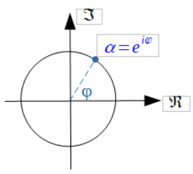
Symmetrien und Erhaltungssätze in der QM

Manfred Hörz

Ist $|\psi\rangle$ ein Zustandsvektor, so wird die Zeitentwicklung dieses Zustandes durch Anwendung eines unitären Operators $\hat{U}(t)$ dargestellt[1]. Unitarität bedeutet $U^{\dagger}U=I$ und hat die Eigenschaft, dass die Beziehung zwischen Zustandsvektoren erhalten bleibt, d.h. dass das innere Produkt $\langle\varphi|U^{\dagger}U|\psi\rangle=\langle\varphi|\psi\rangle$ erhalten bleibt. $\hat{U}$ ist aber kein hermitescher Operator, also keine Observable.

Eigenwerte von unitären Operatoren sind Phasen:

$$U|\alpha\rangle=\alpha|\alpha\rangle\Rightarrow\langle\alpha|U^{\dagger}=\alpha^{*}\langle\alpha|\Rightarrow\langle\alpha|U^{\dagger}U|\alpha\rangle=\alpha^{*}\langle\alpha|\alpha|\alpha\rangle\Rightarrow\langle\alpha|\alpha\rangle=\alpha^{*}\alpha\langle\alpha|\alpha\rangle\Rightarrow 1=\alpha^{*}\alpha\Rightarrow\alpha=e^{i\varphi}$$



$$\hat{U}(0)=I$$

$\hat{U}(\epsilon)=I+\epsilon\hat{G}$, falls stetige Evolution mit einem geeigneten Operator $\hat{G}$, $\hat{U}^{\dagger}(\epsilon)=I+\epsilon\hat{G}^{\dagger}$

ϵ infinitesimal klein.

$$I=\hat{U}^{\dagger}(\epsilon)\hat{U}(\epsilon)=\left(I+\epsilon\hat{G}^{\dagger}\right)\left(I+\epsilon\hat{G}\right)=I+\epsilon\hat{G}+\epsilon\hat{G}^{\dagger}+\underbrace{\epsilon^{2}\hat{G}^{\dagger}\hat{G}}_{\text{wird vernachlässigt}}\Rightarrow\hat{G}^{\dagger}=-\hat{G}\ \text{antihermitesch}\ .$$

Man wählt nun $\hat{G}$ derart, dass durch wiederholte Anwendung von $\hat{U}(\epsilon)$ der „Generator“ von $\hat{U}(t)$ die zeitabhängige Schrödingergleichung, die die Zeitentwicklung im Schrödinger-Bild angibt, erzeugt.

Wähle $\hat{G}:=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}$ mit dem hermiteschen Hamiltonoperator, daraus folgt dann $\hat{U}(\epsilon)=I-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}$

Die Taylornäherung für $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}$ an der Entwicklungsstelle 0 ist:

$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}\approx I-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon-\hat{H}^{2}\frac{\epsilon^{2}}{2\hbar^{2}}+i\hat{H}^{3}\frac{\epsilon^{3}}{3!\hbar^{3}}+\ldots$. In der ersten Ordnung ist $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}=I-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon$.

Also ist $\hat{U}(\epsilon)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}$. Wendet man nun hintereinander n-mal $\hat{U}(\epsilon)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}$ an, so erhält man

die Zeitentwicklung für eine endliche Zeit $t=n\epsilon$: $\hat{U}^{n}(\epsilon)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon n}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=\hat{U}(n\epsilon)=\hat{U}(t)$ oder

$\boxed{\hat{U}(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}}$.

1 Im Heisenberg-Bild

Wendet man auf einen Zustandsvektor $|\psi(t_0)\rangle$ zur Zeit t_0 den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t)$ an, erhält man den Zustand zur Zeit t_0+t :

$\hat{U}(t)|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t_0+t)\rangle$ oder mit $t=\epsilon$: $\hat{U}(\epsilon)|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t_0+\epsilon)\rangle$ oder

$$|\psi(t+\epsilon)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}|\psi(t)\rangle = (I - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon)|\psi(t)\rangle = |\psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon|\psi(t)\rangle \Rightarrow$$

$$|\psi(t+\epsilon)\rangle = |\psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon|\psi(t)\rangle \Rightarrow \frac{|\psi(t+\epsilon)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\epsilon} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle \Rightarrow \frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Und das ist die zeitabhängige Schrödingergleichung: $\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle$

Verwendet man noch die zeitunabhängige Schrödingergleichung: $\hat{H}|\psi(t)\rangle = E|\psi(t)\rangle$, erhält man

für die zeitabhängige: $\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E|\psi(t)\rangle$ die Lösung $|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$.

Umgekehrt kann man aus der Schrödingergleichung auch den Zeitentwicklungsoperator herleiten.

Die beiden Bilder unterscheiden sich in ihrer Philosophie. Heisenberg nimmt eher den parmenideisch-platonischen Standpunkt ein, insofern er von Zuständen ausgeht, die durch Operatoren vermittelt werden. Bei Platon sind das die Ideen, die den Gegenständen (Zuständen) ihre Eigenschaften durch Anwesenheit verleihen. Allerdings kommt noch ein eher aristotelischer Ansatz dazu, der den Messprozess (die Empirie) durch hermitesche Operatoren vermittelt, die nur reelle (irdisch reale) Eigenwerte (Messwerte) besitzen.
Schrödinger dagegen ist eher der herakliteischen Philosophie affin, da der Wandel das Grundlegende ist, d.h. die Wellenfunktion ψ . Ein realer Zustand ist dann die Interaktion der Welle mit der Messung, die die Wellenfunktion kollabieren lässt und einen momentanen, eingefrorenen Zustand erzeugt, der daraufhin wieder einer Wellenfunktion genügt.

Interessant ist in diesem Zusammenhang die Frage, was den Bewegung ist, insofern sie existiert. Der wichtigste Schüler von Parmenides, Zenon, hat viele Gedankenexperimente angestellt, um die Bewegung zu diskreditieren. Ein platonischer Empiriker wie Aristoteles konnte das natürlich nicht akzeptieren und führte dazu relevante Unterscheidungen ein: Die Trennung von aktual und potentiell Unendlichem wie überhaupt die Unterscheidung von Wirklichkeit und Möglichkeit.
Wäre die Bewegung oder die zeitliche Entwicklung nur ein Update der jeweiligen Zustände, und zwar infinitesimale Updates, so kann man dem Begriff des Unendlichen nicht entsagen und ist mitten in der negativen Dialektik von Zenon, die auch durch eine Grenzwerttheorie nicht gelöst werden kann. Meines Erachtens ist der infinitesimale Begriff des Unendlichen eines der größten Hindernisse nicht nur in der Physik, eben auch deshalb weil er kurzfristig gesehen so erfolgreich ist. Man verwechselt gerne das Unendliche im Sinn des innerlich Ungetrennten, des primären Ganzen mit dem arithmetisch Unendlichen, mithilfe dessen man versucht, sich des Ganzen zu bemächtigen. Das zeigt schon die unsinnige Rede einer Geraden als unendliche Menge all auf ihr liegenden Punkte.
So gesehen gebe ich dem Ansatz von Schrödinger in gewisser Hinsicht den Vorzug, insofern man die Welle (oder das Feld) als sich primär bewegende Totalität ansieht, die aber nicht aus Elementen besteht und dazu noch aus unendlich vielen, wie es die QFT versucht.
Wir sind letztlich noch nicht über Zenon hinausgekommen.

Noch eine Bemerkung zur Bewegung im Sinne Heisenbergs, der in die richtige Richtung geht, wenn man von Zuständen ausgehen will. Seine Unschärferelation für Ort und Impuls (Geschwindigkeit): $\Delta x \cdot \Delta p \approx h$ zeigt, dass in der QM eine Bewegung nicht klar definiert werden kann. Ort und Geschwindigkeit sind „verschmiert“ in dem Sinn, dass eine genaue Ortsangabe: $\Delta x = 0$ die Geschwindigkeit total unbestimmt lässt: $\Delta p = \infty$ und umgekehrt, wenn die Geschwindigkeit (siehe Zenons Achilles) präzise ist, so weiß man nicht, wo sich die Entität befindet. Das sollte zu denken geben. Ist die Unschärferelation nicht die richtige Konsequenz eines falschen Ansatzes?
Wenn der Raum sich als fluktuierendes bewegendes, virtuelles Ganzes darstellt und damit auch die Zeit, die nichts anderes ist als eine Relation von Bewegungen, so kann man noch keine Teile bzw. Teilchen annehmen. Man gerät sonst in die üblichen Widersprüche. Nur eine genaue *begriffliche* Analyse des Verhältnisses von Ganzem und daraus sich erzeugenden Teilen kann weiterführen.

Wie sieht eine **Symmetrietransformation** in der heisenbergschen QM aus?

In der Geometrie sind Transformationen dann symmetrisch, wenn Urbild und Bild global nicht unterscheidbar sind. Wird beispielsweise ein Quadrat um seinen Mittelpunkt um 90° gedreht, so ist das gedrehte Quadrat als Ganzes mit dem ungedrehten identisch. Das gilt nicht lokal, da die Seiten oder Punkte des Quadrats nicht identisch bleiben.

Führt man eine Symmetrietransformation in der QM aus, so wird ein Zustand in der Regel auf einen anderen Zustand abgebildet. Aber das gesamte System bleibt erhalten. Wird ein Wasserstoffatom gedreht, so ist es immer noch dasselbe Wasserstoffatom, d.h. es muss durch die gleichen Schrödingergleichungen beschrieben werden.
Da man aus dem Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}$, wie oben geschehen, die SG herleiten kann, reicht es zu fordern, dass der Symmetrieoperator, er werde mit $\hat{S}$ bezeichnet, mit $\hat{U}$ kompatibel ist. Zudem sollte eine Symmetrieoperation die Beziehungen der Teile des Ganzen nicht verändern, d.h. der Symmetrieoperator soll das innere Produkt erhalten, was unitäre Operatoren leisten.

Ein Operator ist ein **Symmetrieoperator** $\hat{S}: \mathcal{H} \to \mathcal{H}; |\psi\rangle \mapsto \hat{S}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$, wenn also gilt:

$(S1)$: $\hat{S}$ ist unitär

$(S2)$: $\hat{S}\hat{U} = \hat{U}\hat{S}$ und das heißt, dass der Kommutator mit $\hat{U}$ Null ist: $[\hat{U}, \hat{S}] = 0$

Wie man sehen wird gilt auch hier, dass gewisse weitere Größen erhalten bleiben, wie das in der klassischen Mechanik Emmy Noether gezeigt hat.

Da $\hat{U} \approx I - \frac{i}{\hbar}\epsilon \hat{H}$ muss auch gelten: $\hat{S}\left(I - \frac{i}{\hbar}\epsilon \hat{H}\right) = \left(I - \frac{i}{\hbar}\epsilon \hat{H}\right)\hat{S}$

$$\Rightarrow \hat{S} I - \frac{i}{\hbar}\epsilon \hat{S}\hat{H} = I\hat{S} - \frac{i}{\hbar}\epsilon \hat{H}\hat{S} \Rightarrow \hat{S}\hat{H} = \hat{H}\hat{S} \Rightarrow [\hat{H}, \hat{S}] = 0$$

Man kann einen unitären Operator, der mit dem Hamiltonoperator kommutiert also auch als Symmetrieoperator kennzeichnen.

Andrerseits gilt[2] $\frac{d}{dt}\langle \hat{O} \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{O}] \rangle$, sodass aus $[\hat{H}, \hat{S}] = 0$ folgt: $\frac{d}{dt}\langle \hat{S} \rangle_{|\psi\rangle} = 0$, d.h. der

2 Siehe QM 1

Erwartungswert eines Symmetrieoperators wird erhalten.

Es gibt zwei Arten der Symmetrieoperationen, die diskreten und die kontinuierlichen.

Bsp:

diskret	**stetig**
Spiegelung	Kontinuierliche Translation
Ortsaustausch zweier identischer Teilchen (Bosonen oder Fermionen)	Kontinuierliche Rotation

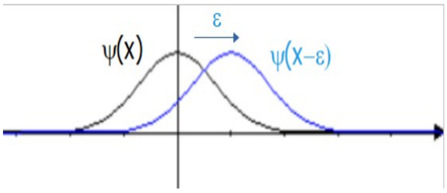
Jede kontinuierliche Symmetrieoperation kann aus infinitesimalen Transformationen aufgebaut werden: $\hat{S}(\epsilon)=e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{G}}\approx I-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{G}$, mit $\hat{G}$ hermitescher Operator, der **Generator** oder **Erzeuger** der Symmetrieoperation $\hat{S}$ genannt wird.

So war der Hamiltonoperator $\hat{H}$ der Generator der Zeitentwicklung. Da der Hamiltonoperator mit sich selbst kommutiert, ist die Zeitentwicklung eine (kontinuierliche) Symmetrieoperation. Das ist sie natürlich nur, wenn der Hamiltonoperator zeitunabhängig ist. Das bedeutet, dass die Zeitentwicklung das System nicht direkt messbar verändert. Was sich verändert ist der nur über Interferenz von Teilsystemen sich auswirkende Phasenfaktor[3].

Dass auch der Generator $\hat{G}$ eine Symmetrieoperation ist, falls unitär[4], zeigt sich durch:

$$0=[\hat{H},\hat{S}]=[\hat{H},I-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{G}]\Rightarrow[\hat{H},\hat{G}]=0 \quad .$$

Beispiel: Translation



Taylorentwicklung $f(x-a)=f(x)+f'(x)(-a)+f''(x)\frac{(-a)^2}{2!}+f'''(x)\frac{(-a)^3}{3!}+\ldots$

Für das Taylorpolynom 1. Ordnung gilt:

$$\hat{S}(\epsilon)\psi(x)=\psi(x-\epsilon)\approx\psi(x)-\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\epsilon$$. Da $\hat{P}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Rightarrow\frac{\partial}{\partial x}=\frac{i}{\hbar}\hat{P}_x$ ist $\hat{S}(\epsilon)\approx I-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{P}_x$

mit dem Generator $\hat{P}_x$ der x-Translation.

Oder

3 Vgl. die Entwicklung des Spin-up: $|\psi(t)\rangle=1|u\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar\omega}{2}t}|u\rangle=e^{-\frac{i}{2}\omega t}|u\rangle$

4 Das gilt i.A. nicht für die Näherungen.

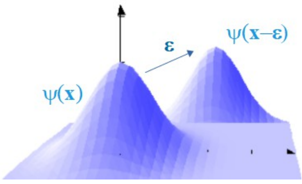
$$\hat{S}(\epsilon)\psi(x)=\psi(x-\epsilon)=\psi(x)-\epsilon\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)+\frac{\epsilon^2}{2!}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)-\frac{\epsilon^3}{3!}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\psi(x)+...=e^{-\epsilon\frac{\partial}{\partial x}}\psi(x)=e^{-\epsilon\frac{i}{\hbar}\hat{P}_x}\psi(x) \quad .$$

$$\Rightarrow \hat{S}(\epsilon)=e^{-\epsilon\frac{i}{\hbar}\hat{P}_x} \quad \text{mit dem Generator} \quad \hat{G}=\hat{P}_x \quad .$$

Gilt $[\hat{H},\hat{P}_x]=0\,?$ Die Hamiltonfunktion eines freien Teilchens ist $H=\frac{p_x^2}{2m}$, also $\hat{H}=\frac{\hat{P}_x^{\,2}}{2m}$.

$[\hat{H},\hat{P}_x]=\frac{1}{2m}[\hat{P}_x^{\,2},\hat{P}_x]=0$, d.h. der Impuls bleibt erhalten.

Im Zwei- bzw. Dreidimensionalen



$\epsilon\frac{\partial}{\partial x}$ wird zu $\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\nabla}$:

$$\hat{S}(\boldsymbol{\epsilon})\psi(\boldsymbol{x})=\psi(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\epsilon})\overset{\text{Taylor}}{=}e^{-\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\nabla}}\psi(\boldsymbol{x})=e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\hat{\boldsymbol{P}}}\psi(\boldsymbol{x}) \quad \text{, da}$$

$$\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{\nabla}=\epsilon_x\frac{\partial}{\partial x}+\epsilon_y\frac{\partial}{\partial y}+\epsilon_z\frac{\partial}{\partial z}=\epsilon_x\cdot\frac{i}{\hbar}\hat{P}_x+\epsilon_y\cdot\frac{i}{\hbar}\hat{P}_y+\epsilon_z\cdot\frac{i}{\hbar}\hat{P}_z=\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}$$

. Der Generator ist $\hat{\boldsymbol{P}}=\begin{pmatrix}\hat{P}_x\\ \hat{P}_y\\ \hat{P}_z\end{pmatrix}$

Der Hamiltonoperator ist $\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{P}_x^{\,2}+\hat{P}_y^{\,2}+\hat{P}_z^{\,2}\right)=\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{P}}^{\mathbf{2}}$. Auch hier kommutieren alle einzelnen

Impulsoperatoren (Generatoren) mit dem Hamiltonoperator, sodass alle Impulse erhalten bleiben bzw. $\hat{\boldsymbol{P}}$ erhalten bleibt.

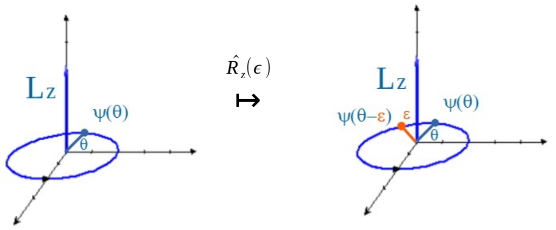
Beispiel: Rotationen um die Koordinatenachsen

Im Gegensatz zu den Translationen kommutieren die Rotationen um verschiedene Achsen i.a. nicht.

Sei $\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\overset{R_z(90°)}{\mapsto}\begin{pmatrix}-1\\0\\0\end{pmatrix}\overset{R_y(90°)}{\mapsto}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$, dagegen ist $\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\overset{R_y(90°)}{\mapsto}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\overset{R_z(90°)}{\mapsto}\begin{pmatrix}-1\\0\\0\end{pmatrix}$

Oder wenn man die Rotationsmatrizen wählt: $R_z(90°)=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$ $\quad R_y(90°)=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\-1&0&0\end{pmatrix}$,

erhält man: $R_yR_z=\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}$ und $R_zR_y=\begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&1\\-1&0&0\end{pmatrix}$ mit $R_yR_z\neq R_zR_y$, jeweils um 90°.



$$\hat{R}_z(\epsilon)\psi(\theta)=\psi(\theta-\epsilon)\overset{\text{Taylor}}{=}\psi(\theta)+\frac{\partial}{\partial\theta}\psi(\theta)\frac{(-\epsilon)}{1!}+\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\psi(\theta)\frac{(-\epsilon)^2}{2!}+...=e^{-\epsilon\frac{\partial}{\partial\theta}}\psi(\theta)$$ und da

$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}=\hat{L}_z$, also $\frac{\partial}{\partial\theta}=\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z$ folgt: $\hat{R}_z(\epsilon)=e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{L}_z}$ mit dem Generator $\hat{L}_z$ der Rotation um die z-Achse. Das Gleiche gilt analog für die anderen Achsen und allgemein bzgl. einer beliebigen Rotationsachse a: $\hat{R}_a(\boldsymbol{\epsilon})=e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\hat{\boldsymbol{L}}_a}$.

Ist der Raum isotrop, dann gilt $[\hat{H},\hat{R}_a(\boldsymbol{\epsilon})]=0$ und ist er in allen Richtungen homogen, gilt der Drehimpulserhaltungssatz $[\hat{H},\hat{\boldsymbol{L}}]=0$ mit $\hat{\boldsymbol{L}}=\begin{pmatrix}\hat{L}_x\\ \hat{L}_y\\ \hat{L}_z\end{pmatrix}$.

Im Gegensatz zu den Translationen sind die Rotationen aber nicht kommutativ, was interessante Konsequenzen haben wird.

Wie sehen die Eigenwerte und Eigenfunktionen zum Drehimpulsoperator aus?

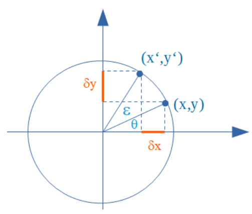
$$\hat{L}_z|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle\Leftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}\psi(\theta)=\lambda\psi(\theta)\Rightarrow\psi(\theta)=\psi(0)e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\theta}$$.

Dreht man um 360°, dann ist $\psi(2\pi)=\psi(0)$, also $e^{\frac{i}{\hbar}\lambda 2\pi}=1\Rightarrow\frac{\lambda}{\hbar}=:m\in\mathbb{Z}$, also

$\hat{L}_z|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle\Leftrightarrow\hat{L}_z|\psi\rangle=\hbar m|\psi\rangle\Leftrightarrow\hat{L}_z e^{im\theta}=\hbar m e^{im\theta}$ m heißt die **magnetische Quantenzahl**.

Die Eigenfunktion ist $\psi(\theta)=e^{im\theta}$ zum Eigenwert $m\hbar$.

Wie lauten die Kommutatoren der Drehimpulse?



$$x=r\cos\theta;\quad y=r\sin\theta;\quad x'=r\cos(\theta+\epsilon);\quad y'=r\sin(\theta+\epsilon)$$

$$\cos(\theta+\epsilon)=\cos(\theta)\cos(\epsilon)-\sin(\theta)\sin(\epsilon)\quad;\quad\sin(\theta+\epsilon)=\sin(\theta)\cos(\epsilon)+\cos(\theta)\sin(\epsilon)$$

$$\delta x = x' - x = r\cos(\theta+\epsilon) - r\cos\theta = r\cos\theta\,\underbrace{\cos\epsilon}_{1} - \underbrace{r\sin\theta}_{y}\,\underbrace{\sin\epsilon}_{\epsilon} - r\cos\theta = -y\epsilon$$

$$\delta y = y' - y = r\sin(\theta+\epsilon) - r\sin\theta = \underbrace{r\sin\theta}_{y}\,\underbrace{\cos\epsilon}_{1} + \underbrace{r\cos\theta}_{x}\,\underbrace{\sin\epsilon}_{\epsilon} - r\sin\theta = x\epsilon$$

$$\frac{i}{\hbar}\epsilon L_z\psi = \delta\psi \overset{\text{Leibniz}}{=} \frac{\partial\psi}{\partial x}\cdot\delta x + \frac{\partial\psi}{\partial y}\cdot\delta y = \frac{\partial\psi}{\partial x}\cdot(-y\epsilon) + \frac{\partial\psi}{\partial y}\cdot x\epsilon = -\frac{i}{\hbar}\epsilon\,\hat{p}_x y\psi + \frac{i}{\hbar}\epsilon\,\hat{p}_y x\psi \Rightarrow$$

$$L_z = -\hat{p}_x y + \hat{p}_y x = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x \quad .$$

Das kann man natürlich auch aus dem klassischen Impuls durch Quantisierung direkt angeben:

klassisch: $\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p} = \begin{pmatrix} y\,p_z - z\,p_y \\ z\,p_x - x\,p_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix} \quad ; \quad \boldsymbol{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$

Quantisierung mit $p_x \to \hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}; \quad p_y \to \hat{P}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}; \quad p_z \to \hat{P}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z};$ und demnach

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \begin{pmatrix} y\hat{P}_z - z\hat{P}_y \\ z\hat{P}_x - x\hat{P}_z \\ x\hat{P}_y - y\hat{P}_x \end{pmatrix} = -i\hbar\,\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{\nabla} = -i\hbar\begin{pmatrix} y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \\ z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \\ x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$$

Zu den Kommutatoren:

$$[L_x, L_y] = [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] = [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - \underbrace{[y\hat{p}_z, x\hat{p}_z]}_{0} - \underbrace{[z\hat{p}_y, z\hat{p}_x]}_{0} + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z] =$$

$$= \underbrace{\overbrace{y\hat{p}_z z\hat{p}_x}^{\leftarrow\ \leftarrow}}_{y\hat{p}_x\hat{p}_z z} - \underbrace{\underbrace{\overbrace{z\hat{p}_x y\hat{p}_z}^{\leftarrow\ \leftarrow}}_{\rightarrow\ \rightarrow}}_{y\hat{p}_x z\hat{p}_z} + \underbrace{\underbrace{\overbrace{z\hat{p}_y x\hat{p}_z}^{\rightarrow\ \rightarrow}}_{\rightarrow\ \rightarrow}}_{z\hat{p}_z x\hat{p}_y} - \underbrace{\overbrace{x\hat{p}_z z\hat{p}_y}^{\rightarrow\ \rightarrow}}_{\hat{p}_z z x\hat{p}_y} = y\hat{p}_x(\underbrace{\hat{p}_z z - z\hat{p}_z}_{-i\hbar}) + (\underbrace{z\hat{p}_z - \hat{p}_z z}_{i\hbar})x\hat{p}_y = i\hbar(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) \Rightarrow$$

$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$. Analog: $[L_y, L_z] = i\hbar L_x$; $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$, oder $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ mit dem in den Indizes zyklisch vertauschenden Levi-Civita-Symbol (Tensor) ϵ_{ijk} .

$$\hat{R}_x(\epsilon) = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{L}_x} \quad , \quad \hat{R}_y(\epsilon) = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{L}_y} \quad , \quad \hat{R}_z(\epsilon) = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{L}_z} \quad .$$

Die Generatoren $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ der infinitesimalen Rotationen $\hat{R}_x(\epsilon), \hat{R}_y(\epsilon), \hat{R}_z(\epsilon)$ bilden bzgl. ihrer Kommutatoren einen Abschluss, sie bilden eine **Lie-Algebra** $\mathfrak{su}(2)$ **.**

Eine **Lie-Algebra** ist ein Vektorraum $\mathfrak{g}$ über einem Körper mit der Verknüpfung

$[.,.]:\mathfrak{g}\times\mathfrak{g}\rightarrow\mathfrak{g};(x,y)\mapsto[x,y]$ (Lie-Klammer) mit folgenden Eigenschaften:

(1) [.,.] ist bilinear

(2) [x,[y,z]]+[y,[z,x]]+[z,[x,y]]=0 (Jacobi-Identität)

(3) [x,x]=0 für alle $x\in\mathfrak{g}$.

Der Kommutator genügt allen drei Bedingungen. Der Körper ist hier $\mathbb{C}$.
Die Basisvektoren sind die Generatoren $J_k:=L_k$ $(\hbar:=1)$ k = 1, 2, 3, $\hat{J}_1=\hat{J}_x=\hat{L}_x,\ldots$

Die Verknüpfungstafel der Basisvektoren:

[,]	J_x	J_y	J_z
J_x	0	iJ_z	$-iJ_y$
J_y	$-iJ_z$	0	iJ_x
J_z	iJ_y	$-iJ_x$	0

Jeder Rotationsgenerator $\hat{J}_{\hat{\boldsymbol{n}}}$ einer Rotation $\hat{R}_{\hat{\boldsymbol{n}}}(\alpha)=e^{-i\alpha\hat{J}_{\hat{n}}}$ um die Achse $\hat{\boldsymbol{n}}=\begin{pmatrix}n_1\\n_2\\n_3\end{pmatrix}$ ist LK der obigen drei Basisvektoren: $\hat{J}_{\hat{\boldsymbol{n}}}=\sum_{k=1}^{3}n_k\hat{J}_k$. $\hat{R}_{\hat{\boldsymbol{n}}}(\alpha)=e^{-i\alpha\hat{J}_{\hat{n}}}$ lässt sich schreiben als

$\hat{R}_{\hat{\boldsymbol{n}}}(\alpha)=e^{-i\alpha(\sum_k n_k\hat{J}_k)}$.

Die Rotationen bilden eine nichtabelsche Gruppe, die **Lie-Gruppe** $SU(2)$ mit der Komposition als Verknüpfung. Sie ist nicht abelsch, da Rotationen i.a. nicht kommutieren (siehe oben).

Jedem Element aus der Lie-Algebra kann eine Rotation über die surjektive Abbildung

$f:\mathfrak{su}(2)\rightarrow SU(2);g\mapsto e^g$ zugeordnet werden. Sie ist nicht injektiv, da bspw.

$\hat{R}_x(0)=e^{-iJ_x\cdot 0}=e^{-iJ_x 4\pi}=\hat{R}_x(4\pi)$, aber $g_1=-iJ_x\cdot 0\neq -iJ_x\cdot 4\pi=g_2$.

Sind A und B infinitesimale Symmetrieoperationen: $[A,H]=0;$ $[B,H]=0$, dann ist auch $[A,B]$ eine Symmetrieoperation: $[[A,B],H]=0$, denn

$[A,B]H-H[A,B]=ABH-BAH-HAB+HBA=AHB-BHA-HAB+HBA=$

$=HAB-HBA-HAB+HBA=0$.

Allerdings ist der Kommutator $[A,B]$ von zwei hermiteschen Operatoren nicht wieder ein hermitescher Operator, sondern antihermitesch:

$$([A,B])^\dagger=(AB-BA)^\dagger=(AB)^\dagger-(BA)^\dagger=B^\dagger A^\dagger-A^\dagger B^\dagger=BA-AB=-(AB-BA)=-[A,B] \quad .$$

Durch Multiplikation mit i oder -i wird er wieder hermitesch:

$$(\pm i[A,B])^\dagger=\mp i(-[A,B])=\pm i[A,B] \quad .$$

Ist $C:=i[A,B]$ LK(A,B): $C=\lambda A+\mu B$, dann ist $\{A,B\}$ Basis einer zweidimensionalen

Lie-Algebra.

Ist dagegen A,B,C linear unabhängig, dann ist C eine neue Symmetrieoperation und, falls sie sich abschließen lässt, ist die entsprechende Lie-Algebra mindestens dreidimensional.

Das ist der Fall für die Generatoren $\hat{J}_i$.

In diesem Fall lassen sich wie beim harmonischen Oszillator neue nützliche Operatoren definieren, die sogenannten zueinander adjungierten **Leiteroperatoren**: $J_\pm:=J_x\pm iJ_y$.

Auch sie sind Erhaltungsgrößen wie die $\hat{J}_i$:

$$[J_\pm,H]=[J_x\pm iJ_y,H]=[J_x,H]\pm i[J_z,H]=0\pm 0=0$$

Es gilt folgende erweiterte Kommutatortafel:

[.,.]	J_x	J_y	J_z	J_+	J_-
J_x	0	iJ_z	$-iJ_y$	$-J_z$	J_z
J_y	$-iJ_z$	0	iJ_x	$-iJ_z$	$-iJ_z$
J_z	iJ_y	$-iJ_x$	0	J_+	$-J_-$
J_+	J_z	iJ_z	$-J_+$	0	$2J_z$
J_-	$-J_z$	iJ_z	J_-	$-2J_z$	0

$$J_x=-i\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right) \quad J_y=-i\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right) \quad J_z=-i\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$
$$J_x^2=y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z} \quad J_y^2=x\frac{\partial}{\partial x}+z\frac{\partial}{\partial z} \quad J_z^2=x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}\Rightarrow J^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2\Rightarrow$$

$$J^2=2x\frac{\partial}{\partial x}+2y\frac{\partial}{\partial y}+2z\frac{\partial}{\partial z}$$

$$J_xJ^2=\left(-iy\frac{\partial}{\partial z}+iz\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(2x\frac{\partial}{\partial x}+2y\frac{\partial}{\partial y}+2z\frac{\partial}{\partial z}\right)=2iz\frac{\partial}{\partial y}-2iy\frac{\partial}{\partial z}\Rightarrow[J^2,J_x]=0$$

$$J^2J_y=\left(2x\frac{\partial}{\partial x}+2y\frac{\partial}{\partial y}+2z\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(-iz\frac{\partial}{\partial x}+ix\frac{\partial}{\partial z}\right)=2ix\frac{\partial}{\partial z}-2iz\frac{\partial}{\partial x}$$

$$J_y J^2 = \left(-iz\frac{\partial}{\partial x} + ix\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(2x\frac{\partial}{\partial x} + 2y\frac{\partial}{\partial y} + 2z\frac{\partial}{\partial z}\right) = -2iz\frac{\partial}{\partial x} + 2ix\frac{\partial}{\partial z} \Rightarrow [J^2, J_y] = 0$$

$$J^2 J_z = \left(2x\frac{\partial}{\partial x} + 2y\frac{\partial}{\partial y} + 2z\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(-ix\frac{\partial}{\partial y} + iy\frac{\partial}{\partial x}\right) = -2ix\frac{\partial}{\partial y} + 2iy\frac{\partial}{\partial x}$$

$$J_z J^2 = \left(-ix\frac{\partial}{\partial y} + iy\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(2x\frac{\partial}{\partial x} + 2y\frac{\partial}{\partial y} + 2z\frac{\partial}{\partial z}\right) = -2ix\frac{\partial}{\partial y} + 2iy\frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow [J^2, J_z] = 0$$

$[J^2, J_\pm] = [J^2, J_x \pm i J_y] = [J^2, J_x] \pm i [J^2, J_y] = 0$.

J^2 kommutiert mit allen Drehimpulsoperatoren.

Seien zwei Observablen A, B, mit: $A|a\rangle = a|a\rangle$, $B|b\rangle = b|b\rangle$. Damit es ein gemeinsames System von Eigenvektoren $|a, b\rangle$ gibt: $A|a,b\rangle = a|a,b\rangle$, $B|a,b\rangle = b|a,b\rangle$, müssen die Observablen kommutieren:

$$AB|a,b\rangle = Ab|a,b\rangle = bA|a,b\rangle = ba|a,b\rangle = ab|a,b\rangle = aB|a,b\rangle = Ba|a,b\rangle = BA|a,b\rangle \Rightarrow AB = BA$$

Die Umkehrung ist auch richtig.

Da $[J^2, J_z] = 0$ gibt es ein solches gemeinsames System von Eigenvektoren. Sei

$J^2|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle$ und $J_z|m\rangle = m|m\rangle$, also gilt: $J^2|a_j, m\rangle = a_j|a_j, m\rangle$ und $J_z|a_j, m\rangle = m|a_j, m\rangle$.

Mit $[J^2, J_\pm] = 0$ (1) und $[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm$ (2) wird gezeigt, dass $J_\pm|a_j, m\rangle$ weiterer Eigenzustand zu beiden Operatoren J^2 und J_z ist mit gleichem Eigenwert für J^2 und neuem Eigenwert für J_z .

Es gilt: $J^2 J_\pm|a_j, m\rangle \overset{(1)}{=} J_\pm J^2|a_j, m\rangle = J_\pm a_j|a_j, m\rangle = a_j J_\pm|a_j, m\rangle$, d.h. $J_\pm|a_j, m\rangle$ ist Eigenzustand von J^2 mit gleichem Eigenwert a_j .

Andrerseits gilt durch Umschreiben des Kommutators in (2) und Anwenden von (2):

$$J_z J_\pm = [J_z, J_\pm] + J_\pm J_z \overset{(2)}{=} \pm J_\pm + J_\pm J_z \Rightarrow J_z J_\pm|a_j, m\rangle = \pm J_\pm|a_j, m\rangle + J_\pm J_z|a_j, m\rangle \Rightarrow$$

$$J_z J_\pm|a_j, m\rangle = \pm J_\pm|a_j, m\rangle + J_\pm m|a_j, m\rangle = \pm J_\pm|a_j, m\rangle + m J_\pm|a_j, m\rangle = (m \pm 1) J_\pm|a_j, m\rangle \text{ ,also}$$

$J_z J_\pm|a_j, m\rangle = (m \pm 1) J_\pm|a_j, m\rangle$, d.h. $J_\pm|a_j, m\rangle$ ist Eigenzustand von J_z mit dem neuen

Eigenwert $m \pm 1$. Der Leiteroperator J_+ erhöht den Eigenwert von J_z um eins, der Leiteroperator J_- senkt den Eigenwert von J_z um eins.
Weiter gilt $0 \le \|J_x \psi\|^2 = \langle\psi|J_x^\dagger J_x|\psi\rangle = \langle\psi|J_x^2|\psi\rangle$, d.h. der Erwartungswert für J_x^2 ist nichtnegativ. Das Gleiche gilt für J_y^2 für jeden Zustandsvektor. Für $|a_j m\rangle$ gilt also $\langle a_j m|J_x^2 + J_y^2|a_j m\rangle \ge 0$.

Wegen $J_x^2 + J_y^2 = J^2 - J_z^2$ folgt $\langle a_j m|J^2 - J_z^2|a_j m\rangle \ge 0 \Leftrightarrow 0 \le \langle a_j m|a_j - m^2|a_j m\rangle = 0 \le a_j - m^2$

mit normierten Eigenvektoren. Aus der letzten Ungleichung folgt $|m| \leq \sqrt{a_j}$. Da aber mithilfe von J_+ die Quantenzahl m bei gleichbleibendem a_j immer um eins erhöht wird, andrerseits aber gilt $m \leq \sqrt{a_j}$, muss dieser aufsteigende Prozess ein Ende haben, d.h. es gibt ein maximales m,

$j := max\{m / m \leq \sqrt{a_j}\}$. Für dieses j definiert man $J_+ |a_j j\rangle := 0$. Das gleiche Argument gilt für

den Absteigeoperator J_- . Da das System rotationsinvariant ist, ist der niederste Wert für m: -j.

Es gilt also $-j \leq m \leq j$. Fängt man beim Maximum j an, dann muss man durch Anwendung von n absteigenden Schritten beim Minimum -j ankommen: $j - n = -j \Leftrightarrow 2j = n \Leftrightarrow j = \frac{n}{2} \quad n \in \mathbb{N}_0$.
Ist n gerade, dann ist j ganzzahlig, ist n ungerade, dann ist j halbzahlig.

Bspw: $n = 2 \Rightarrow j = 1$ und $-1 \leq m \leq 1$. Dann würde m die drei Zahlen $-1, 0, 1$ annehmen können.

Ist $n = 3 \Rightarrow j = \frac{3}{2}$ und m kann die vier Zahlen $-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ besitzen. j ist die Drehimpulsquantenzahl und m die magnetische Quantenzahl. Da der Spin den gleichen Kommutatorregeln genügt wie der Bahndrehimpuls, gelten für ihn die gleichen Ergebnisse.
Da es nur ganzzahligen Spin gibt (Bosonen: $S = 0 : \pi$ -Meson (Pion) , $S = 1 :$ Photon, Gluon, W-,Z-Boson) und halbzahligen (Fermionen: $S = \frac{1}{2} :$ Elektron,Neutrino, Quark), teilen sich die Teilchen in diese zwei Arten auf.

Wie sieht es mit der Quantenzahl a_j von J^2 aus?

Es gilt: $J_- J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + iJ_x J_y - iJ_y J_x + J_y^2 = J^2 - J_z^2 + i[J_x, J_y] = J^2 - J_z^2 - J_z$

Andrerseits ist $J_- J_+ |a_j, j\rangle = J_- 0 = 0$. Also:

$$0 = (J^2 - J_z^2 - J_z)|a_j, j\rangle = J^2 |a_j, j\rangle - J_z^2 |a_j, j\rangle - J_z |a_j, j\rangle = (a_j - j^2 - j)|a_j, j\rangle \Rightarrow a_j = j^2 + j = j(j+1)$$

Führt man wieder die reduzierte Plancksche Konstante ein, so gelten folgende Spektren:

$$J^2: \quad \hbar^2 j(j+1) \qquad j = \frac{n}{2}: \ j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$$

$J_z: \quad \hbar m \qquad -j \leq m \leq j : \ -j, -j+1, \ldots -1, 0, 1, \ldots, j-1, j$, das sind bei gegebenem j (2j +1)

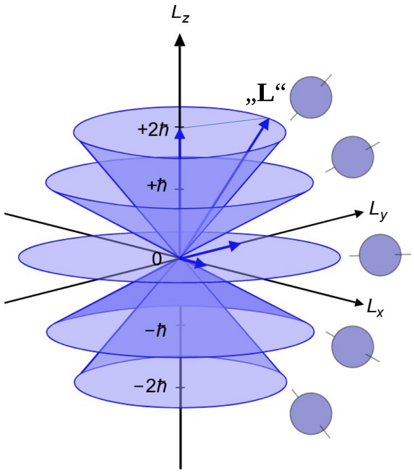
mögliche Eigenwerte.

Anstatt des gemeinsamen Zustandsvektor $|a_j, m\rangle$ für J^2, J_z schreibt man einfacher $|j, m\rangle$ und sagt, ein System im Eigenzustand $|j, m\rangle$ habe den Drehimpuls (j, m).

Wird nun die Observable J^2 gemessen und liegt einer ihrer Zustandsvektoren fest, so gibt es noch 2j+1 Möglichkeiten für den Drehimpulsoperator J_z

$|j, -j\rangle$, $|j, -j+1\rangle, \ldots, |j, -1\rangle, |j, 0\rangle, |j, 1\rangle, \ldots, |j, j-1\rangle, |j, j\rangle$, d.h. der Zustand ist in einer

Superposition $|\psi\rangle=\sum_{m=-j}^{j}\alpha_m|j,m\rangle$, wobei bei Messung des Drehimpulses J_z die Wahrscheinlichkeit den Zustand $|j,m\rangle$ zu messen $\alpha_m^*\alpha_m$ beträgt.



aus Wikipedia für j=2 (l=2)

Der präzedierende Vektor für J (hier mit **L** angegeben), der nicht räumlich festgelegt sein kann, da nicht alle drei Komponenten gleichzeitig gemessen werden können, vermittelt durch die Präzession die Unschärfe für J_x, J_y .

Um darstellende Matrizen zu den Operatoren zu finden, müssen die Matrixelemente in einer Basis angegeben werden. Zunächst gilt (siehe oben): $J_z\ J_\pm|j,m\rangle=(m\pm1)J_\pm|j,m\rangle$.

Bei kommutierenden Operatoren J^2, J_z sind keine entarteten Eigenvektoren zu erwarten (siehe weiter unten), sodass man den Eigenvektor $J_\pm|j,m\rangle$ von J_z wie üblich durch seinen Eigenwert angeben kann: $J_\pm|j,m\rangle=Nf_\pm|j,m\pm1\rangle$ (*) mit einem noch zu bestimmenden normierenden Faktor $Nf_\pm$ für $J_\pm|j,m\rangle$,wobei $|j,m\pm1\rangle$ als normiert vorausgesetzt sei.

$$\left|J_+|j,m\rangle\right|^2=\langle j,m|J_-J_+|j,m\rangle\overset{(*)}{=}\langle j,m+1|Nf_+^*Nf_+|j,m+1\rangle\overset{\text{Phasenfaktor:=1}}{=}\langle j,m+1|Nf_+^2|j,m+1\rangle=Nf_+^2$$

andrerseits gilt wegen $J_-J_+=J^2-J_z^2-J_z$:

$$\left|J_+|j,m\rangle\right|^2=\langle j,m|J_-J_+|j,m\rangle=\langle j,m|J^2-J_z^2-J_z|j,m\rangle=j(j+1)-m^2-m=j(j+1)-m(m+1)$$

also $Nf_+=\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\Rightarrow J_+|j,m\rangle=\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}|j,m+1\rangle$.

$$\left|J_-|j,m\rangle\right|^2=\langle j,m|J_+J_-|j,m\rangle\overset{(*)}{=}\langle j,m-1|Nf_-^*Nf_-|j,m-1\rangle\overset{\text{Phasenfaktor:=1}}{=}\langle j,m-1|Nf_-^2|j,m-1\rangle=Nf_-^2$$

und wegen $J_+J_-=J^2-J_z^2+J_z$:

$$\left|J_-|j,m\rangle\right|^2=\langle j,m|J_+J_-|j,m\rangle=\langle j,m|J^2-J_z^2+J_z|j,m\rangle=j(j+1)-m^2+m=j(j+1)-m(m-1)$$

Also $Nf_-=\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\Rightarrow J_-|j,m\rangle=\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}|j,m-1\rangle$

Und damit $J_\pm|j,m\rangle=\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}|j,m\pm1\rangle$ (mit wieder eingeführtem $\hbar$) .

Damit kann man die Matrixelemente für festes j berechnen:

$$\langle j,m|J^2|j,m'\rangle=\langle j,m|\hbar^2 j(j+1)|j,m'\rangle=\hbar^2 j(j+1)\delta_{m,m'}$$

$$\langle j,m|J_z|j,m'\rangle=\langle j,m|\hbar m'|j,m'\rangle=\hbar m'\delta_{m,m'}$$

$$\langle j,m|J_+|j,m'\rangle=\langle j,m|\hbar\sqrt{j(j+1)-m'(m'+1)}|j,m'+1\rangle=\hbar\sqrt{j(j+1)-m'(m'+1)}\,\delta_{m,m'+1}$$

$$\langle j,m|J_-|j,m'\rangle=\langle j,m|\hbar\sqrt{j(j+1)-m'(m'-1)}|j,m'-1\rangle=\hbar\sqrt{j(j+1)-m'(m'-1)}\,\delta_{m,m'-1}$$

Beispiel: $j=\frac{1}{2}$ mit $2j+1=2$ (Unterraumdimension, daher 2x2 Matrizen) , $j(j+1)=\frac{3}{4}$ und

$m=-\frac{1}{2},\frac{1}{2}$: Die Basisvektoren sind $|1\rangle:=|j,m_1\rangle=\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$, $|2\rangle:=|j,m_2\rangle=\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$

J^2: $M_{11}=\langle 1|J^2|1\rangle=\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|J^2\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{3}{4}\hbar^2$ wegen $\delta_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=1$

$M_{12}=\langle 1|J^2|2\rangle=\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|J^2\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{3}{4}\hbar^2\cdot 0=0$, wegen $\delta_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=0$, etc.

$\Rightarrow J^2\doteq\frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$.

J_z: $M_{11}=\langle 1|J_z|1\rangle=\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|J_z\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=-\frac{1}{2}\hbar$

$M_{12}=\langle 1|J_z|2\rangle=\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|J_z\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{2}\hbar^2\cdot 0=0$

$M_{21}=0;\quad M_{22}=\langle 2|J_z|2\rangle=\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|J_z\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{2}\hbar\Rightarrow\quad J_z\doteq\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix}$.

J_+: $M_{11}=\langle 1|J_+|1\rangle=\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|J_+\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar\,\delta_{-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}}=0$

$M_{12}=\langle 1|J_+|2\rangle=\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|J_+\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=0\cdot\hbar\,\delta_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=0,$ da $\sqrt{\frac{3}{4}-(\frac{1}{2}\cdot(\frac{1}{2}+1))}=0$

$M_{21}=\langle 2|J_+|1\rangle=\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|J_+\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=1\cdot\hbar\,\delta_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=\hbar,$ da $\sqrt{\frac{3}{4}-(-\frac{1}{2}\cdot(-\frac{1}{2}+1))}=1$

$M_{22}=\langle 2|J_+|2\rangle=\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|J_+\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar\,\delta_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=0\Rightarrow\quad J_+\doteq\hbar\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}$

J_-: $M_{11}=\langle 1|J_-|1\rangle=\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|J_-\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar\,\delta_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=0=M_{22}$

$M_{12}=\langle 1|J_-|2\rangle=\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|J_-\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar\,\delta_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=\hbar,$ da $\sqrt{\frac{3}{4}-(\frac{1}{2}\cdot(\frac{1}{2}-1))}=1$

$$M_{21}=\langle 2|J_-|1\rangle=\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|J_-\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=0\cdot\hbar\,\delta_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=0,\ \text{da}\ \sqrt{\frac{3}{4}-(-\frac{1}{2}\cdot(-\frac{1}{2}-1))}=0$$

$$J_-\doteq\hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

$$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-)\doteq\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\qquad J_y=\frac{i}{2}(J_--J_+)\doteq\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & i\\ -i & 0\end{pmatrix}$$

Das sind Spin-Matrizen S_x,S_y,S_z . Dreht man, wie üblich aber mathematisch seltsam, die Reihenfolge der Basisvektoren um, erhält man die Paulimatrizen mal $\frac{\hbar}{2}$, die Matrizen von J_+ und J_- sind dann vertauscht: In der Basis $|1\rangle:=|j,m_1\rangle=\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle,\ |2\rangle:=|j,m_2\rangle=\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$:

$$J_+\doteq\hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}\quad J_-\doteq\hbar\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix}\quad J_x\doteq\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\quad J_y\doteq\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\quad J_z\doteq\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$J^2\doteq\frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\ .$$

Die Operatoren J^2,J_z kommutieren und da sie auch mit H kommutieren, sind sie Symmetrien.

J^2,J_z,H haben im Zentralpotenzial einen gemeinsamen Satz von Eigenzuständen $|\psi\rangle$:

$J^2|\psi\rangle=l(l+1)|\psi\rangle,\ J_z|\psi\rangle=m|\psi\rangle,\ H|\psi\rangle=E|\psi\rangle$ mit $|\psi\rangle:=|j,m,E\rangle$.

Die Leiteroperatoren genügen den Kommutatorrelationen

$[J^2,J_\pm]=0,\ [J_\pm,H]=0,$ aber $[J_\pm,J_z]\neq 0$. Die Leiteroperatoren sind also auch Symmetrieoperatoren, kommutieren aber nicht mit J_z !

$J_\pm|j,m,E\rangle=\surd|j,m\pm 1,E\rangle$. Daraus resultiert nun die Entartung der Energieeigenwerte:

$H J_\pm|j,m,E\rangle=J_\pm H|j,m,E\rangle=J_\pm E|j,m,E\rangle=E J_\pm|j,m,E\rangle=E\surd|j,m\pm 1,E\rangle$, d.h.

mit $|j,m,E\rangle$ ist auch $J_\pm|j,m,E\rangle=\surd|j,m\pm 1,E\rangle$ Eigenvektor von H zum gleichen Energieeigenwert E.