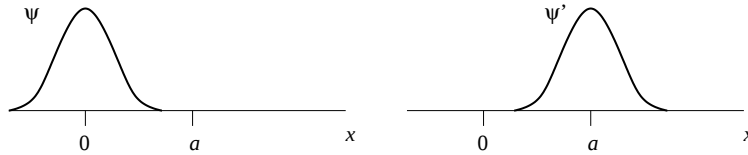


12 Translation und Rotation

12.1 Translation (Verschiebung)

Verschiebung des quantenmechanischen Systems um eine Strecke $\mathbf{a}$, $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle$ (oder äquivalent: Verschiebung des Koordinatenursprungs über eine Strecke $-\mathbf{a}$):

$$\{ |\mathbf{r}\rangle \rightarrow |\mathbf{r}'\rangle = |\mathcal{T}_{\mathbf{a}}\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle,$$



Sei nun $|\psi\rangle$ ein beliebiger Zustand, und sei $|\psi'\rangle$ dieser Zustand nach Verschiebung des ganzen Systems um die Strecke $\mathbf{a}$. Man findet den verschobenen Zustand $|\psi'\rangle$ dadurch, dass man den Zustand $|\psi\rangle$ in der Ortsbasis entwickelt,

$$|\psi\rangle = \int d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle,$$

und die Basisvektoren $|\mathbf{r}\rangle$ verschiebt. Nach der Verschiebung sieht der Zustand dann so aus:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \int d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle = \int d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}) |\mathbf{r}\rangle.$$

Hieraus folgt, dass die Wirkung einer Verschiebung auf eine Wellenfunktion durch die Gleichung

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathcal{T}_{\mathbf{a}}^{-1}\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a})$$

gegeben wird.

Da die Beziehung zwischen dem Zustand $|\psi\rangle$ und dem verschobenen Zustand $|\psi'\rangle$ linear ist, muss es einen linearen Operator $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ geben, sodass

$$|\psi'\rangle = \hat{T}_{\mathbf{a}}|\psi\rangle, \quad \hat{T}_{\mathbf{a}}: \text{Translationsoperator.}$$

Wir werden nun beweisen, dass

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} = e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar}.$$

Bemerkung: Der Operator $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ ist unitär:

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}^\dagger = \hat{T}_{\mathbf{a}}^{-1} = \hat{T}_{-\mathbf{a}}.$$

Zwei Beweise:

1. Mit Zustandsfunktion, durch die Potenzreihe der Exponentialfunktion und die Taylor-Entwicklung:

$$\begin{aligned}\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) &= e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar}\psi(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\mathbf{a} \cdot \nabla)^n \psi(\mathbf{r}) \\ &= \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}).\end{aligned}$$

2. Mit Eigenzuständen $|\mathbf{r}\rangle$ des Ortsoperators $\hat{\mathbf{r}}$: $|\mathbf{r}\rangle$ ist Ortseigenzustand zum Eigenwert $\mathbf{r}$. Wir beweisen nun, dass $\hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle$, d.h. $\hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{r}\rangle$ ist Ortseigenzustand zum Eigenwert $\mathbf{r} + \mathbf{a}$

- Aus $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ folgt, dass $[\hat{x}, \hat{p}_x^n] = in\hbar\hat{p}_x^{n-1}$, sodass $[\hat{x}, e^{-ia_x\hat{p}_x/\hbar}] = a_x e^{-ia_x\hat{p}_x/\hbar}$. Ebenso findet man, dass (mit $\hat{\mathbf{r}}$ anstatt $\hat{x}$):

$$[\hat{\mathbf{r}}, e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar}] = \mathbf{a} e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar}.$$

Hieraus folgt dann, dass $[\hat{\mathbf{r}}, \hat{T}_{\mathbf{a}}] = \mathbf{a}\hat{T}_{\mathbf{a}}$. Nun:

$$\hat{\mathbf{r}} \hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{r}\rangle = (\hat{T}_{\mathbf{a}} \hat{\mathbf{r}} + [\mathbf{r}, \hat{T}_{\mathbf{a}}])|\mathbf{r}\rangle = (\hat{T}_{\mathbf{a}} \hat{\mathbf{r}} + \hat{T}_{\mathbf{a}}\mathbf{a})|\mathbf{r}\rangle = (\mathbf{r} + \mathbf{a}) \hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{r}\rangle.$$

Wichtige Bemerkung: Manchmal wird der quantenmechanische Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}}$ durch die Beziehung

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} \equiv e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar}$$

definiert, d.h. $\hat{\mathbf{p}}$ ist der “Erzeuger” der Translationen. Aus dieser Definition kann man dann herleiten, dass

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

und dass $\hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r})$. (Wir haben letztere Gleichung als Definition des Impulsoperators verwendet.)

Erläuterung: Wir beweisen zuerst, dass aus $\hat{T}_{\mathbf{a}} \equiv e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar}$ folgt, dass $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$. Hierzu bemerken wir, dass aus $\hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle$ folgt, dass $\hat{\mathbf{r}} \hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{r}\rangle = \hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle = (\mathbf{r} + \mathbf{a})|\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle = (\mathbf{r} + \mathbf{a})\hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{r}\rangle$. Ganz allgemein gilt auch, dass

$$\hat{\mathbf{r}} \hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{r}\rangle = (\hat{T}_{\mathbf{a}} \hat{\mathbf{r}} + [\hat{\mathbf{r}}, \hat{T}_{\mathbf{a}}])|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r} \hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{r}\rangle + [\hat{\mathbf{r}}, \hat{T}_{\mathbf{a}}]|\mathbf{r}\rangle.$$

Kombinieren gibt dann:

$$[\hat{\mathbf{r}}, \hat{T}_{\mathbf{a}}]|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{a}\hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{r}\rangle.$$

Da dies für beliebige Basisvektoren $|\mathbf{r}\rangle$ gilt, muss

$$[\hat{\mathbf{r}}, \hat{T}_{\mathbf{a}}] = \mathbf{a}\hat{T}_{\mathbf{a}}$$

auch als Operator-Identität gültig sein. Wenn man in dieser Gleichung $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ in $\mathbf{a}$ entwickelt und den Beitrag der 1. Ordnung betrachtet, findet man, dass

$$-\frac{i}{\hbar}[\hat{\mathbf{r}}, \mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}] = \mathbf{a}.$$

Wähle $\mathbf{a} = a\mathbf{e}_i$, $i = x, y, z$, und man findet $[\hat{x}, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$.

Wir beweisen nun, dass $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$: Aus $\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a})$ folgt, nach Entwickeln des Exponenten $\hat{T}_{\mathbf{a}} = e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}/\hbar}$ und nach einer Taylor-Entwicklung von $\psi(\mathbf{r} - \mathbf{a})$, dass

$$(1 - \frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\mathbf{p} + \dots)\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) - \mathbf{a}\cdot\nabla\psi(\mathbf{r}) + \dots$$

Da diese Gleichung für beliebige Verschiebung $\mathbf{a}$ erfüllt sein muss, folgt dass $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$.

Die Definition des Impulses durch $\hat{T}_{\mathbf{a}} \equiv e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}/\hbar}$ gilt auch dann, wenn die Zustände $|\psi\rangle$ nicht durch eine Funktion $\psi(\mathbf{r})$ dargestellt werden! (Dies ist z.B. der Fall in Vielteilchensysteme.)

12.2 Rotation

Drehung des quantenmechanischen Systems um einen Winkel η um eine Achse $\mathbf{e}$ (oder äquivalent: Drehung des Koordinatensystems um $-\eta$):

$$|r\rangle \rightarrow |\mathbf{r}'\rangle = |\mathcal{R}_{\eta}\mathbf{r}\rangle$$

wobei $\mathcal{R}_{\eta}$ der Rotationsmatrix ist.

Beispiel: Eine Rotation um einen Winkel η um die z -Achse wird durch die Rotationsmatrix

$$\mathcal{R}_{\eta} = \begin{pmatrix} \cos \eta & -\sin \eta & 0 \\ \sin \eta & \cos \eta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

beschrieben.

Eine Rotation bildet einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ auf einen Zustand $|\psi'\rangle$ ab,

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle.$$

Die Wellenfunktion des Zustandes $|\psi'\rangle$ ist dann

$$\psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathcal{R}_\eta^{-1}\mathbf{r}).$$

Die Beziehung zwischen $|\psi\rangle$ und $|\psi'\rangle$ ist linear: Rotationsoperator $|\psi\rangle = \hat{R}_\eta|\psi'\rangle$. Es gilt:

$$\hat{R}_\eta = e^{-i\eta\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{l}}/\hbar},$$

wobei $\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ der Drehimpuls-Operator ist.

Beweis: Man wählt Koordinaten so, dass $\mathbf{e} = \mathbf{e}_z$. Dann gilt

$$\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{l}} = \hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

In Kugelkoordinaten, mit Potenzreihe des Exponenten und Taylor-Entwicklung:

$$\hat{R}_\eta \psi(r, \theta, \phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\eta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^n \psi(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi - \eta).$$

Nun kehren wir die Theorie um und definieren den Drehimpuls-Operator $\hat{\mathbf{j}}$ durch die Beziehung

$$\hat{R}_\eta = e^{-i\eta\mathbf{e}\hat{\mathbf{j}}/\hbar}.$$

Für einen “Massenpunkt” in der Schrödingertheorie gilt

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}.$$

Wir benützen das Symbol “ $\mathbf{j}$ ” in der allgemeinen Beziehung zwischen $\hat{R}_\eta$ und den Drehimpuls-Operator, weil $\mathbf{j}$ und $\mathbf{l}$ im allgemeinen Fall nicht die gleichen Operatoren sind. Diese Definition des Drehimpulses ist allgemein gültig, auch für quantenmechanische Systeme ohne klassisches Äquivalent oder für Vielteilchensysteme.

Was kann man aus dieser Definition herleiten?

- Rotationen sind nicht vertauschbar. In drei Dimensionen gilt für eine Rotation über Winkel η um Achse $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$:

$$\begin{aligned} R_{\eta,x} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \eta & -\sin \eta \\ 0 & \sin \eta & \cos \eta \end{pmatrix}, \\ R_{\eta,y} &= \begin{pmatrix} \cos \eta & 0 & \sin \eta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \eta & 0 & \cos \eta \end{pmatrix}, \\ R_{\eta,z} &= \begin{pmatrix} \cos \eta & -\sin \eta & 0 \\ \sin \eta & \cos \eta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Für Rotationswinkel $\eta \ll 1$ gilt:

$$R_{\eta,y}^{-1} R_{\eta,x}^{-1} R_{\eta,y} R_{\eta,x} = R_{-\eta^2,z} + O(\eta^3)$$

und zyklisch weiter. Hieraus folgt, dass

$$e^{i\eta\hat{j}_y/\hbar} e^{i\eta\hat{j}_x/\hbar} e^{-i\eta\hat{j}_y/\hbar} e^{-i\eta\hat{j}_x/\hbar} = e^{i\eta^2\hat{j}_z/\hbar},$$

bis auf Korrekturen der Ordnung η^3 . Entwickeln in η gibt

$$\hat{1} + \frac{\eta^2}{\hbar^2} [\hat{j}_x, \hat{j}_y] = \hat{1} + i\frac{\eta^2}{\hbar} \hat{j}_z,$$

sodass

$$[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = i\hbar\hat{j}_z$$

und zyklisch weiter. Zusammenfassend: Mit der Definition $\hat{R}_\eta = e^{-i\eta\hat{\mathbf{j}}/\hbar}$ folgen die Kommutationsrelationen des Drehimpulsoperators $\hat{\mathbf{j}}$ aus den Eigenschaften der Drehungen!

Bemerkung: Der allgemeine Drehimpuls $\hat{\mathbf{j}}$ hat die gleichen Kommutatoren wie der Drehimpuls $\hat{\mathbf{l}}$ in der Schrödingertheorie.

- Spektrum. Nur eine Komponente von $\hat{\mathbf{j}}$ — wir nehmen $\hat{j}_z$ — und $\hat{\mathbf{j}}^2$ sind vertauschbar. Daher können wir gemeinsame Eigenzustände von $\hat{\mathbf{j}}^2$ und $\hat{j}_z$ bestimmen.

Eigenwerte von $\hat{j}_z$ werden $m\hbar$ geschrieben, Eigenwerte von $\hat{\mathbf{j}}^2$ werden $\hbar^2 j(j+1)$ geschrieben:

$$\begin{aligned}\hat{j}_z|jm\rangle &= \hbar m|jm\rangle, \\ \hat{\mathbf{j}}^2|jm\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle.\end{aligned}$$

Dann gilt:

1. Die möglichen j -Werte sind $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$; nicht alle j -Werte müssen auftreten.
2. Die möglichen m -Werte (zu einem j -Wert) sind $-j, -j+1, \dots, j-1, j$.
3. Die Entartung aller m -Werte (zu einem bestimmten j -Wert) ist gleich. Eigenzustände mit dem gleichen j -Wert aber unterschiedlichen m -Werten können durch wiederholte Anwendung der Leiteroperatoren $\hat{j}_\pm = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y$ erzeugt werden,

$$\begin{aligned}\hat{j}_+|jm\rangle &= \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j, m+1\rangle, \\ \hat{j}_-|jm\rangle &= \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle.\end{aligned}$$

Beweis: Wie im Fall vom Bahn-Drehimpuls, beweist man, dass $-j \leq m \leq j$, und man beweist die Eigenschaften der Leiteroperatoren $\hat{j}_{\pm}$. (In diesen Beweisen wurden nur die Kommutatoren der Drehimpulskomponenten $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ und $\hat{l}_z$ genutzt. Daher können diese Beweise direkt auf den allgemeinen Fall angewandt werden.) Im Unterschied zu dem Fall vom Bahn-Drehimpuls, muss nicht gelten, dass m ganzzahlig ist, da dies mithilfe von Koordinaten bewiesen wurde. Stattdessen geht man wie folgt vor: Sei (j, m) ein Eigenwertpaar zu $(\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_z)$ mit $-j \leq m \leq j$. Damit wiederholte Anwendung von $\hat{j}_+$ nicht zu beliebig hohem m führen kann, muss $j - m$ ganzzahlig sein. Ebenso, damit wiederholte Anwendung von $\hat{j}_-$ nicht zu beliebig negativem m führen kann, muss $j + m$ auch ganzzahlig sein. Hieraus folgt, dass $2j = (j + m) + (j - m)$ ganzzahlig ist, d.h., j ist ganzzahlig, oder j ist ganzzahlig $+1/2$. Wenn j ganzzahlig ist, ist m auch ganzzahlig, und wenn j ganzzahlig $+1/2$ ist, dann ist m auch ganzzahlig $+1/2$.

Wichtige Bemerkung: Es wurde nicht bewiesen, dass alle mögliche j -Werte auftreten. Es wurde nur bewiesen, dass die einzig möglichen j -Werte ganze Zahlen oder ganze Zahlen $+1/2$ sind.

Für einen Massenpunkt (=in der Schrödingertheorie) gilt $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}}$, und nur der Fall j und m beide ganzzahlig tritt auf. Aufgrund der allgemeinen Definition des Drehimpulses kann man j ganzzahlig $+1/2$ im Allgemeinen jedoch nicht ausschließen.