

Zusammenfassung: Wigner-Eckart-Theorem

(2018) 10.01.05 Z

Clebsch-Gordan-Reihe:

$$D_{m, m'}^{(j_1)}(R) D_{m_2, m'_2}^{(j_2)}(R) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_m \sum_{m'} \langle m_1, m_2 | j, m \rangle \langle m'_1, m'_2 | j', m' \rangle \times D_{m, m'}^{(j)}(R)$$

Def. von Tensor -

$$\hat{D}^{\dagger}(R) \hat{T}_q^{(k)} \hat{D}(R) = \sum_{q'=-k}^k D_{q, q'}^{(k)*}(R) \hat{T}_{q'}^{(k)}$$

Algebraische Version, (via infinitesimaler Rotation):

$$[\hat{J}_z, \hat{T}_q^{(k)}] = \hbar q \hat{T}_q^{(k)}$$

$$[\hat{J}_{\pm}, \hat{T}_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \hat{T}_{q \pm 1}^{(k)}$$

Clebsch-Gordan-Reihe für Tensoren:

$$\hat{T}_q^{(k)} = \sum_{q_1, q_2} \langle k_1, k_2, q_1, q_2 | k, q \rangle \hat{X}_{q_1}^{(k_1)} \hat{Z}_{q_2}^{(k_2)}$$

Wigner-Eckart-Theorem:

$$\langle d', j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle = \langle j, k; m, q | j, k; j', m' \rangle \frac{\langle \alpha, j' || \hat{T}^{(k)} || \alpha, j \rangle}{\sqrt{2j+1}}$$

Geometrie

Dynamik

4. Symmetrien in der Quanten-Mechanik (Sakurai, Kap. 4)

Symmetrien 1

S1

4.1 Symmetrien, Erhaltungssätze, Entartungen

4.1.1 Symmetrien in klassischer Physik:

Falls $\mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i)$ invariant unter $q_i \rightarrow q_i + \delta q$ (S1.1)

Euler-Lagrange-Gl:

$$\Rightarrow 0 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) \quad (S1.2)$$

kanonischer Impuls erhalten:

$$\Rightarrow \frac{dp_i}{dt} = 0 \quad (S1.3)$$

Hamiltonsche Formulierung:

Falls $H(q_i, p_i)$ invariant unter $q_i \rightarrow q_i + \delta q$ (S1.4)

Hamiltonsche Bewegungsgleichung:

$$\Rightarrow 0 = - \frac{\partial H}{\partial q_i} = \frac{\partial p_i}{\partial t} = (S1.3) \quad (S1.5)$$

4.1.2 Symmetrien in d. Quantenmechanik:

Schreibe infinitesimale Version als:

Sei H invariant unter \mathcal{J} :

Heisenberg's Bewegungsgleichung:

Beispiele:

\hat{G} -Eigenkets bleiben unter Zeitentwicklung \hat{G} -Eigenkets:

\mathcal{J} sei unitärer Operator ("Symmetrie-Op.")

$$\mathcal{J} = 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} G \quad (G = \text{hermitesch}) \quad (S2.1)$$

$$\mathcal{J}^{-1} H \mathcal{J} = H \Rightarrow [G, H] = 0 \quad (S2.2)$$

$$\frac{dG}{dt} = \frac{i}{\hbar} [G, H] = 0 \quad G \text{ ist erhalten} \quad (S2.3)$$

Invarianz unter $\left\{ \begin{array}{l} \text{Translationen} \\ \vdots \end{array} \right. : \quad G = \left\{ \begin{array}{l} \hat{p} \\ \hat{J} \end{array} \right. \quad (S2.4)$

Sei $\hat{G} |g', t_0\rangle = g' |g', t_0\rangle$ $\hat{U} = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$
 dann $\hat{G} \hat{U} |g, t_0\rangle = \hat{U} \hat{G} |g, t_0\rangle = g' \hat{U} |g, t_0\rangle$ $[\hat{G}, \hat{U}] = 0$ (S2.5)

4.1.3 Entartungen:

$\hat{S}|n\rangle$ ist auch Energie-Eigenket mit gleichem Eigenwert:

$$\text{Sei } [H, \hat{S}] = 0 \text{ und } H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad \begin{matrix} \text{§ 3.3} \\ \text{(§ 3.1)} \end{matrix}$$

$$H(\hat{S}|n\rangle) \stackrel{(\text{§ 3.1})}{=} \hat{S}H|n\rangle = E_n \hat{S}|n\rangle \quad (\text{§ 3.2})$$

Falls $\langle n | \hat{S} | n \rangle \neq 0$ sind $|n\rangle$ und $\hat{S}|n\rangle$ "entartet"

Beispiel: Rotationen

$$\text{Sei } [\hat{D}(R), H] = 0 \Rightarrow [\hat{J}, \hat{H}] = 0, [\hat{J}^2, H] = 0 \quad (\text{§ 3.3})$$

Eigenbasis v. H, \hat{J}_z, \hat{J}^2 :

$|n, j, m\rangle$ sind alle entartet

Rotation mischt entartete Basisvektoren:

$$\hat{D}(R) |n, j, m\rangle = \sum_{m'} |n, j, m'\rangle \hat{D}_{m'm}^{(j)}(R) \quad (\text{§ 3.4})$$

zB: Zentralpotential:

$$\hat{V} = V(\hat{r}) + V_{LS}(\hat{r}) \hat{L} \cdot \hat{S} : (2j+1)\text{-fache Entartung}$$

zusätzliches E-oder

bricht Entartung, verursacht $(2j+1)$ -fache Energie-Aufspaltung
(Details: Kapitel 5)

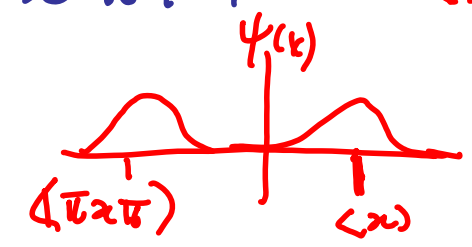
4.2 Diskrete Symmetrien: Parität (=Rauminversion) (Sakurai, 4.2)

4.2.1 Definition v. unitärem Paritätsop. $\hat{\pi}$:

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{P} \hat{\pi} |\alpha\rangle, \text{ mit } \langle \alpha | \hat{\pi}^\dagger \hat{x} \hat{\pi} |\alpha\rangle \equiv -\langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle \quad (S4.1)$$

gilt für alle $|\alpha\rangle$:

$$\Rightarrow \hat{\pi}^\dagger \hat{x} \hat{\pi} = -\hat{x}$$



$$(S4.2)$$

$\hat{\pi}^{-1} = \hat{\pi}^\dagger, \Rightarrow$
 $\hat{\pi} \hat{\pi}^\dagger = 1 :$

$$\Rightarrow \hat{x} \hat{\pi} = -\hat{\pi} \hat{x} \quad (\hat{x}, \hat{\pi} \text{ anti-vertauschen}) \quad (S4.3)$$

Ortseigenket $|\bar{x}'\rangle$:

$$\hat{x} \hat{\pi} |\bar{x}'\rangle \stackrel{(S4.3)}{=} -\hat{\pi} \hat{x} |\bar{x}'\rangle = -\bar{x}' \hat{\pi} |\bar{x}'\rangle \quad (S4.4)$$

$$\Rightarrow \hat{\pi} |\bar{x}'\rangle = e^{i\delta} |-\bar{x}'\rangle \quad \left[\begin{array}{l} \text{beliebiger Phasefaktor} \\ \text{per Konvention } = 1 \end{array} \right] \quad (S4.5)$$

nochmalige Anwendung:

$$\hat{\pi}^2 |\bar{x}'\rangle = \hat{\pi} \hat{\pi} |\bar{x}'\rangle = \hat{\pi} |-\bar{x}'\rangle = |\bar{x}'\rangle \quad (S4.6)$$

$\hat{\pi}$ ist hermitesch,

$$\Rightarrow \hat{\pi}^2 = 1 \Rightarrow \hat{\pi} = \hat{\pi}^{-1} = \hat{\pi}^\dagger \quad (S4.7)$$

mit Eigenwerten ± 1 :

$$\Rightarrow \lambda_\pi^2 = 1 \Rightarrow \lambda_\pi = \pm 1 \quad (S4.8)$$

4.2.2 Impuls:

Forderung:

① Translation+Parität =
Parität +(-Translation)

Operator-Identität:

$$\hat{\pi} \hat{T}(d\vec{x}') \equiv \hat{T}(-d\vec{x}') \hat{\pi} \quad (55.1)$$

für infinitesimale

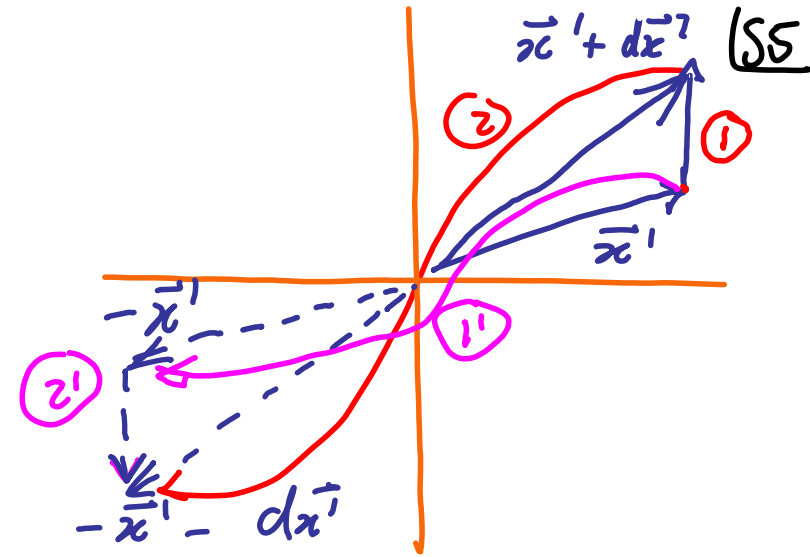
$$\hat{\pi} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}' \right) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}' \right) \hat{\pi} \Rightarrow \hat{\pi}^\dagger \hat{p} \hat{\pi} = -\hat{p} \quad (55.2)$$

⇒ $\vec{p}, \hat{\pi}$ anti-vertauschen:

$$\hat{\pi} \hat{p} = -\hat{p} \hat{\pi}$$

(55.3)

$$\Rightarrow \hat{\pi}^\dagger \hat{p} \hat{\pi} = -\hat{p} \quad (55.4)$$



4.2.3 Drehimpuls:

Check:

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} \Rightarrow [\hat{\pi}, \hat{L}] = 0 \quad (55.5)$$

$$\hat{\pi} (\hat{r} \times \hat{p}) = -\hat{r} \times (\hat{\pi} \hat{p}) = (-1)^2 (\hat{r} \times \hat{p}) \hat{\pi} \checkmark$$

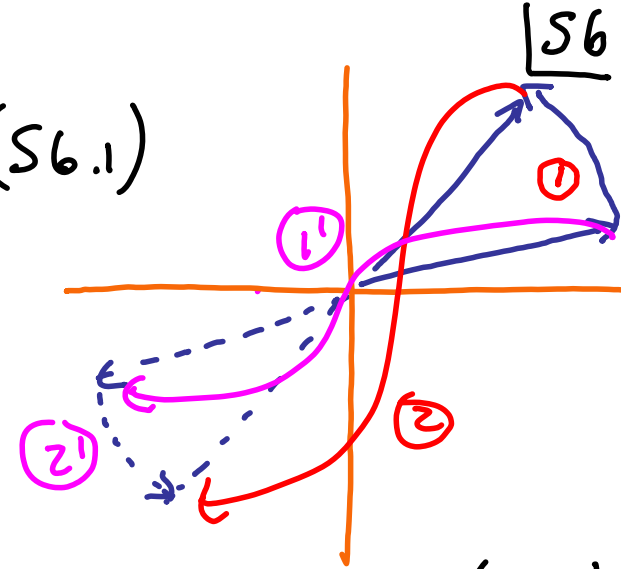
4.2.4 Rotationen

für 3D Rotationen gilt:

$$R^{(2)} R^{(1)} = R^{(1')} R^{(2')} \quad (S6.1)$$

Fordere dasselbe

$$\hat{\pi} \hat{D}(R) = \hat{D}(R) \hat{\pi} \quad (S6.2)$$



für infinitesimale

$$\hat{\pi} \left(1 - i \frac{\epsilon}{\hbar} \vec{n} \cdot \hat{J} \right) = \left(1 - i \frac{\epsilon}{\hbar} \vec{n} \cdot \vec{J} \right) \hat{\pi} \quad (S6.3)$$

$\hat{\pi}$ und \hat{J} vertauschen:

$$[\hat{\pi}, \hat{J}] = 0 \quad (S6.4) \Rightarrow \hat{\pi}^\dagger \vec{J} = \vec{J} \hat{\pi} \quad (S6.5)$$

das gilt insbesondere auch für Spin:

$$[\hat{\pi}, \hat{S}] = 0, \quad \hat{\pi}^\dagger \vec{S} = \vec{S} \hat{\pi} \quad (S6.6)$$

Definitionen:

"Polarvektoren" sind ungerade unter Parität (\hat{x}, \hat{p})

"Axial-" (oder "Pseudo-)Vektoren sind gerade unter Parität (\vec{J})

"Skalare" sind gerade unter Parität $(\vec{S} \cdot \vec{L})$

"Pseudoskalare sind ungerade unter Parität $(\vec{S} \cdot \vec{x})$

4.2.5 Wellenfunktionen: Betrachte spinloses Teilchen: $\psi_\alpha(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \alpha \rangle$ (57)

WF von paritätsinvertiertem Ket: $\langle \vec{x} | \hat{\pi} | \alpha \rangle \stackrel{(54.5)}{=} \langle -\vec{x} | \alpha \rangle = \psi_\alpha(-\vec{x})$ (57.1)

$|\alpha\rangle$ sei Paritätseigenket: $\hat{\pi} | \alpha \rangle \stackrel{(54.8)}{=} \pm | \alpha \rangle$ (57.2)

entsprechende WF $\langle -\vec{x} | \alpha \rangle = \langle \vec{x} | \hat{\pi} | \alpha \rangle = \pm \langle \vec{x} | \alpha \rangle$ (57.3)

ist "gerade/ungerade" unter Parität:

$$\psi_\alpha(-\vec{x}) = \pm \psi_\alpha(\vec{x}) \quad (57.4)$$

Beispiel: Kugelflächenfunktionen:

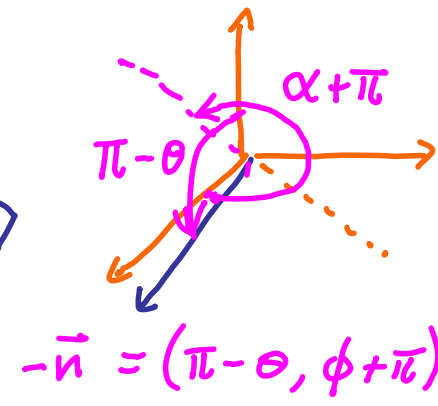
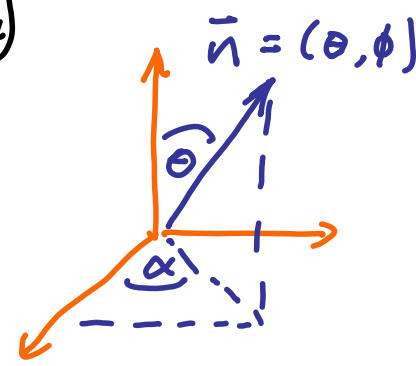
$$Y_l^m(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \phi)$$

(folgt aus expliziter Form von Y_l^m)

⇒ alle Mitglieder des Multiplets haben dieselbe Parität:

$$\langle \vec{n} | \hat{\pi} | l m \rangle = \langle -\vec{n} | l m \rangle = (-1)^l \langle \vec{n} | l m \rangle$$

$$\hat{\pi} | l m \rangle = (-1)^l | l m \rangle$$



4.2.5 Theorem

Sei $[\hat{H}, \hat{\pi}] = 0$. Dann sind die nicht-entarteten Energie-Eigenkets auch Paritäts-Eigenkets. § 8.1

Beweis:

Gegeben: $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, $|n\rangle$ nicht entartet.

Betrachte Paritäts-Eigenket,
mit Eigenwerten ± 1 :

$$|n_{\pm}\rangle \equiv \frac{1}{2}(1 \pm \hat{\pi})|n\rangle \quad (\text{denn } \hat{\pi}^2 = 1) \quad (S8.2)$$

$$\text{check: } \hat{\pi}|n_{\pm}\rangle = \frac{1}{2}(\hat{\pi} \pm 1)|n\rangle = \pm |n_{\pm}\rangle \quad (S8.3)$$

$|n_{\pm}\rangle$ ist auch
Energie-Eigenket,
mit demselben
 $|n\rangle$

$$\hat{H} \frac{1}{2}(1 \pm \hat{\pi})|n\rangle = \frac{1}{2}(1 \pm \hat{\pi}) \hat{H}|n\rangle = E_n |n_{\pm}\rangle \quad (S8.4)$$

$$\text{Aber } |n\rangle \text{ ist nicht-entartet: } \Rightarrow |n\rangle = e^{i\delta_{\pm}} |n_{\pm}\rangle \quad (S8.5)$$

$\Rightarrow |n\rangle$ ist Paritäts-Eigenket (siehe S8.3), mit Eigenwerten ± 1 . □

Bemerkung:

Für schwache Wechselwirkung gilt "Paritätsverletzung",
 $[\hat{H}, \hat{\pi}] \neq 0$, denn \hat{H} hängt zB ab von $\vec{S} \cdot \vec{p}$.

Beispiel:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad [\hat{H}, \hat{\pi}] = 0, \quad \text{aber } \hat{\pi} \hat{p} = -\hat{p} \hat{\pi} \quad \boxed{59}$$

also $[\hat{p}, \hat{\pi}] \neq 0 \Rightarrow |\bar{p}\rangle$ nicht $\hat{\pi}$ -Eigenket

Konsistent mit Theorem, denn $|\bar{p}\rangle$ und $|- \bar{p}\rangle$ sind entartet.

$\hat{\pi}$ -Eigenkets:

$$|\bar{p}_{\pm}\rangle = |\bar{p}\rangle \pm |- \bar{p}\rangle$$

Check:

$$\hat{\pi} |\bar{p}_{\pm}\rangle = |- \bar{p}\rangle \pm |\bar{p}\rangle = \pm |\bar{p}_{\pm}\rangle$$

Wellenfunktionen:

$$\psi_{\pm}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \bar{p}_{\pm} \rangle = e^{i \frac{\bar{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} \pm e^{-i \frac{\bar{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} \propto \begin{cases} \cos \bar{p} \cdot \vec{x} / \hbar \\ \sin \bar{p} \cdot \vec{x} / \hbar \end{cases}$$

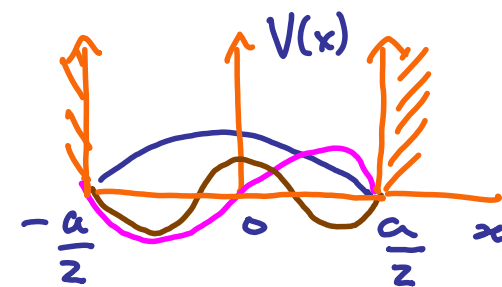
Beispiel:

Unendlich tiefer Topf:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \forall |x| \leq a/2 \\ \infty & \text{ansonsten} \end{cases}$$

Wellenfunktionen sind Paritätseigenfktn:

$$\psi_n(x) \propto \begin{cases} \cos(n\pi x/a) \\ \sin(n\pi x/a) \end{cases} = \begin{matrix} + \\ - \end{matrix} \psi_n(-x) \quad \begin{cases} \text{für } n = \text{ungerade} \\ \text{für } n = \text{gerade} \end{cases}$$



Beispiel:

Doppemuldenpotential- selber lesen (Sakurai, Abschnitt 4.2)

4.2.6 Paritätsauswahlregel:

Matrixelemente von Paritäts-ungeraden Operatoren zwischen zwei Paritätseigenzuständen sind nur dann $\neq 0$, wenn diese unterschiedliche Parität haben.

Beweis:

\hat{A} sei Paritäts-ungerade, $\hat{\pi} \hat{A} \hat{\pi}^{-1} = -\hat{A}$ (S10.1)

und $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ seien zwei Paritätseigenkets, mit

$\hat{\pi} |\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\alpha\rangle, \hat{\pi} |\beta\rangle = \varepsilon_\beta |\beta\rangle, \varepsilon_\alpha, \varepsilon_\beta = \pm 1.$ (S10.2)

Dann:

$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \langle \beta | \hat{\pi}^{-1} \hat{\pi} \hat{A} \hat{\pi}^{-1} \hat{\pi} | \alpha \rangle$
(S10.2) (S10.1) (S10.2)

$= \varepsilon_\beta \langle \beta | (-\hat{A}) | \alpha \rangle \varepsilon_\alpha$

$\Rightarrow 0 = (1 + \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta) \langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle$ (S10.3)

\Rightarrow entweder $\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = 0$, oder $\varepsilon_\alpha = -\varepsilon_\beta$ (S10.4) \square .

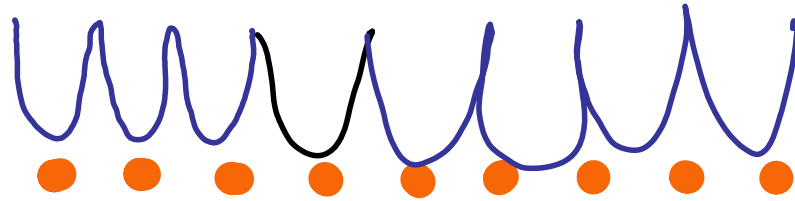
Bereits bekannt aus der Wellenmechanik:

$\int d\vec{x} \psi_\beta^*(\vec{x}) \hat{x} \psi_\alpha(\vec{x}) = 0$ (S10.5)

falls ψ_α und ψ_β dieselbe Parität haben. ✓

4.3 Gittersymmetrie als diskrete Symmetrie: selber lesen (Sakurai, 4.3)

§11



$$V(x) = V(x+a)$$

(Gitterpotenzial invariant unter Gitterverschiebungen)

$$\hat{T}(a) \hat{H} \hat{T}^\dagger(a) = \hat{H}$$

Wellenfunktionen haben die Form:

$$\langle x|k\rangle = e^{ikx} u_k(x)$$

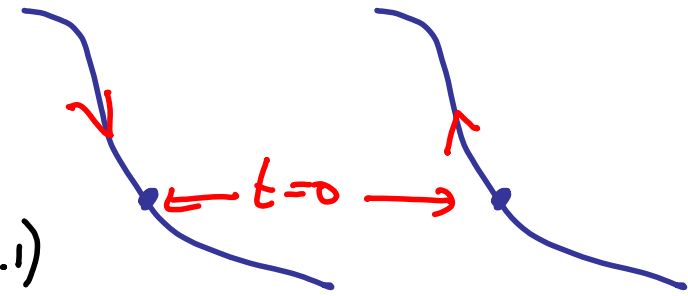
mit $u_k(x+a) = u_k(x)$

4.4 Zeitumkehrinvarianz: "Bewegungsumkehr" (Sakurai,

4.4.1 Klassisch:

Wenn $\vec{x}(t)$ Lösung ist von

$$m \ddot{\vec{x}}(t) = -\vec{\nabla} V[\vec{x}(t)] \quad (S12.1)$$



Stop bei $t=0$
und Umkehr

Newton 2:

dann ist $\vec{x}(-t)$ auch eine Lösung:

$$\dot{\vec{x}}(t) \equiv \partial_t \vec{x}(t)$$

$$\ddot{\vec{x}}(t) = \partial_t^2 \vec{x}(t)$$

$$m \partial_t^2 \vec{x}(-t) = (-t)^2 m \ddot{\vec{x}}(-t) = -\vec{\nabla} V(\vec{x}(-t)) \quad (S12.2)$$

Maxwell-Gl, und

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0, \quad \vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (S12.3)$$

Lorentz-Kraft:

$$\vec{F} = e(\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B}) \quad (S12.4)$$

sind invariant unter:

$$t \rightarrow -t, \quad \vec{E} \rightarrow \vec{E}, \quad \vec{B} \rightarrow -\vec{B}, \quad (S12.5)$$

$$\rho \rightarrow \rho, \quad \vec{j} \rightarrow -\vec{j}, \quad \vec{v} \rightarrow -\vec{v} \quad (S12.6)$$

4.4.2 Schrödinger-Gl:

$$i\hbar \underbrace{\partial_t \psi(\vec{x}, t)}_{\dot{\psi}(\vec{x}, t)} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}, t) \quad \boxed{S13} \quad (S13.1)$$

$\psi(\vec{x}, -t)$ ist keine Lösung, wegen 1.ste Ordnung Zeitabltnng:

$$\partial_t \psi(\vec{x}, -t) = -\dot{\psi}(\vec{x}, -t) \quad (S13.2)$$

$\psi^*(\vec{x}, -t)$ ist eine Lösung von (S13.1):

zunächst: (S13.1)*

$$-i\hbar \underbrace{\partial_t \psi^*(\vec{x}, t)}_{\dot{\psi}^*(\vec{x}, t)} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{x}) \right] \psi^*(\vec{x}, t) \quad (S13.3)$$

also ist $\psi^*(\vec{x}, -t)$
eine Lösung von (S13.1):

$$i\hbar \partial_t \underbrace{\psi^*(\vec{x}, -t)}_{(S13.2)} = -i\hbar \dot{\psi}^*(\vec{x}, -t) \quad (S13.4)$$
$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{x}) \right] \underbrace{\psi^*(\vec{x}, -t)}_{(S13.3)}$$

Expliziter Check mittels
Energie-Eigenket:

$$\psi(\vec{x}, t) = u_n(\vec{x}) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad \psi^*(\vec{x}, -t) = u_n^*(\vec{x}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (S13.5)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V \right) u_n(\vec{x}) = E_n u_n(\vec{x}) \quad i\hbar \partial_t \psi(\vec{x}, t) = E_n \psi(\vec{x}, t), \quad \underline{i\hbar \partial_t \psi^*(\vec{x}, -t)} = E_n \psi^*(\vec{x}, -t)$$

4.4.3 Bemerkungen zu Symmetrie-Operatoren

Falls \mathcal{J} unitär ist:
($\mathcal{J}^\dagger = \mathcal{J}^{-1}$)

Allgemein reicht es allerdings, zu fordern:

was auch folgende Möglichkeit zuläßt:

4.4.4 Definition einer "anti-unitären" Transformation:

mit

und

Betrachte Symmetrie-Operation:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{J}|\alpha\rangle = |\tilde{\alpha}\rangle$$

$$|\beta\rangle \rightarrow \mathcal{J}|\beta\rangle = |\tilde{\beta}\rangle$$

$$\boxed{\text{S14}} \\ (514.1)$$

$$\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \mathcal{J}^\dagger \mathcal{J} | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle \quad (514.2)$$

$$|\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle| = |\langle \beta | \alpha \rangle| \quad (514.3)$$

$$\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | \beta \rangle \quad (514.4)$$

$$|\alpha\rangle \rightarrow \hat{\Theta}|\alpha\rangle, \quad |\beta\rangle \rightarrow \hat{\Theta}|\beta\rangle$$

$$\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^* \quad (514.5)$$

$$\hat{\Theta}(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^* \hat{\Theta}|\alpha\rangle + c_2^* \hat{\Theta}|\beta\rangle \quad (514.6)$$

folgende "Zerlegung" :
ist immer möglich:

$$\overset{\text{anti-unitärer Operator}}{\Theta} = \overset{\text{unitärer}}{U} \overset{\text{"komplex-Konjugator"}}{K}$$

(S15.1) S15

Wirkung von K:

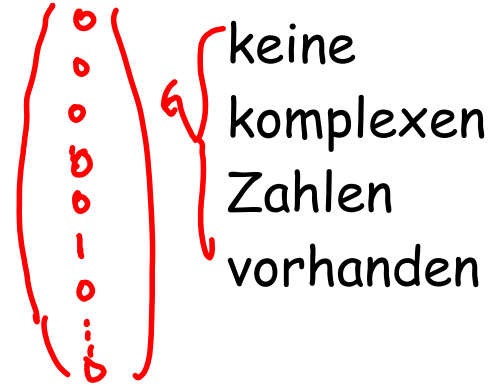
$$K(c|\alpha\rangle) = c^* K|\alpha\rangle \quad (S15.2)$$

Entwicklung von $|\alpha\rangle$
in einer Basis:

$$|\alpha\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\alpha\rangle \xrightarrow{K} |\tilde{\alpha}\rangle = \sum_a \langle a|\alpha\rangle^* K|a\rangle = \sum_a \langle a|\alpha\rangle^* |a\rangle \quad (S15.3)$$

Für Basiskets gilt:

$$K|a\rangle = |a\rangle, \text{ denn } |a\rangle :=$$



Wirkung von K ist basisabhängig:

Basis-transformation: $|\gamma\rangle = \sum_a U_{\gamma a} |a\rangle$

In $|a\rangle$ -Basis:

$$K|\gamma\rangle = \sum_a U_{\gamma a}^* |a\rangle \neq |\gamma\rangle \quad (S15.4)$$

In $|\gamma\rangle$ -Basis:

$$K|\gamma\rangle = |\gamma\rangle \quad (S15.5)$$

Check: erfüllt $\Theta = UK$

die Eigenschaften eines anti-unitären Operators?

(S14.6) ?

$$\begin{aligned} \Theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) &\stackrel{(S15.2)}{=} c_1^* UK|\alpha\rangle + c_2^* UK|\beta\rangle \\ &= c_1^* \Theta|\alpha\rangle + c_2^* \Theta|\beta\rangle \quad \checkmark (S14.6) \end{aligned}$$

(S14.5) ?

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\Theta} |\tilde{\alpha}\rangle \stackrel{(S15.3)}{=} \sum_a \langle a|\alpha\rangle^* \underbrace{UK|a\rangle}_{|u\rangle} = \sum_a \langle \alpha|a\rangle |u\rangle \quad (S16.1)$$

Berechne Wirkung auf Bra lieber via Wirkung auf Ket:
(Θ^\dagger nicht definiert)

$$|\beta\rangle \xrightarrow{\Theta} |\tilde{\beta}\rangle = \sum_a \langle a|\beta\rangle^* |u\rangle$$

$$DK \rightarrow \langle \tilde{\beta}| = \sum_a \langle a|\beta\rangle \langle a|u^\dagger \quad (S16.2)$$

Skalarprodukt:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle &= \sum_{aa'} \langle a'|\beta\rangle \underbrace{\langle a'|u^\dagger \cdot |u\rangle}_{\delta_{a'a}} \langle \alpha|a\rangle \quad (S16.3) \\ &= \sum_a \underbrace{\langle \alpha|a\rangle}_{L=1} \langle a|\beta\rangle = \langle \alpha|\beta\rangle = \langle \beta|\alpha\rangle^* \quad \checkmark (S14.5) \quad \square \end{aligned}$$

4.4.5 Zeitumkehr-Operator

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{Zeitumkehr-}} \hat{\Theta} |\alpha\rangle \quad \text{anti-unitärer} \quad \boxed{S17} \quad (S17.1)$$

Zeitumgekehrter Zustand
(genauer: Bewegungsumgekehrter Zustand)

[Wir erwarten:

$$\hat{\Theta} |\vec{p}\rangle = e^{i\delta} |-\vec{p}\rangle, \quad \vec{J} \xrightarrow{\hat{\Theta}} -\vec{J}, \quad \text{etc.}] \quad (S17.2)$$

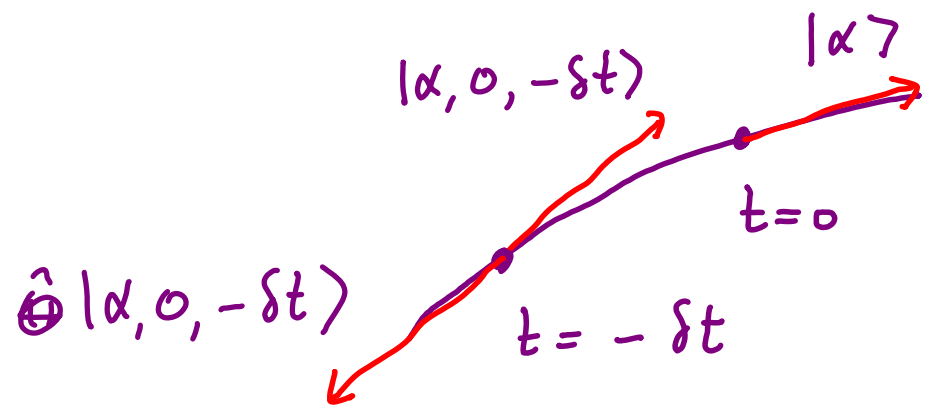
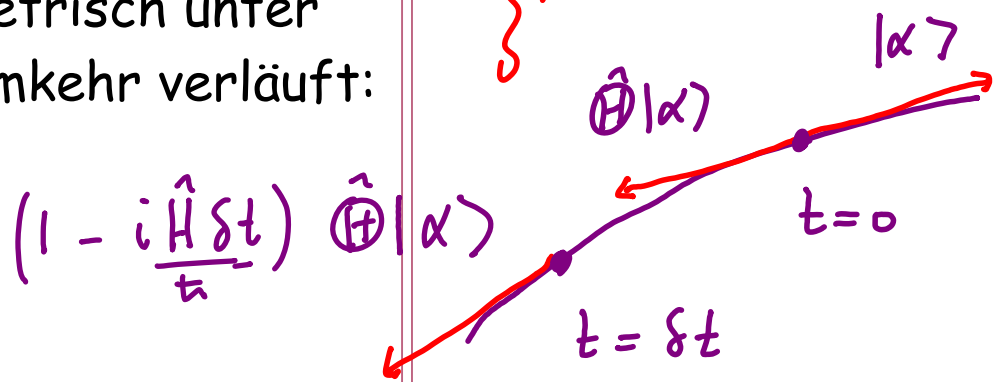
Zeitentwicklung von $|\alpha\rangle$:

$$|\alpha, t_0=0, t = \delta t\rangle = \left(1 - i \frac{\hat{H}}{\hbar} \delta t\right) |\alpha\rangle$$

Zeitentwicklung von zeitumgekehrtem

$$\begin{aligned} \left(1 - i \frac{\hat{H}}{\hbar} \delta t\right) \hat{\Theta} |\alpha\rangle &\stackrel{!}{=} \hat{\Theta} |\alpha, t_0=0, t = -\delta t\rangle \\ &= \hat{\Theta} \left(1 - i \frac{\hat{H}(-\delta t)}{\hbar}\right) |\alpha\rangle \end{aligned} \quad (S17.3)$$

Forderung, falls Bewegung symmetrisch unter Zeitumkehr verläuft:



(S17.3) gilt für beliebige Kets:

\hat{H} kann nicht unitär sein:

Für Energieeigenket:

Für freies Teilchen würde das bedeuten:

(S18.2) würde liefern:

Postulat:

$\hat{\Theta}$ ist anti-unitär.
" $\hat{U} \hat{K}$

Folgerung: falls Bewegung symmetrisch unter Zeitumkehr abläuft, gilt:

$$\Rightarrow -i \hat{H} \hat{\Theta} | \rangle = \hat{\Theta} i \hat{H} | \rangle \quad (S18.1) \quad \underline{S18}$$

$$\text{Wäre } \hat{\Theta}^\dagger = \hat{\Theta}^{-1}, \text{ dann folgte aus (S18.1): } -\hat{H} \hat{\Theta} = \hat{\Theta} \hat{H} \quad (S18.2)$$

$$\hat{H} \hat{\Theta} |n\rangle = - \hat{\Theta} \underbrace{\hat{H} |n\rangle}_{E_n |n\rangle} = -E_n \hat{\Theta} |n\rangle \quad (S18.3)$$

$$E_p = p^2/2m \Rightarrow -E_p = -p^2/2m \quad \text{ist auch Eigenenergie!}$$

Das ist unsinnig, denn Spektrum wäre nicht von unten begrenzt.

$$\hat{\Theta}^{-1} \frac{\hat{p}^2}{2m} \hat{\Theta} = -p^2/2m \quad \text{anstatt erwartetem } \hat{\Theta}^{-1} \hat{p} \hat{\Theta} = -\vec{p}$$

$$\text{dann: } \hat{\Theta} i \hat{H} | \rangle \stackrel{(S14.6)}{=} -i \hat{\Theta} \hat{H} | \rangle \stackrel{(S18.1)}{=} -i \hat{H} \hat{\Theta} | \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{\Theta} \hat{H} = \hat{H} \hat{\Theta}} \quad (S18.4)$$

Bemerkung:

$$\langle \beta | \hat{\Theta} | \alpha \rangle = (\langle \beta |) \cdot (\hat{\Theta} | \alpha \rangle) \tag{S19.1}$$

und nicht $(\langle \beta | \hat{\Theta}) \cdot | \alpha \rangle$, denn $\langle \beta | \hat{\Theta}$ ist nicht

Formale Eigenschaften von Matrixelementen linearer Operatoren:

$$\text{Sei } |\tilde{\alpha}\rangle = \hat{\Theta} |\alpha\rangle, \quad |\tilde{\beta}\rangle = \hat{\Theta} |\beta\rangle \tag{S19.2}$$

Identität:

$$\text{dann gilt: } \langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \hat{\Theta} \hat{A} \hat{\Theta}^{-1} | \tilde{\beta} \rangle \tag{S19.3}$$

Beweis:

$$\text{Sei } |\gamma\rangle \equiv \hat{A}^\dagger |\beta\rangle \xleftrightarrow{DK} \langle \gamma | = \langle \beta | \hat{A} \tag{S19.4}$$

$$\Rightarrow \langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle \stackrel{(19.4)}{=} \langle \gamma | \alpha \rangle = \langle \alpha | \gamma \rangle \stackrel{(S14.5)}{=} \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\gamma} \rangle$$

$$= \langle \tilde{\alpha} | \hat{\Theta} \hat{A}^\dagger \hat{\Theta}^{-1} \hat{\Theta} | \beta \rangle$$

$$\hat{\Theta} | \gamma \rangle = \hat{\Theta} \hat{A}^\dagger | \beta \rangle \tag{19.4}$$

□.

Für hermitesche

$$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle \stackrel{(S19.3)}{=} \langle \tilde{\alpha} | \hat{\Theta} \hat{A} \hat{\Theta}^{-1} | \tilde{\beta} \rangle \tag{S19.5}$$

A ist "gerade/ungerade"
unter Zeitumkehr, falls

$$\hat{\Theta} \hat{A} \hat{\Theta}^{-1} = \pm \hat{A} \quad (S20.1)$$

S20

entsprechende

$$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle \stackrel{(S19.5)}{=} \langle \tilde{\alpha} | \hat{\Theta} \hat{A} \hat{\Theta}^{-1} | \tilde{\beta} \rangle \stackrel{(S20.1)}{=} \pm \langle \tilde{\alpha} | \hat{A} | \tilde{\beta} \rangle \quad (S20.2)$$

und Erwartungswerte:

$$\langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = \pm \langle \tilde{\alpha} | \hat{A} | \tilde{\alpha} \rangle \quad (S20.3)$$

Beispiel: Impuls

$$\text{Forderung: } \langle \alpha | \vec{p} | \alpha \rangle = - \langle \tilde{\alpha} | \vec{p} | \tilde{\alpha} \rangle \quad (S20.4)$$

(S20.1)
⇒

$$\hat{\Theta} \vec{p} \hat{\Theta}^{-1} = -\vec{p}$$

(S20.5)

Eigenwertgleichung:

$$\Rightarrow \vec{p} \hat{\Theta} | \vec{p} \rangle = - \hat{\Theta} \vec{p} | \vec{p} \rangle = -\vec{p} \hat{\Theta} | \vec{p} \rangle \quad (S20.6)$$

Folglich identifizieren wir:

$$\hat{\Theta} | \vec{p} \rangle = | -\vec{p} \rangle \quad (S20.7)$$

(S20.7)

Analoges Beispiel:
Ortsoperator

Forderung: $\langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \hat{x} | \tilde{\alpha} \rangle$ (S21.1)

(S20.1) $\Rightarrow \hat{\Theta} \hat{x} \hat{\Theta}^{-1} = + \hat{x}, \quad \hat{\Theta} | \tilde{\alpha} \rangle = | \alpha \rangle$ (S21.2)

(S21.3)

$$\hat{\Theta} [\hat{x}_i, \hat{p}_j] \hat{\Theta}^{-1} \hat{\Theta} | \rangle = \hat{\Theta} i \hbar \delta_{ij} | \rangle$$

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

$$\hat{\Theta} [\hat{J}_i, \hat{J}_j] \hat{\Theta}^{-1} \hat{\Theta} | \rangle = \hat{\Theta} i \hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \hat{\Theta}^{-1} \hat{\Theta} | \rangle$$

$$[-\hat{J}_i, -\hat{J}_j] \hat{\Theta} | \rangle = i \hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \hat{\Theta} | \rangle \quad \checkmark$$

$$\hat{\Theta} \hat{D}(R) \hat{\Theta}^{-1} \equiv \hat{D}(R) \hat{\Theta} \Rightarrow \hat{\Theta} (1 - i \phi \vec{J} \cdot \vec{n}) \hat{\Theta}^{-1} = 1 - i \phi \vec{J} \cdot \vec{n}$$

\Rightarrow Forderung $i \hat{\Theta} \hat{J} \hat{\Theta}^{-1} = -i \vec{J} \cdot \vec{n} \hat{\Theta} \hat{\Theta}^{-1}$ \square

Invarianz der
Vertauschungsrelation:

Analog: Invarianz der
Drehimpulsrelationen
erfordert

$$\hat{\Theta} \hat{J}_i \hat{\Theta}^{-1} \equiv - \hat{J}_i \quad (S21.4)$$

(S21.4) folgt auch aus
Zeitumkehrsymmetrie
von Rotationen: