Infinitesimale Drehungen im $\mathbb{R}^3$

- für Drehachse $\vec{n}$, $|\vec{n}|=1$ mit kleinem Drehwinkel $|\alpha| \ll 1$

gilt $\quad \vec{r}\,' \simeq \vec{r} + \alpha\, \vec{n} \times \vec{r} + O(\alpha^2)$ oder in Komponenten

($\cos\alpha = 1 - \frac{\alpha^2}{2} + \ldots$, $\sin\alpha = \alpha + \ldots$)

$r_i' \simeq r_i + \alpha\, \varepsilon_{ijk}\, n_j r_k + O(\alpha^2)$ mit Summationskonvention $j,k = 1,2,3$ für doppelt auftauchende Indizes.

$i^2 = -1$

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

Def Generatoren $\quad (\Sigma_j)_{\ell m} = i\, \varepsilon_{\ell j m} \quad$ für $j = 1,2,3$

d.h. die 3×3 Matrizen $\Sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$, $\Sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\Sigma_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ (s. Ü 10)

mit dem Levi-Civita Symbol (ε-Tensor) $\quad \varepsilon_{123} = 1$, $\varepsilon_{213} = -1$, und $\varepsilon_{ijk} = 0$ falls 2 oder mehr Indizes gleich. (und zyklischen Vertauschungen)

- wir haben die Drehgeneratoren in dieselbe Form wie auf der vorherigen Seite gebracht, damit gilt

  * $\Sigma_j = \Sigma_j^\dagger$ hermitesch für $j = 1,2,3$

  * die Σ_j erfüllen die Lie-Algebra von $SO(3)$ ($\to$ Ü 10)

$$[\Sigma_1, \Sigma_2] = i\Sigma_3, \quad [\Sigma_2, \Sigma_3] = i\Sigma_1, \quad [\Sigma_3, \Sigma_1] = i\Sigma_2$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{[\Sigma_k, \Sigma_\ell] = i\, \varepsilon_{k\ell m}\, \Sigma_m} \qquad SO(3)$$

$\Rightarrow$ Unsere Drehmatrix $R(\vec{n},\alpha)$ lautet damit $\quad \vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 \\ \Sigma_2 \\ \Sigma_3 \end{pmatrix}$,

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

*(Ü 10) für endliche Drehungen gilt dann $\boxed{R(\vec{n},\alpha) = \exp\left[-i\alpha\, \vec{n}\cdot\vec{\Sigma}\right]}$ daher der Name Generatoren.

$\to$ dies gilt auch für andere Gruppen (z.B. Drehungen im $\mathbb{R}^2$ mit $\sigma = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, 1 nur einen Generator für die Gruppe $SO(2)$; Lie Gruppen = diffbare Deformationen von $\mathbb{1}$)

– zurück zur Trafo q.m. Zustände $|\Psi\rangle$ bzw. der Wellenfunktion $\Psi(\vec r)$ im Ortsraum: betrachte skalare Wellenfkt. $\Psi(\vec r) \in \mathbb{C}$.

$\Rightarrow$ dann bedeutet die Invarianz von $\Psi(\vec r)$ unter Drehungen: $\Psi'(\vec r\,') = \Psi(\vec r)$:

$$\underline{\Psi'(\vec r\,')} = \Psi\big(\underbrace{R(\vec n, -\alpha)\,\vec r\,'}_{\vec r}\big) = \Psi\big(\vec r\,' - \alpha\,\vec n \times \vec r\,' + \mathcal{O}(\alpha^2)\big)$$

$$\text{Taylor} \cong \Psi(\vec r\,') - \alpha\,(\vec n \times \vec r\,')\cdot\nabla_{\vec r\,'}\Psi(\vec r\,') + \mathcal{O}(\alpha^2)$$

$$\equiv \underline{\hat U(R)\,\Psi(\vec r\,')}$$ Spatprodukt, zyklisch — mit $\hat U$ Darstellung der Rotation R auf Elementen des Hilbertraumes.

* zum Vergleich: für den Zeitentwicklungsoperator $\hat U(t,t_0)$ gilt für kleine Zeiten $(t-t_0) \ll 1$:

$$\underline{\hat U(t,t_0)} = \exp\left(-\tfrac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat H\right) = \underline{\mathbb{1} - \tfrac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat H + \mathcal{O}((t-t_0)^2)}$$

mit $\frac{(t-t_0)}{\hbar}$ Parameter $\in \mathbb{R}$ (nicht-kompakte Gruppe, im Gegensatz zu Winkeln $\alpha \in [0, 2\pi]$)

und Generator von Zeittranslationen $\hat H$ ($\hat H$ hängt nicht ab, vertauscht daher mit $\hat H$)

Konvention wie $\hat U(t,t_0)$

Hier: $$\hat U(R) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar}{i}\,\alpha\,\vec n\cdot(\vec r\,' \times \nabla_{\vec r\,'})\right) + \mathcal{O}(\alpha^2)$$ $\left((\vec a\times\vec b)\cdot\vec c = \vec a\cdot(\vec b\times\vec c)\ \text{Parallelogramm-Vol}\right)$

$$= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\,\alpha\, n_j\,\underbrace{\left(\vec r\,' \times (-i\hbar)\nabla_{\vec r\,'}\right)_j}_{\hat L_j} + \mathcal{O}(\alpha^2) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\alpha\,\vec n\cdot\hat{\vec L} + \mathcal{O}(\alpha^2)$$

Summe über $j = 1,2,3$: 3 Parameter und 3 Generatoren

$\Rightarrow$ mit der Identifikation im Ortsraum $-i\hbar\nabla_{\vec r} = \vec p$ werden Drehungen auf den $\Psi(\vec r)$ durch den Bahndrehimpulsoperator $\boxed{\hat{\vec L} = \hat{\vec r}\times\hat{\vec p}}$ erzeugt.

(Übung:) Die Komponenten $\hat L_j$ erfüllen (mit $\hbar$) die SO(3) Lie-Algebra:

$$\boxed{[\hat L_l, \hat L_m] = i\hbar\,\varepsilon_{lmn}\hat L_n} \quad l,m,n = 1,2,3$$

Für endliche Drehungen gilt $$\boxed{\hat U(R) = \exp\left[-\tfrac{i}{\hbar}\alpha\,\vec n\cdot\hat{\vec L}\right]}$$

5.2. Eigenwerte des Drehimpulsoperators [Münster 9.3, Flügbach VI, 36]

Der Bahndrehimpuls $\hat{\vec{L}}$ und $\hbar\vec{\Sigma}$ unserer Drehgeneratoren erfüllen die Drehimpulsalgebra $\boxed{[\hat{J}_e, \hat{J}_k] = i\hbar\epsilon_{ekm}\hat{J}_m}$

mit $J_e = L_e, \hbar\Sigma_e$. Diese hängt über Σ mit der $SO(3)$ zusammen.
(→ im Münster wird deshalb ein dimensionsloser Operator $\hat{\mu}$ eingeführt, $\hat{L} = \hbar\hat{\mu}$, wobei $\hat{\mu}$ die $SO(3)$ Algebra erfüllt.)

* Wie im harmonischen Oszillator klassifizieren wir nun die Eigenwerte und Eigenzustände von Operatoren $\hat{J}_i$, die die obige Drehimpulsalgebra erfüllen

Es gilt: i) Rotationssymmetrie $\Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{L}_i] = \hat{0}$ (vgl. Ü10) $i = 1,2,3$

d.h. $\exists$ Basis von Eigenzuständen von $\hat{H}$ und $\hat{L}_i$.

ii) $[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = i\hbar\hat{L}_3$, $[\hat{L}_2, \hat{L}_3] = i\hbar\hat{L}_1$, $[\hat{L}_3, \hat{L}_1] = i\hbar\hat{L}_2$ alle $\neq \hat{0}$

d.h. $\nexists$ Basis von gleichzeitigen Eigenzuständen von $\hat{L}_1, \hat{L}_2$ und $\hat{L}_3$

Wir wählen eine davon, $\hat{L}_3$

iii) $\boxed{[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_i] = \hat{0}}$ und $\boxed{[\hat{\vec{L}}, \hat{H}] = \hat{0}}$ (Ü10)

$\exists$ Basis von gleichzeitigen Eigenzuständen von $\hat{\vec{L}}^2$, $\hat{L}_3$ und $\hat{H}$ (nur aufgrund von Rotationssymmetrie!)

* Wir betrachten nun einen Operator $\hat{\vec{J}}$, der die Drehimpulsalgebra erfüllt und konstruieren seine gemeinsame Basis von Eigenzuständen von $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_3$ (gibt es wegen $[\hat{\vec{J}}, \hat{J}_3] = \hat{0}$, wie oben)
($\hat{\vec{J}}$ kann der Bahndrehimpuls sein, muss aber nicht). Ferner sei $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}^+$ hermitesch — $\hat{\vec{\Sigma}}$ ist dies automatisch.

Notation: $\hat{\vec{J}}^2 |\lambda, m\rangle = \hbar^2 \lambda |\lambda, m\rangle$ Eigenzustand zu $\hat{\vec{J}}^2$ mit Eigenwert $\hbar^2\lambda \in \mathbb{R}$

$\hat{J}_3 |\lambda, m\rangle = \hbar m |\lambda, m\rangle$ Eigenzustand mit Eigenwert $\hbar m \in \mathbb{R}$

mit Normierung $\boxed{\langle \lambda, m | \lambda', m'\rangle = \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{m,m'}}$

dies sind die Quantenzahlen der Basiszustände

Def $\boxed{\hat{J}_+ = \hat{J}_1 + i\hat{J}_2}$, $\boxed{\hat{J}_- = \hat{J}_1 - i\hat{J}_2}$; es gilt $\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-$

Vertauschungsrelationen:

(i) $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_\pm] = \hat{0}$ (wegen $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_i] = 0 \ \forall i = 1,2,3$ s.o.)

(ii) $\boxed{[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm]} = [\hat{J}_3, \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2] = [\hat{J}_3, \hat{J}_1] \pm i[\hat{J}_3, \hat{J}_2]$
$= i\hbar\hat{J}_2 \pm i(-i\hbar\hat{J}_1) = \hbar(i\hat{J}_2 \pm \hat{J}_1) = \pm\hbar\hat{J}_\pm$

(iii) $\boxed{[\hat{J}_+, \hat{J}_-]} = [\hat{J}_1 + i\hat{J}_2, \hat{J}_1 - i\hat{J}_2] = -i\underbrace{[\hat{J}_1, \hat{J}_2]}_{i\hbar\hat{J}_3} + i\underbrace{[\hat{J}_2, \hat{J}_1]}_{-i\hbar\hat{J}_3}$
$\boxed{= 2\hbar\hat{J}_3}$

(iv) $\boxed{\hat{\vec{J}}^2} = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2 = (\hat{J}_1 - i\hat{J}_2)(\hat{J}_1 + i\hat{J}_2) - i\underbrace{[\hat{J}_1, \hat{J}_2]}_{i\hbar\hat{J}_3} + \hat{J}_3^2$
$\boxed{= \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hbar\hat{J}_3 + \hat{J}_3^2 = \hat{J}_+\hat{J}_- - \hbar\hat{J}_3 + \hat{J}_3^2}$

Konsequenzen:

(a) $\hat{\vec{J}}^2(\hat{J}_\pm|\lambda, m\rangle) \overset{(i)}{=} \hbar^2\lambda\, \hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle$ d.h. $\hat{J}_\pm|\lambda, m\rangle$ sind Eigenzustände von $\hat{\vec{J}}^2$ zum selben Eigenwert

(b) $\hat{J}_3(\hat{J}_\pm|\lambda, m\rangle) = \left(\hat{J}_\pm\hat{J}_3 + [\hat{J}_3, \hat{J}_\pm]\right)|\lambda, m\rangle$
$= \left(\hat{J}_\pm m \pm \hat{J}_\pm\right)|\lambda, m\rangle = \hbar(m \pm 1)\hat{J}_\pm|\lambda, m\rangle$, d.h.

diese sind auch Eigenzustände von $\hat{J}_3$ mit Eigenwerten $\hbar(m \pm 1)$.