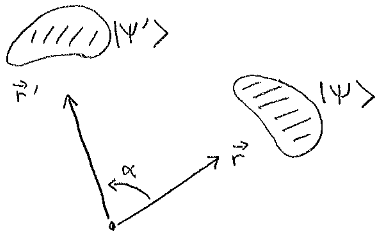
5. Kugelsymmetrie und Drehimpuls

Wir haben bis jetzt nur eindimensionale Beispiele betrachtet. Der physikalische Raum ist aber dreidimensional. Falls es nur Zentralkräfte gibt, ist das System kugelsymmetrisch, was zu weitreichenden Konsequenzen führt.



Ursprünglich: $\qquad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$.

Nach einer Drehung bzw. Rotation R: $\qquad |\psi'\rangle =: \hat{U}(R) |\psi\rangle$.

Weil $\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$ gilt, ist $\hat{U}(R)$ unitär, d.h. $\hat{U}^+(R)\hat{U}(R) = \hat{\mathbb{1}}$.

Das System sei „symmetrisch", falls $|\psi'\rangle$ und $|\psi\rangle$ dieselbe Gleichung erfüllen:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'\rangle = \hat{H} |\psi'\rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{U}^{-1}(R) \hat{H} \hat{U}(R) \; |\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \hat{H} = \hat{U}^{-1}(R) \hat{H} \hat{U}(R) \; .$$

Bei „kleinen" Drehungen: $\begin{cases} \hat{U}(R) \approx \hat{\mathbb{1}} + i\varepsilon\hat{G} \\ \hat{U}^{-1}(R) \approx \hat{\mathbb{1}} - i\varepsilon\hat{G} \end{cases}$, $|\varepsilon| \ll 1$; $\hat{G}$ = „Generator".

$\hat{U}$ unitär $\Rightarrow \hat{U}^+\hat{U} = \hat{\mathbb{1}} \Rightarrow \hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$ & $\hat{U}^+(R) \approx \hat{\mathbb{1}} - i\varepsilon\hat{G}^+ \Rightarrow \hat{G}^+ = \hat{G} \Rightarrow \hat{G}$ ist hermitesch!

Es folgt: $\qquad \hat{U}^{-1}(R) \hat{H} \hat{U}(R) \approx \hat{H} - i\varepsilon [\hat{G}, \hat{H}] \stackrel{!}{=} \hat{H}$

$$\Rightarrow \quad \underline{\underline{[\hat{G}, \hat{H}] = \hat{0}}} \; .$$

Seite 44 $\Rightarrow$ $\hat{G}$ und $\hat{H}$ haben gleichzeitige Eigenzustände. Die Generatoren von Symmetrien können uns also helfen, die Eigenzustände des Hamilton-Operators zu bestimmen.

5.1 Gruppen und Generatoren [Fliessbach 23, Griffiths 4.3]

Die allgemeine mathematische Sprache für die Beschreibung von Symmetrien ist die Gruppentheorie.

Gruppe $G :=$ Menge von Elementen $g_1, g_2, \ldots$ mit einer Verknüpfung "$\cdot$", so dass Folgendes gilt:

(i) $g_1, g_2 \in G \Rightarrow g_1 \cdot g_2 \in G$

(ii) $g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3) = (g_1 \cdot g_2) \cdot g_3$ [Assoziativität]

(iii) $e \cdot g = g \cdot e = g$ [$\exists$ Einselement]

(iv) $g^{-1} \cdot g = g \cdot g^{-1} = e$ [$\exists$ Inverse]

Was hat dies mit Drehungen zu tun?

Eine allgemeine Drehung kann durch die Drehachse $\vec{n}$ $(|\vec{n}| = 1)$ und den Drehwinkel α parametrisiert werden:

$$\vec{r}\,' = R(\vec{n}, \alpha)\, \vec{r} \,,$$

$$R(\vec{n}, \alpha)\, \vec{r} = \cos(\alpha)\, \vec{r} + [1 - \cos(\alpha)]\, (\vec{n} \cdot \vec{r})\, \vec{n} + \sin(\alpha)\, \vec{n} \times \vec{r} \,.$$

Aufgabe 3.1

Die Drehungen bilden eine Gruppe, weil:

(i) $R(\vec{n}_2, \alpha_2)\, R(\vec{n}_1, \alpha_1)$ auch eine Drehung ist

(ii) „trivial"

(iii) $e = R(\vec{n}, 0)$

(iv) $R^{-1}(\vec{n}, \alpha) = R(\vec{n}, -\alpha)$.

(Die $R(\vec{n}, \alpha)$ können als 3×3-Matrizen dargestellt werden. Weil $|R\vec{r}|^2 = |\vec{r}|^2$ gilt, sind R orthogonal: $R^T R = \mathbb{1}$. Ausserdem gilt $\det R = 1$ (Übung). Diese Gruppe heisst $SO(3)$.)

„Spezial", wegen $\det = 1$

„orthogonal"

Betrachten wir jetzt <u>infinitesimale</u> Drehungen: $|\alpha| \ll 1$. Dann gilt:

$$\vec{r}\,' \approx \vec{r} + \alpha \vec{n} \times \vec{r} + O(\alpha^2)$$

$$r_i' \approx r_i + \alpha \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} n_j r_k + O(\alpha^2) \qquad ; \quad \varepsilon_{ijk} = \text{Levi-Civita-Symbol}$$

$$= \sum_k \left[\delta_{ik} - i\alpha \sum_j n_j (+i\varepsilon_{ijk}) \right] r_k + O(\alpha^2)$$

Wir definieren die Matrizen $(\Sigma_j)_{ik} := i\,\varepsilon_{ijk}$.

Indizes

Imaginäreinheit

D.h. $\Sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$, $\Sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\Sigma_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$.

<u>Bemerkungen:</u>

* $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$ sind hermitesch: $\Sigma_j^+ = \Sigma_j$.

* Die Σ_j genügen der „Lie-Algebra" von $SO(3)$ (Aufgabe 3.2):

$$\begin{aligned} [\Sigma_1, \Sigma_2] &= i\Sigma_3 \\ [\Sigma_2, \Sigma_3] &= i\Sigma_1 \\ [\Sigma_3, \Sigma_1] &= i\Sigma_2 \end{aligned} \quad \Longleftrightarrow \quad [\Sigma_j, \Sigma_k] = i \sum_{m=1}^{3} \varepsilon_{jkm} \Sigma_m$$

* Die Drehmatrix lautet

$$R(\vec{n}, \alpha) = \mathbb{1} - i\alpha \sum_j n_j \Sigma_j + O(\alpha^2)$$
$$=: \mathbb{1} - i\alpha\, \vec{n} \cdot \vec{\Sigma} + O(\alpha^2).$$

* Es kann sogar gezeigt werden (Aufgabe 3.2), dass Folgendes gilt:

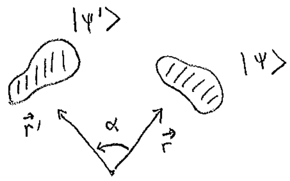
$$R(\vec{n}, \alpha) \overset{!}{=} \exp\left(-i\alpha\, \vec{n} \cdot \vec{\Sigma}\right).$$

D.h., die Generatoren Σ_j „erzeugen" nicht nur „kleine" Drehungen, sondern auch die „grossen"!

(Dieses Ergebnis gilt für eine grosse Klasse von Gruppen, nicht nur für $SO(3)$.)

Das war für Koordinaten; was passiert mit dem Zustand $|\psi\rangle$ bzw. der Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$? (vgl. Seite 61)

Nehmen wir an, wie bisher, dass $\psi(\vec{r})$ eine „Skalare" Funktion ist, d.h. $\psi(\vec{r}) \in \mathbb{C}$. Dann gilt:



$$\psi'(\vec{r}\,') = \psi(\vec{r})$$

$$\Leftrightarrow \quad \psi'(\vec{r}\,') = \psi(R(\vec{n},-\alpha)\vec{r}\,')$$

$$= \psi(\vec{r}\,' - \alpha\,\vec{n}\times\vec{r}\,') + O(\alpha^2)$$

$$= \psi(\vec{r}\,') - \alpha\,\vec{n}\times\vec{r}\,' \cdot \nabla_{\vec{r}\,'}\,\psi(\vec{r}\,') + O(\alpha^2) \quad =: \quad \hat{U}(R)\,\psi(\vec{r}\,')$$

Zur Erinnerung (Seite 45):

Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t;t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}\right) \approx \hat{\mathbb{1}} - \frac{i}{\hbar}\underbrace{(t-t_0)}_{\text{„Parameter"}}\underbrace{\hat{H}}_{\text{„Generator"}} + O(t-t_0)^2$.

Mit derselben Konvention:

$$\hat{U}(R) = \hat{\mathbb{1}} - \frac{i}{\hbar}\cdot\frac{\hbar}{i}\,\alpha\,\vec{n}\cdot\vec{r}\,'\times\nabla_{\vec{r}\,'} + O(\alpha^2)$$

$$= \hat{\mathbb{1}} - \frac{i}{\hbar}\sum_j \underbrace{\alpha n_j}_{\text{„Parameter"}}\,\underbrace{\left[\vec{r}\,'\times(-i\hbar\nabla_{\vec{r}\,'})\right]_j}_{\text{„Generatoren"}} + O(\alpha^2)\,.$$

Fazit: Drehungen werden vom „Bahndrehimpulsoperator"

$$\hat{\vec{L}} := \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$$

erzeugt. Die Komponenten $\hat{L}_i$ genügen der SO(3) Lie Algebra (mit zusätzlichem $\hbar$ wegen neuer Konvention)

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = \sum_{m=1}^{3} i\hbar\,\varepsilon_{jkm}\,\hat{L}_m \qquad \text{(Aufgabe 4.1)}$$

Eine grosse Drehung: $\hat{U}(R) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\alpha\,\vec{n}\cdot\hat{\vec{L}}\right)$.