = \mathrm{Sp}\ (\underline{x})\ . \end{aligned}$$

Es gibt also ein $\vec{x}_S$, so daß

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

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

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

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

Darstellungen

> 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.

Drehung um 4π

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

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

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

$$\begin{aligned}
U_S\,\underline{x}\,U_S^+ &= \begin{pmatrix} x_3 & (x_1-ix_2)e^{i\varphi} \\ (x_1+ix_2)e^{-i\varphi} & -x_3 \end{pmatrix} \quad , \quad \text{so daß} \\
(x_1)_S &= x_1\cos\varphi + x_2\sin\varphi \\
(x_2)_S &= -x_1\sin\varphi + x_2\cos\varphi \ , \\
(x_3)_S &= x_3 \ .
\end{aligned}$$

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

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

auszurechnen.

Zweifache Überlagerung der Drehgruppe

Den Matrizen U_S und $-U_S$ wird dieselbe Drehmatrix $R_{\vec{n}}(\varphi)$ zugeordnet,

$$U_S(\vec{n},\varphi)\,\underline{x}\,U_S^+(\vec{n},\varphi) \ = \ \underline{x}_S, \qquad \Leftrightarrow \qquad \pm U_S \ \leftrightarrow \ R_{\vec{n}}(\varphi) \ .$$

Für die Drehungen um die z-Achse hatten wir

$$R_{\vec{n}}(\varphi=2\pi) = \mathbf{1}_3 = R_{\vec{n}}(\varphi=4\pi), \qquad U_S(\vec{n},4\pi) = \mathbf{1}_2, \qquad \text{aber} \qquad U_S(\vec{n},2\pi) = -\mathbf{1}_2 \ .$$

Topologisch bildet die Gruppe SU(2) eine zweifache Überlagerung der Drehgruppe.

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 $\vec{x}\to\vec{x}_S = R_{\vec{n}}(\varphi)\vec{x}$ folgendermaßen

$$\boxed{\tilde{\psi}(\vec{x},t) \qquad \to \qquad \tilde{\psi}_S(\vec{x}_S) \ = \ U_S(\vec{n},\varphi)\tilde{\psi}\,.}$$

10.3 Zeitumkehrinvarianz

Klassisch

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

$$\boxed{\begin{aligned}
\Theta: \ \vec{x}(t) \ &\to \ \vec{x}^{\,\Theta}(t) = \vec{x}(-t) \ , \quad t\to -t \ , \\
\vec{p}(t) \ &\to \ \vec{p}^{\,\Theta}(t) = m\frac{d}{dt}\vec{x}^{\,\Theta}(t) = -\vec{p}(-t)
\end{aligned}}$$

definiert. Die durch $\vec{x}^{\,\Theta}$, $\vec{p}^{\,\Theta}$ 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

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

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 is Θ ist eine *antilineare* Transformation,

$$\boxed{(\lambda_1\mathbf{A} \,+\, \lambda_2\mathbf{B})^{\Theta} \;=\; \lambda_1^*\mathbf{A}^{\Theta} \,+\, \lambda_2^*\mathbf{B}^{\Theta}\;, \qquad (\mathbf{A}\mathbf{B})^{\Theta} \;=\; \mathbf{A}^{\Theta}\mathbf{B}^{\Theta}\;,}$$

Zeitentwicklungsoperator

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

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

Spinlose Teilchen

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

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

Für ein Teilchen ohne Spin definiert man

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

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 $\Re e\psi$ und $\Im m\psi$ seperat Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind.

Äussere Felder

Ein elektrisches Potential $\varphi(\vec{x})$ ist zeitumkehrinvariant (elektrische Felder werden von Ladungen erzeugt), ein magnetisches Feld mit Vektor-Potential $\vec{A}$ ist dagegen nicht zeitumkehrinvariant (magnetische Felder werden durch bewegte Ladungen erzeugt). Der Hamilton-Operator ist

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

Damit ist

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

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 magntischen Moment und wird daher bei der Zeitumkehr invertiert, die beiden Komponenten des Spinors

$$\widetilde{\psi}(\vec{x},t) \;=\; \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x},t) \\ \psi_-(\vec{x},t) \end{pmatrix}$$

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

$$\begin{aligned}
\sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & <\sigma_1> &= \psi_+^*\psi_- + \psi_-^*\psi_+ \;, \\
\sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, & <\sigma_2> &= -i\left(\psi_+^*\psi_- - \psi_-^*\psi_+\right) \;, \\
\sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & <\sigma_3> &= \psi_+^*\psi_+ - \psi_-^*\psi_- \;.
\end{aligned}$$

Man sieht leicht, dass die Foderung $<\sigma_j>_{\Theta} = -<\sigma_j>$ für alle drei Komponenten $j = 1,2,3$ erfüllt ist falls

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

Zeitumkehroperator für Teilchen mit Spin-$1/2$

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

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

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

$$\boxed{\widehat{U}^2(\Theta) \;=\; \mathbf{K}\otimes\sigma_2\cdot\mathbf{K}\otimes\sigma_2 \;=\; -\sigma_2^2 \;=\; -\mathbf{1}\ .}$$

Für N Elektronen bekommt man analog

$$\boxed{\widehat{U}(\Theta) \;=\; \mathbf{K}\bigotimes_{n=1}^{N}\sigma_2^{(n)}\ , \qquad \widehat{U}(\Theta)^2 \;=\; (-1)^N\mathbf{1}\ .}$$

Kramers Entartung

Diese Relation hat folgende wichtige Anwendung:

> Der Hamilton–Operator $\mathbf{H}$ sei zeitumkehr-invariant,
>
> $$\widehat{U}(\Theta)\mathbf{H}\widehat{U}(\Theta)^{-1} \;=\; \mathbf{H}\ ,$$
>
> und habe den Eigenwert E, $\mathbf{H}\widetilde{\psi}(\vec{x}_1,\ldots,\vec{x}_N) = E\widetilde{\psi}$. Dann sind $\widetilde{\psi}$ und $\widehat{U}(\Theta)\widetilde{\psi}$ für ungerades N linear unabhängig und E ist mindestens 2–fach entartet (*Kramers Entartung*).

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

$$\mathbf{H}\left(\widehat{U}(\Theta)\widetilde{\psi}\right) \;=\; \widehat{U}(\Theta)\,\left(\mathbf{H}\widetilde{\psi}\right) \;=\; E\,\widehat{U}(\Theta)\,\widetilde{\psi}\ .$$

Für die lineare Unabhängigkeit berechnen wir

$$\begin{aligned}
\left(\widehat{U}(\Theta)\widetilde{\psi},\widehat{U}(\Theta)\widetilde{\psi}\right) &= \left(\widetilde{\psi},\widetilde{\psi}\right) \;=\; 1\ ,\\
\left(\widehat{U}\widetilde{\psi},\widetilde{\psi}\right) &= \left(\widehat{U}^2\widetilde{\psi},\widehat{U}\widetilde{\psi}\right)^* \;=\; (-1)^N\left(\widetilde{\psi},\widehat{U}\widetilde{\psi}\right)^*\\
&= (-1)^N\left(\widehat{U}\widetilde{\psi},\widetilde{\psi}r\right)\ .
\end{aligned}$$

Das bedeutet: $\widehat{U}(\Theta)\widetilde{\psi}$ ist zu $\widetilde{\psi}$ 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!