letzte Vrlsg.:

Satz: A, B hermitesch

$[A, B] = 0 \iff$ A und B besitzen gemeinsame Eigenbasis

neues Thema:

Quantenmechanischer Drehimpuls

Bahndrehimpuls

Eigendrehimpuls

$\equiv$ Spin

Erinnerung:

Impuls $\stackrel{\text{Def.}}{=}$ Erzeuger der Translationen $T(a)$:

$|x\rangle \longmapsto |x+a\rangle$

d.h.

$$\boxed{\hat{p} := i\hbar \frac{\partial}{\partial a} T(a) \Big|_{a=0}}$$

$$\left.\begin{array}{l} \bullet\ T^{+}(a)T(a) = \mathbb{1} \\ \bullet\ T(a)T(b) = T(a+b) \\ \bullet\ T(0) = \mathbb{1} \end{array}\right\} \longrightarrow \begin{array}{l} \bullet\ T(a) = e^{-ia\hat{p}/\hbar} \\ \bullet\ [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \\ \bullet\ \psi(x) \xrightarrow{\hat{p}} -\frac{i}{\hbar}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) \end{array}$$

grob: <u>Drehimpuls</u> $\overset{\text{Def}}{=}$ Erzeuger der <u>Rotationen</u>

$$\mathcal{U}(R) : |\psi\rangle \longrightarrow (\ldots ? \ldots)$$

d.h. $$\boxed{L_i := i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \mathcal{U}(R_{i,\varphi})\Big|_{\varphi=0}}$$

Eigenschaften der 3D Rotationen (SO(3)) $\Big\} \to$

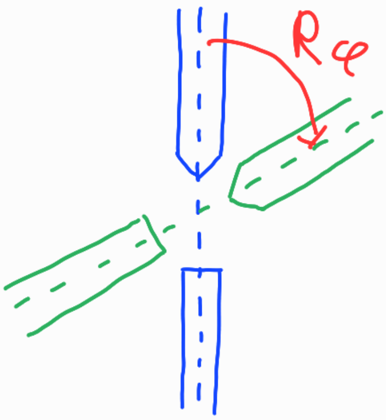
- $\mathcal{U}(R_{\vec{n},\varphi}) = e^{-i(\hat{\vec{L}}\cdot\vec{n})\varphi/\hbar}$
- $[L_1, L_2] = i\hbar L_3$ (+zykl.)
- $[L^2, L_3] = 0$

$\vdots$

<u>Schwierigkeit</u>:

Wie wirkt Rotation auf <u>internen</u> Zustand "<u>Spin</u>"?

$$\mathcal{H}_{\text{Spin}} = \text{Span}\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \; ; \qquad \mathcal{U}(R)\,|\uparrow\rangle = ?$$



$$|\psi\rangle = \alpha\,|\uparrow\rangle + \beta\,|\downarrow\rangle$$

$$\xrightarrow{\mathcal{U}(R)} |\psi'\rangle = \alpha'\,|\uparrow\rangle + \beta'\,|\downarrow\rangle \quad ?$$

zuerst: QM eines Teilchens in **3D**

Γ in 1D:

- $|\varphi_x\rangle \equiv |x\rangle$: EZ zum EW x des Ortsoperators $\hat{x}$

Orthogonalität:

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x-x')$$

Vollständigkeit

$$\int dx\, |x\rangle\langle x| = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}$$

Wellenfunktion

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$$

Translation

$$T(a)\,|x\rangle = |x+a\rangle$$

Impuls

$$p = i\hbar \frac{\partial}{\partial a} T(a)\Big|_{a=0}$$

Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m}\,p^2 + U(x)$$

QM eines Teilchens in 3D

Ortsoperatoren $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$, $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0$

$$\hat{\vec{r}} = \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \hat{x}_3 \end{pmatrix}$$

- gemeinsame Eigenzustände: $|\varphi_{\vec{r}}\rangle \equiv |\vec{r}\rangle$

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3$$

$$\hat{x}_l |\vec{r}\rangle = x_l |\vec{r}\rangle$$

Orthogonalität:

$$\langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(x_1 - x_1')\,\delta(x_2 - x_2')\,\delta(x_3 - x_3')$$

Vollständigkeit

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r} \; |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}| \stackrel{!}{=} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}$$

Wellenfunktion

$$\mathcal{H} \ni |\psi\rangle \rightarrow \psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

Translationen: $\quad T(\vec{a})\,|\vec{r}\rangle = |\vec{r}+\vec{a}\rangle$

$$T^{+}(\vec{a})\,T(\vec{a}) = \mathbb{1}\,,$$

$$T(\vec{a})\,T(\vec{b}) = T(\vec{a}+\vec{b}) = T(\vec{b})\,T(\vec{a})$$

$\vdots$

Impulse:

$$\hat{p}_\ell := i\hbar \frac{\partial}{\partial a} T(a\vec{e}_\ell)\Big|_{a=0}$$

$$\rightarrow \quad \hat{\vec{p}} = \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \\ \hat{p}_3 \end{pmatrix}$$

$$T(\vec{a}) = \underset{e^{-ia_1\hat{p}_1/\hbar}}{\underset{\parallel}{T(a_1\vec{e}_1)}}\ \overset{e^{-ia_2\hat{p}_2/\hbar}}{\overset{\parallel}{T(a_2\vec{e}_2)}}\ \overset{e^{-ia_3\hat{p}_3/\hbar}}{\overset{\parallel}{T(a_3\vec{e}_3)}}$$

$$T(\vec{a}) = e^{-i\,\vec{a}\cdot\hat{\vec{p}}/\hbar}$$

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{\ \vec{p}\ } -i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{r})$$

$$[T(\vec{e}_k), T(\vec{e}_\ell)] = 0 \quad \rightsquigarrow \quad [\hat{p}_k, \hat{p}_\ell] = 0$$

$$\bullet \quad [\hat{x}_l, \hat{p}_k] = i\hbar\,\delta_{lk}$$

<u>Hamiltonop.:</u>

$$H = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2\right) + V(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$$

$$H = \frac{1}{2m}\,|\hat{\vec{p}}|^2 + V(\hat{\vec{r}})\,.$$

Drehimpuls

= <u>Erzeuger der Rotationen</u> auf

- Ortszustand des Teilchens: <u>Bahndrehimpuls</u> $\hat{\vec{L}} = \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{pmatrix}$
- Internen Zustand " " : <u>Spinoperator</u> $\hat{\vec{S}} = \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix}$
  ("Spin")

L_i Oper. auf $\mathrm{Span}\{|\vec{r}\rangle\}_{\vec{r}\in\mathbb{R}^3} = \mathcal{H}_{\text{Ort}}$

s_i Oper. auf $\mathrm{Span}\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} = \mathcal{H}_{\text{Spin}}$

$\rightarrow$ (Gesamt-) Drehimpuls: $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$ "

$$\hat J_k = \hat L_k + \hat S_k$$

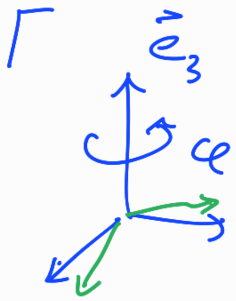
$$\hat L_k = \hat L_k \otimes 1_{Spin} \qquad \hat S_k = 1_{Ort} \otimes \hat S_k$$

$\hat{\vec J}$ Op. auf $\underbrace{\mathcal{H}_{Ort} \otimes \mathcal{H}_{spin}}_{\cong \ \text{Span}\left\{ |\vec r, \uparrow\rangle, \ |\vec r, \downarrow\rangle \right\}_{\vec r \in \mathbb{R}^3}}$

wichtig: Eigenschaften von $\hat{\vec J}$ $(\to \hat{\vec L}, \hat{\vec S})$ als Erzeuger der Rotationen folgen aus den Eigenschaften der räumlichen Rotationen!

Erinnerung / Exkurs: 3D Rotationen

Rotation R $\hat{=}$ lin. Abb $R: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$, $\vec r \mapsto \vec r' = R \vec r$ $\hat{=}$ 3×3 Matrix R



$R_{3,\varphi}$

- Erhaltung von Winkel und Norm:

$$\Big(\underbrace{\langle \vec r, \vec s \rangle}_{\text{eukl. SP}} = \langle R \vec r, R \vec s \rangle \overset{!}{=} \langle \vec r, R^T R \vec s \rangle \Big)$$

- $R^T R \overset{!}{=} \mathbb{1}_3$

- Orientierungstreue:

$$\det R = 1$$

→ Menge der 3D Rotationen

$$= \{ R \in M(3\times 3, \mathbb{R}) \mid \det R = 1,\ R^T R = \mathbb{1}_3 \}$$

$$= SO(3)$$

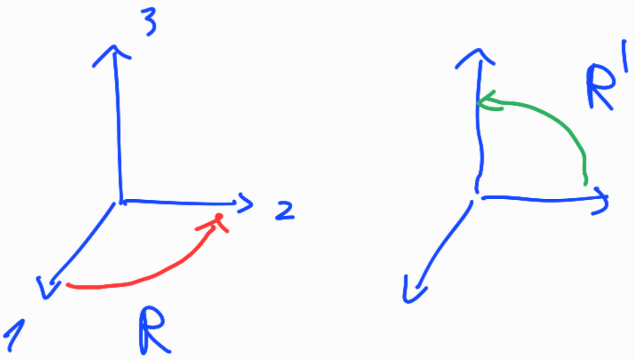
↑ spezielle, ↳ orthogonal

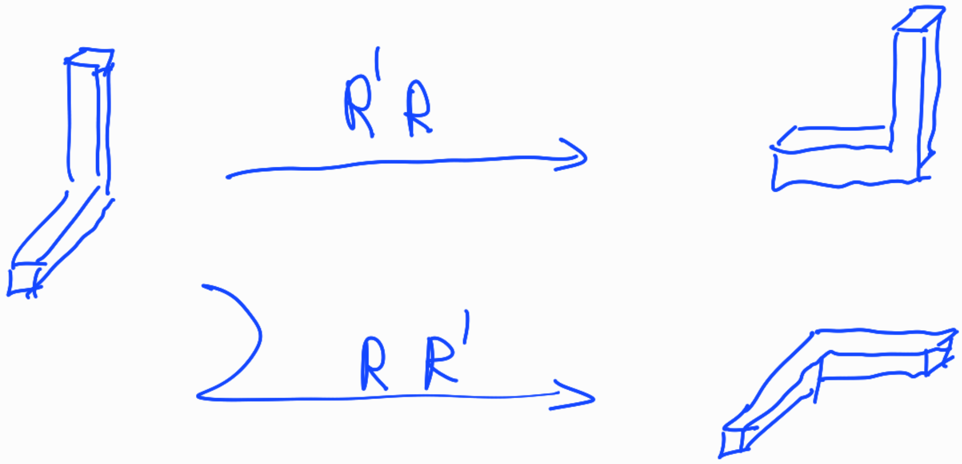
SO(3) bildet Gruppe: (bzgl. Matrix multipl.)

- abgeschlossen: $R, R' \in SO(3) \rightarrow RR' \in SO(3)$
- $\mathbb{1} \in SO(3)$
- $R(R'R'') = (RR')R''$ ✓
- $R \in SO(3) \rightarrow R^{-1} \in SO(3)$ ✓

nicht abelsch!

Bsp:





$RR' \neq R'R$

SO(3) Gruppe und auch "kontinuierliche Menge in 3 Parametern" ($\vec{n}$, $\varphi \to R_{\vec{n},\varphi}$)

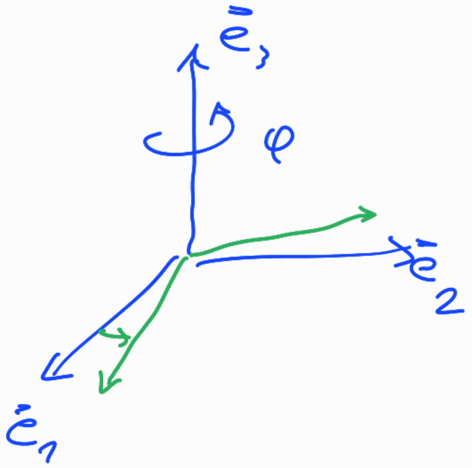
$\Rightarrow$ 3-dim Mannigfaltigkeit

$\Rightarrow$ SO(3) ist Lie-Gruppe (~1875)

$\to$ Struktur der Gruppe wesentlich bestimmt durch "infinitesimale" Rotationen $R \simeq \mathbb{1} \in SO(3)$

• $R_{3,\varphi} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Rotat. um $\bar{e}_3$, Winkel φ



$$\underset{|\varphi| \ll 1}{=} \mathbb{1}_3 + \varphi \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{=: I_3}$$

Erzeugen von $R_{3,\varphi}$

$$I_3 := \frac{\partial}{\partial \varphi} R_{3,\varphi} \Big|_{\varphi = 0}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \varphi} R_{3,\varphi} \Big|_{\varphi_0} = \frac{\partial}{\partial \varphi} \underbrace{R_{3,\varphi+\varphi_0}} \Big|_{\varphi = 0}$$

$$= \underbrace{\frac{\partial}{\partial \varphi} R_{3,\varphi} \Big|_{\varphi=0}}_{I_3} R_{3,\varphi_0} = I_3 R_{3,\varphi_0}$$

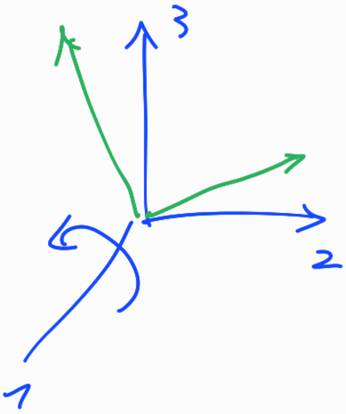
d.h. $\frac{\partial}{\partial \varphi} R_{3,\varphi} \overset{!}{=} I_3 R_{3,\varphi}$ $\qquad (\dot{y} = a y)$

$\qquad\qquad\qquad\qquad\downarrow$

$\qquad\qquad\qquad y(t) = y_0 e^{at}$

$$\rightarrow \boxed{R_{3,\varphi} = e^{I_3 \varphi}}$$

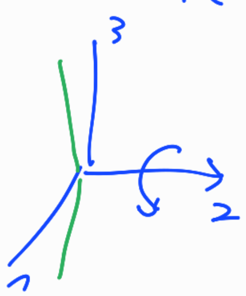
- $$R_{1,\varphi} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & -\sin\varphi \\ 0 & \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}$$



$$\underset{|\varphi| \ll 1}{=} \mathbb{1}_3 + \varphi \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}_{=: I_1}$$

$$R_{1,\varphi} = e^{I_1 \varphi}$$

- $$R_{2,\varphi} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & 0 & \sin\varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\varphi & 0 & \cos\varphi \end{pmatrix} = \mathbb{1}_3 + \varphi \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{=: I_2}$$



$$R_{2,\varphi} = e^{I_2 \varphi}$$

→ Rotation um Achse $\vec{u}$, $|\vec{u}| = 1$

Winkel φ:

$$R_{\vec{u},\varphi} = e^{\vec{u} \cdot \vec{I} \varphi}, \quad \vec{I} = \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix}$$

mit $$\vec{u} \cdot \vec{I} = u_1 I_1 + u_2 I_2 + u_3 I_3 = \begin{pmatrix} 0 & n_3 & -n_2 \\ -n_3 & 0 & n_1 \\ n_2 & -n_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

- $\{I_1, I_2, I_3\}$ bilden VR V der infinitesimalen Rotationen der $SO(3)$

V mit $[\ ,\ ]$-Verknüpfung bilden <u>Lie-Algebra</u> der Lie-Gruppe $SO(3)$.

$\Rightarrow \mathfrak{so}(3)$

$\Rightarrow$ Kommutatorrelationen in $\mathfrak{so}(3)$ bestimmen Struktur der $SO(3)$!

$$\underline{\underline{[I_1, I_2]}} \overset{!}{=} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\overset{!}{=} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \underline{\underline{I_3}}$$

geometrische Deutung?