

Kapitel IV

Darstellungen von Gruppen in der Quantenmechanik

Wir wenden die in Kapitel III eingeführten Begriffe (diskrete und kontinuierliche Transformationsgruppen und ihre unitären Darstellungen) auf die Quantenmechanik an. In §A untersuchen wir, wie man den Transformationen \mathcal{T} aus Kapitel I (Verschiebungen, Drehungen, Wechsel des Inertialsystems) gewisse Abbildungen T auf dem Zustandsraum eines physikalischen Systems zuordnen kann. Es wird in §B gezeigt, dass für die T 's nur lineare oder antilineare Operatoren in Frage kommen. Daraus ergeben sich die Transformationen der Observablen des physikalischen Systems (§C). In §D betrachten wir schließlich den wichtigen Fall, dass die Transformationen \mathcal{T} eine Gruppe bilden, die von den Operatoren T „dargestellt“ wird. Weil die Zustandsvektoren in der Quantenmechanik nur bis auf Phasenfaktoren definiert sind, können hier auch so genannte „projektive“ Darstellungen in Frage kommen (§E).

Im Fall von Lie-Gruppen sind wir in Kapitel III auf gewisse Vertauschungsrelationen gestoßen, die zwischen den Erzeugenden der Symmetrietransformationen bestehen. Darauf stützt sich eine wichtige Etappe der Überlegungen in diesem Kapitel: Ausgehend von allgemeinen Annahmen über die Transformationsgruppe, die man auf ein physikalisches System anwenden kann, liest man an deren Darstellungen ab, welche Zustandsräume \mathcal{H} für das System in Frage kommen und welche Gleichungen seine zeitliche Entwicklung bestimmen. Seine physikalischen Observablen sind in der Regel Hermite'sche Operatoren (Energie, Drehimpuls etc.), deren Kommutatoren im Rahmen einer unitären Darstellung durch die Strukturkonstanten der Symmetriegruppe festgelegt sind.

Wir wiederholen zur Vorbereitung einige Ergebnisse und Schreibweisen. In Kapitel I, §C.2 wurde bereits über die Wirkung einer Symmetrioperation auf den Zustandsvektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ eines Systems gesprochen. Betrachten wir als Beispiel eine Translation $\mathcal{T}(\mathbf{b})$ um den Vektor \mathbf{b} . Der Ket $|\psi\rangle$ beschreibe ein System S in einem Bezugssystem mit Ursprung O und Koordinatenachsen xyz (Abb. 1). Führen wir ein zweites Bezugssystem ein,

das durch eine Verschiebung um den Vektor $-\mathbf{b}$ aus O hervorgeht. Von dessen Ursprung O' aus betrachtet, hat S praktisch dieselben Eigenschaften wie im ersten Bezugssystem, nur seine räumlichen Koordinaten sind anders: Sie sind um den Vektor $+\mathbf{b}$ verschoben. Sei $|\psi'\rangle$ der normierte Ket im Zustandsraum \mathcal{H} , der das System S bezüglich des Ursprungs O' beschreibt. Die Aufgabe besteht darin, $|\psi'\rangle$ als Funktion von $|\psi\rangle$ anzugeben. Diese Abbildung werden wir F nennen:

$$|\psi'\rangle = |F(\psi)\rangle \quad (\text{IV.1})$$

Wir verwenden diese Notation, weil nicht von vornherein klar ist, dass F eine lineare Abbildung ist. Sobald wir uns auf diesen Fall beschränken dürfen, kehren wir zu der Schreibweise T für die Abbildungen auf dem Zustandsraum zurück: $|\psi'\rangle = T|\psi\rangle$.

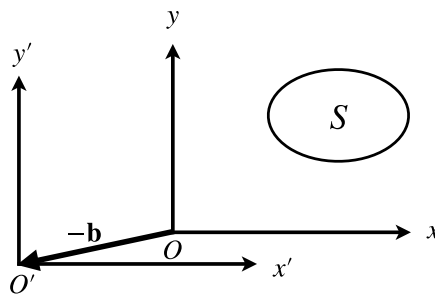


Abb. 1 Das zweite mit Ursprung O' geht aus dem ersten Bezugssystem durch eine Verschiebung um $-\mathbf{b}$ hervor. Bezogen auf O' , erscheint S um den Vektor $+\mathbf{b}$ verschoben.

Diese Überlegungen kann man in ähnlicher Weise auf andere Transformationen erweitern: etwa auf Drehungen, Punktspiegelungen, Wechsel des Inertialsystems (aus der Galilei- oder Poincaré-Gruppe). In jedem Fall wird es eine Abbildung wie in Gl. (IV.1) geben, die die zugehörigen Transformation F des Zustandsvektors $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ liefert. Wir stehen dann wieder vor der Frage, welche Eigenschaften F aus physikalischen Gründen haben muss. Dies wird in Abschnitt §A diskutiert.

Bemerkungen

- Die normierten Kets $|\psi\rangle$ und $|\psi'\rangle$ sind im Grunde nur bis auf einen Phasenfaktor definiert. Es handelt sich bei F also um eine Abbildung zwischen Klassen von Kets, deren Elemente durch eine Phasenänderung auseinander hervorgehen, also auf einem sogenannten projektiven Hilbertraum. In den folgenden Überlegungen nehmen wir an, dass in jeder Klasse ein Repräsentant mit einer festen Phase gewählt worden ist. Diese Mehrdeutigkeit könnte man vermeiden, indem man mit Projektoren $|\psi\rangle\langle\psi|$ und $|\psi'\rangle\langle\psi'|$ arbeitet.
- Wir haben uns hier auf den „passiven“ Standpunkt gestellt (s. Kapitel I, §A.3), in dem ein gegebenes System in verschiedenen Koordinaten beschrieben wird. Die Leser werden sich erinnern (Kapitel I, §A.3), dass man im „aktiven“ Standpunkt die Koordinatenachsen festhält, während das System „bewegt“ wird. An Stelle von Abb. 1 würde man z. B. S' als Bild von S unter einer Verschiebung finden. Das verschobene System wird dann in dem Koordinatensystem mit Ursprung O durch einen anderen Ket $|\psi'\rangle$ beschrieben.

A Physikalische Eigenschaften einer Transformation

Wir beginnen mit der offensichtlichen Feststellung, dass für jede Transformation F aus Gl. (IV.1) auch die Umkehrabbildung existieren muss: In dem Beispiel einer Verschiebung kann man natürlich vom verschobenen Ursprung O' nach O zurückkehren. Wir haben dann

$$|\psi\rangle = F^{-1}(|\psi'\rangle) \quad (\text{IV.2})$$

wobei die Abbildung F^{-1} für alle $|\psi'\rangle$ definiert ist. Andernfalls würde eine fundamentale Asymmetrie zwischen den Systemen bestehen, die durch die Zustände $|\psi\rangle$ bzw. $|\psi'\rangle$ beschrieben sind.

Als nächstes dürfen die Postulate für Messungen in der Quantenmechanik nicht auf Widersprüche führen. Betrachten wir dazu eine Observable A des Systems. (Dies ist ein Hermite'scher Operator, dessen Eigenvektoren den ganzen Zustandsraum \mathcal{H} aufspannen.) Seien $|\varphi_i\rangle$ die Eigenvektoren von A mit den Eigenwerten λ_i :

$$A|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle \quad (\text{IV.3})$$

Wir werden der Einfachheit halber annehmen, dass das Spektrum von A diskret und nicht entartet ist. Befindet sich das physikalische System im Zustand $|\varphi_i\rangle$, ist man sicher, bei einer Messung von A das Ergebnis λ_i zu erhalten. Nach Anwenden der Transformation werde das System durch den Zustand

$$|\varphi'_i\rangle = |F(\varphi_i)\rangle \quad (\text{IV.4})$$

beschrieben. Wir bezeichnen mit A' den Operator, der diese $|\varphi'_i\rangle$ als Eigenvektoren mit denselben Eigenwerten hat:

$$A'|\varphi'_i\rangle = \lambda_i|\varphi'_i\rangle \quad (\text{IV.5})$$

Welche physikalische Bedeutung hat A' ? Es kommt auf dasselbe hinaus, ob wir (vor der Messung) das System bezüglich der ursprünglichen Koordinaten durch $|\varphi_i\rangle$ beschreiben oder durch sein Bild $|\varphi'_i\rangle$ nach Anwendung von \mathcal{T} auf die Koordinaten. Es liefern beide Kets mit Sicherheit den Wert λ_i , wenn man A bzw. A' misst. Die Observable A' beschreibt also dieselbe Messung wie A (die Wechselwirkung des Systems mit denselben Messinstrumenten), sie tut dies lediglich von einem anderen Bezugssystem aus. Ganz allgemein wird beim Übergang von A nach A' diejenige Transformation \mathcal{T} auf die Instrumente angewendet, die der Abbildung F des Systems von $|\psi\rangle$ nach $|\psi'\rangle$ entspricht. Wir werden in §C.1 die Beziehungen zwischen A nach A' klären.

Befindet sich das System nun in einer beliebigen normierten Superposition $|\psi\rangle$ von Zuständen $|\varphi_i\rangle$, so beträgt die Wahrscheinlichkeit, das Messergebnis λ_i zu erhalten

$$\mathcal{P}(\lambda_i) = |\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2 \quad (\text{IV.6})$$

wobei in dem ersten Bezugssystem gerechnet wird. Bezüglich der transformierten Koordinaten hätten wir

$$\mathcal{P}(\lambda_i) = |\langle\varphi'_i|\psi'\rangle|^2 \quad (\text{IV.7})$$

Diese beiden Wahrscheinlichkeiten müssen übereinstimmen:

$$|\langle \varphi'_i | \psi' \rangle| = |\langle \varphi_i | \psi \rangle| \quad (\text{IV.8})$$

Dieses Ergebnis kann man auf einen beliebigen, normierten Ket $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ verallgemeinern: Man kann ihn als Eigenvektor zu Observablen $A_1, A_2 \dots$ mit Eigenwerten $\lambda_1, \lambda_2 \dots$ auffassen (wenn diese etwa einen vollständigen Satz kommutierender Observablen (v.S.k.O.) bilden). Mit denselben Überlegungen erhalten wir die Bedingung

$$|\langle \varphi' | \psi' \rangle| = |\langle F(\varphi) | F(\psi) \rangle| = |\langle \varphi | \psi \rangle| \quad (\text{IV.9})$$

Die Symmetrieabbildung F muss also den *Betrag des Skalarprodukts* zwischen normierten Zuständen erhalten. Man sagt dann häufig auch, dass F die „physikalischen Eigenschaften des Systems erhält“.

Hätten wir mit Projektoren argumentiert, wie in der Bemerkung auf S. 118, so käme man auf Gl. (IV.9) durch die Forderung $\text{tr}\{|\varphi'_i\rangle\langle\varphi'_i|\psi'\rangle\langle\psi'|\} = \text{tr}\{|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle\langle\psi|\}$. (Diese Spuren sind reell und positiv.)

B Der Satz von Wigner

Ein wichtiger Satz schränkt nun die möglichen Abbildungen F beträchtlich ein:

Satz von Wigner Eine bijektive Transformation F , die den Betrag des Skalarprodukts zwischen normierten Kets erhält, ist entweder eine lineare unitäre Abbildung oder eine antilineare* unitäre Abbildung. (Im zweiten Fall nennt man F auch „anti-unitär“.)

Antilineare* Abbildung

Eine Transformation T ist antilinear, wenn für alle $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle \in \mathcal{H}$ und komplexe Skalare λ, μ gilt:

$$T(\lambda|\varphi_1\rangle + \mu|\varphi_2\rangle) = \lambda^* T|\varphi_1\rangle + \mu^* T|\varphi_2\rangle \quad (\text{IV.10})$$

Derartige Abbildungen werden im Anhang A über die Zeitumkehr genauer vorgestellt.

Den **Beweis** des Satzes von Wigner führen wir in fünf Schritten.

(i) Sei $\{|u_i\rangle, i = 1, 2 \dots N\}$ eine Orthonormalbasis von \mathcal{H} . Dann ist die Menge der

$$|u'_i\rangle = |F(u_i)\rangle \quad (\text{IV.11})$$

auch eine Orthonormalbasis von \mathcal{H} . In der Tat sind gemäß der Voraussetzung an F die Vektoren $\{|u'_i\rangle, i = 1, 2 \dots\}$ orthonormiert,

$$|\langle u'_i | u'_j \rangle| = |\langle u_i | u_j \rangle| = \delta_{ij} \quad (\text{IV.12a})$$

Daraus folgt

$$\langle u'_i | u'_j \rangle = \delta_{ij} \quad (\text{IV.12b})$$

weil das Normquadrat $\langle u'_i | u'_i \rangle$ reell und positiv ist. Außerdem bilden die $|u'_i\rangle$ eine vollständige Basis. Wäre dem nicht so, gäbe es einen Ket $|\psi'\rangle$ orthogonal zu allen $|u'_i\rangle$. Die Umkehrabbildung angewendet, erhielten wir mit $|\psi\rangle = |F^{-1}(\psi')\rangle$ einen Ket orthogonal zu allen $|u_i\rangle$. Dies ist ein Widerspruch, weil die $\{|u_i\rangle\}$ eine vollständige Basis bilden.

(ii) Betrachten wir die Wirkung von F auf die Kets

$$\begin{aligned} |\varphi_i\rangle &= \frac{|u_1\rangle + |u_i\rangle}{\sqrt{2}}, \quad i = 2, \dots, N \\ |\varphi'_i\rangle &= |F(\varphi_i)\rangle = F\left(\frac{|u_1\rangle + |u_i\rangle}{\sqrt{2}}\right) \end{aligned} \quad (\text{IV.13})$$

Das Skalarprodukt $\langle u'_k | \varphi'_i \rangle$ muss für $k = 1, i$ den Betrag $|\langle u_k | \varphi_i \rangle| = 1/\sqrt{2}$ haben und sonst verschwinden. Deswegen können wir den Bildvektor wie folgt darstellen:

$$|\varphi'_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\alpha_i} |u'_1\rangle + e^{i\beta_i} |u'_i\rangle), \quad \alpha_i, \beta_i \in [0, 2\pi] \quad (\text{IV.14})$$

Wir führen eine neue Basis $\{|v'_i\rangle\}$ ein, deren Kets proportional zu den $|u'_i\rangle$ sind:

$$\begin{aligned} |v'_1\rangle &= |u'_1\rangle \\ |v'_i\rangle &= e^{i(\beta_i - \alpha_i)} |u'_i\rangle, \quad i = 2, \dots, N \end{aligned} \quad (\text{IV.15})$$

Wir erhalten die einfachere Form

$$F\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle + |u_i\rangle)\right) = \frac{e^{i\alpha_i}}{\sqrt{2}}(|v'_1\rangle + |v'_i\rangle) \quad (\text{IV.16})$$

mit einem einzigen Phasenfaktor $e^{i\alpha_i}$.

(iii) Sei $|\chi\rangle$ ein normierter Ket

$$|\chi\rangle = \sum_i x_i |u_i\rangle \quad (\text{IV.17})$$

wobei die x_i *reelle Zahlen* sind; so einen Zustand nennen wir einen „reellen Ket“. (Dieser Begriff hat keine absolute Bedeutung, weil er von der gewählten Basis abhängt.) Wir nehmen weiter an, dass

$$x_1 \neq 0 \quad (\text{IV.18})$$

gilt. Entwickeln wir das Bild unter der Abbildung F in die neue Basis $|v'_i\rangle$

$$|\chi'\rangle = |F(\chi)\rangle = \sum_i g_i |v'_i\rangle \quad (\text{IV.19})$$

mit

$$|g_i| = |\langle v'_i | \chi' \rangle| = |\langle u_i | \chi \rangle| = |x_i| = \pm x_i \quad (\text{IV.20})$$

und bilden das Skalarprodukt mit dem in (ii) eingeführten Ket $|\varphi_i\rangle$:

$$|\langle \varphi_i | \chi \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} |x_1 + x_i| = |\langle \varphi'_i | \chi' \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} |g_1 + g_i| \quad (\text{IV.21})$$

Wir erhalten somit

$$|x_1 + x_i| = |g_1 + g_i| \quad (\text{IV.22})$$

Betrachten wir dazu die Abb. 2: In der komplexen Ebene müssen die Vektoren, die g_1 und g_2 darstellen, parallel oder antiparallel sein, so wie es für die reellen Zahlenvektoren x_1, x_2 der Fall ist. Weil wir nämlich $|x_i| = |g_i|$ haben (durch die Kreise angedeutet), wäre andernfalls Gl. (IV.22) nicht erfüllt. Es ergibt sich also ein reelles Verhältnis für die komplexen

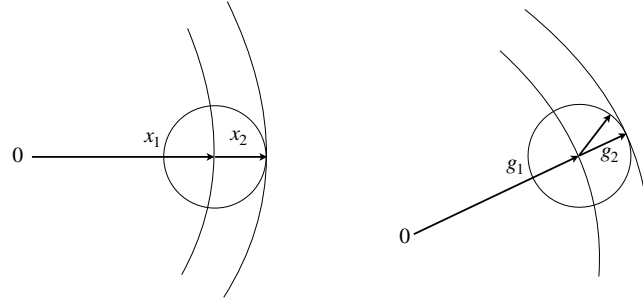


Abb. 2 In der komplexen Ebene werden die reellen Zahlen x_1, x_2 und ihre Summe $x_1 + x_2$ durch horizontale, also parallele Vektoren dargestellt. Die komplexen Zahlen g_1, g_2 liegen auf Kreisen mit demselben Radius wie x_1 bzw. x_2 . Auch für den Betrag der Summe muss gelten $|g_1 + g_2| = |x_1 + x_2|$ [Gl. (IV.22)]: die einzige Lösung ist, dass g_1 und g_2 parallel sind.

Koeffizienten:

$$\frac{g_i}{g_1} = \frac{x_i}{x_1} \quad (\text{IV.23})$$

Weil dies für alle $i = 2, \dots, N$ gilt, ergibt sich die Darstellung

$$|\chi'\rangle = e^{i\beta} \sum_i x_i |v'_i\rangle \quad (\text{IV.24})$$

mit

$$e^{i\beta} = \frac{g_1}{x_1} = \frac{g_2}{x_2} = \dots \quad (\text{IV.25})$$

Um Gl. (IV.24) zu erhalten, mussten wir voraussetzen, dass in $|\chi\rangle$ der Koeffizient $x_1 \neq 0$ ist. Dies stellt keine wesentliche Einschränkung dar. Wäre $x_1 = 0$, würden wir in unseren

Überlegungen $|u_1\rangle$ durch den ersten Basisvektor austauschen, der mit einem Koeffizienten ungleich Null in $|\chi\rangle$ auftritt.

Wir fassen zusammen: Mit den gewählten Orthonormalbasen $\{|u_i\rangle\}$ und $\{|v'_i\rangle\}$ bildet F jeden „reellen“ Ket auf einen reellen Ket ab (bis auf eine globale Phase).

(iv) Im vorletzten Schritt betrachten wir die Transformation eines beliebigen („komplexen“) normierten Zustandsvektors

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i c_i |u_i\rangle \\ |\psi'\rangle &= |F(\psi)\rangle = \sum_i d_i |v'_i\rangle \end{aligned} \quad (\text{IV.26})$$

Für die Koeffizienten des Bildes d_i muss wieder gelten

$$|d_i| = |c_i| \quad (\text{IV.27})$$

Bilden wir das Skalarprodukt mit einem beliebigen reellen Ket $|\chi\rangle$ aus Punkt (iii), erhalten wir

$$|\langle\chi|\psi\rangle| = \left| \sum_i x_i c_i \right| = |\langle\chi'|\psi'\rangle| = \left| \sum_i x_i d_i \right| \quad (\text{IV.28})$$

Wir wählen zunächst $x_1 = 1/\sqrt{2} = x_2$ und $x_3 = x_4 = \dots = 0$, und es ergibt sich

$$|d_1 + d_2| = |c_1 + c_2| \quad (\text{IV.29})$$

Abbildung 3 stellt diese Gleichung in der komplexen Ebene dar: links die Vektoren c_1 , c_2 und ihre Summe $c_1 + c_2$, wobei die Kreise die Längen der Vektoren angeben, rechts Kreise mit denselben Radien und zwei mögliche Lösungen für d_2 . Entweder gilt

$$\frac{d_2}{d_1} = \frac{c_2}{c_1} \quad (\text{IV.30a})$$

und dann gehen d_1 und d_2 durch eine Rotation (Multiplikation mit einem Phasenfaktor) aus c_1 und c_2 hervor. Oder wir haben

$$\frac{d_2}{d_1} = \left(\frac{c_2}{c_1} \right)^* \quad (\text{IV.30b})$$

In diesem Fall muss man die Vektoren nach der Drehung noch an einer Achse parallel zu d_1 spiegeln (in Abb. 3 gestrichelt).

Wir können für $|\chi\rangle$ auch die folgenden Koeffizienten wählen (alle nicht angegebenen sind Null): $x_1 = x_3 = 1/\sqrt{2}$ oder aber $x_2 = x_3 = 1/\sqrt{2}$. Im ersten Fall erhalten wir

$$|d_1 + d_3| = |c_1 + c_3| \quad (\text{IV.31})$$

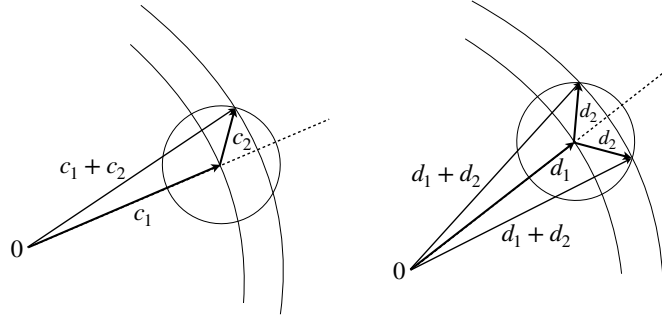


Abb. 3 In der komplexen Ebene sind die Zahlen c_1 , c_2 und ihre Summe durch Vektoren dargestellt (links). Nach einer Transformation werden aus ihnen die Zahlen d_1 , d_2 , die dieselben Beträge wie c_1 , c_2 haben (durch Kreise angedeutet). Auch die Summen $c_1 + c_2$ und $d_1 + d_2$ müssen dieselben Beträge haben [Gl. (IV.29)]. Dafür gibt es zwei Lösungen: entweder gehen die d 's aus den c 's durch eine Drehung hervor (oberer Vektor für d_2), oder man muss d_2 nach der Drehung noch an einer Achse parallel zu d_1 spiegeln (gestrichelte Linie, unterer Vektor).

Und dafür gibt es wieder zwei mögliche Lösungen: entweder

$$\frac{d_3}{d_1} = \frac{c_3}{c_1} \quad (\text{IV.32a})$$

oder

$$\frac{d_3}{d_1} = \left(\frac{c_3}{c_1} \right)^* \quad (\text{IV.32b})$$

In dieser Alternative muss dieselbe Wahl wie in Gl. (IV.30) getroffen werden, ansonsten ergäbe sich ein Widerspruch. Dividieren wir dazu die Gl. (IV.32a) durch (IV.30b) durcheinander. Die „Vermischung“ der Alternativen a) und b) würde ergeben

$$\frac{d_3}{d_2} = \frac{c_2^* c_1}{c_1^* c_3}$$

Das wäre nicht mit der Gleichung $|c_2 + c_3| = |d_2 + d_3|$ verträglich, die sich aus dem erwähnten reellen Ket $|\chi\rangle$ mit den Koeffizienten $x_2 = x_3 = 1/\sqrt{2}$ ergibt.

Die Argumentation können wir für $d_4, d_5 \dots$ fortsetzen und finden so zwei Möglichkeiten für die Abbildung F :

■ Entweder wird $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$ abgebildet auf

$$|F(\psi)\rangle = e^{i\delta} \sum_i c_i |v_i'\rangle \quad (\text{IV.33a})$$

mit denselben komplexen Koeffizienten c_i .

■ Oder aber wir haben

$$|F(\psi)\rangle = e^{i\delta} \sum_i c_i^* |v'_i\rangle \quad (\text{IV.33b})$$

mit den komplex konjugierten Koeffizienten c_i^* . In beiden Fällen hängt die reelle Phase δ im Allgemeinen von $|\psi\rangle$ ab. (Zum Beispiel ist $\delta = 0$ für $|\psi\rangle = |u_i\rangle$.)

Definiere nun T als die Transformation

$$T|\psi\rangle = e^{-i\delta(\psi)} |F(\psi)\rangle \quad (\text{IV.34})$$

die physikalisch äquivalent zur Abbildung F ist, weil die beiden sich nur um einen Phasenfaktor unterscheiden. Die Gleichungen (IV.33) zeigen, dass T entweder eine lineare Abbildung ist

$$T|\psi\rangle = T\left(\sum_i c_i |u_i\rangle\right) = \sum_i c_i T|u_i\rangle \quad (\text{IV.35a})$$

oder aber eine antilineare Abbildung

$$T|\psi\rangle = \sum_i c_i^* T|u_i\rangle \quad (\text{IV.35b})$$

gemäß der Definition (IV.10).

Wir erinnern, dass die $|v'_i\rangle$ eine Orthonormalbasis bilden. Aus den Gleichungen (IV.35) ist abzulesen, dass der Operator T in beiden Fällen die Norm von Kets erhält und auch ihre Skalarprodukte (bis auf eine komplexe Konjugation für antilineares T). Damit ist T unitär, d. h. $T^{-1} = T^\dagger$.

(v) Schließlich ist umgekehrt einfach zu überprüfen, dass lineare unitäre oder antilineare unitäre Abbildungen den Betrag des Skalarprodukts erhalten. Damit ist der Satz von Wigner für endlich-dimensionale Zustandsräume bewiesen. Wir werden ohne Beweis annehmen, dass er auch in unendlicher Dimension gilt. \square

C Transformation von Observablen

C.1 Konstruktion

Sei ein linearer (oder antilinear) Operator T gegeben, der die Transformation \mathcal{T} der Koordinaten (Drehung, Galilei-Transformation usw.) als Abbildung zwischen den Kets $|\psi\rangle$, $|\psi'\rangle$ eines Systems vor und nach der Transformation darstellt:

$$|\psi'\rangle = T|\psi\rangle \quad (\text{IV.36})$$

Wir nehmen die Diskussion aus §A wieder auf und fragen danach, wie die Observablen des Systems transformiert werden. Sei A ein (Hermite'scher) Operator, den man mit einem gegebenen Apparat (z. B. mit einem Stern-Gerlach-Magneten) messen kann. Was ist dann

der Operator A' , der diese Messung in einem anderen Koordinatensystem beschreibt? Oder, um die „aktive“ Perspektive einzunehmen: Wie ist in einem festen Koordinatensystem die Messung durch denjenigen Apparat zu beschreiben, der durch die Anwendung der Transformation \mathcal{T} entsteht (wenn z. B. ein Stern-Gerlach-Magnet gedreht worden ist)?

Wir hatten dazu in Gl. (IV.3) die Eigenzustände $|\varphi_i\rangle$ der Observablen A eingeführt:

$$A|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle \quad (\text{IV.37})$$

sowie die transformierten Kets

$$|\varphi'_i\rangle = T|\varphi_i\rangle \quad (\text{IV.38})$$

Für die transformierte Observable A' soll gelten

$$A'|\varphi'_i\rangle = \lambda_i|\varphi'_i\rangle \quad (\text{IV.39})$$

mit unveränderten Eigenwerten λ_i . Daraus folgt, weil T mit der reellen Zahl λ_i kommutiert (auch wenn T antilinear sein sollte):

$$\begin{aligned} A'T|\varphi_i\rangle &= \lambda_i T|\varphi_i\rangle = TA|\varphi_i\rangle \\ (T^{-1}A'T)|\varphi_i\rangle &= A|\varphi_i\rangle \end{aligned} \quad (\text{IV.40})$$

Wenn dies für alle Kets $|\varphi_i\rangle$ gelten soll und diese eine Basis bilden, fallen die Operatoren A und $T^{-1}A'T$ zusammen. Weil T unitär ist, erhalten wir schließlich

$$\boxed{A' = TAT^\dagger \quad \text{oder} \quad A = T^\dagger A'T} \quad (\text{IV.41})$$

Damit haben wir die gesuchten Beziehungen zwischen A und A' gefunden. Der Beweis überträgt sich auf den Fall, dass A ein mehrfach entartetes oder kontinuierliches Spektrum hat.

Bemerkung Wenn A mit T kommutiert, dann folgt aus Gl. (IV.41), dass $A' = A$ gilt. Eine derartige Observable nennt man *invariant* unter der Transformation \mathcal{T} . Die Spin-Komponente S_z eines Teilchens entlang einer z-Achse ist z. B. invariant unter allen Drehungen um diese Achse.

C.2 Physikalische Bedeutung

Die transformierte Observable A' ist so konstruiert, dass ihr Erwartungswert im transformierten Zustand $|\psi'\rangle$ derselbe wie der Erwartungswert von A vor der Transformation ist:

$$\langle\psi'|A'|\psi'\rangle = \langle\psi|T^\dagger(TAT^\dagger)T|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \quad (\text{IV.42})$$

Dies kann man mit Hilfe von zwei Transformationen veranschaulichen, nämlich eine des Systems $|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = T|\psi\rangle$ und eine des zu der Observablen A gehörenden Messapparats,

$A \mapsto A' = T A T^\dagger$. Für die Messung kommt es nur auf die relativen Verhältnisse von System und Messgerät an, und deswegen sind die Erwartungswerte in Gl. (IV.42) identisch, wenn man dieselbe Transformation T sowohl auf das System als auch auf das Messgerät anwendet.

Es stellen sich aber auch die Fragen: Wie ändert sich ein Erwartungswert unter der Transformation des Systems (dazu fixiere man besser das Messgerät)? Oder was misst man (am unveränderten System) mit einem verschobenen (gedrehten usw.) Messgerät? Betrachten wir dazu als Operator $A = \mathbf{R}$ die Position des Systems und sei $T = T(\mathbf{b})$ eine Verschiebung um den Vektor \mathbf{b} . Dann gilt für den „verschobenen“ Operator

$$\mathbf{R}' = T(\mathbf{b}) \mathbf{R} T^\dagger(\mathbf{b}) = \mathbf{R} - \mathbf{b} \quad (\text{IV.43a})$$

weil wir das Gerät um \mathbf{b} verschoben haben, das die Position vermisst, ohne das System zu bewegen. Verschiebt man dagegen das System, indem $T(\mathbf{b})$ auf $|\psi\rangle$ angewendet wird, und fragt nach seiner Position relativ zu einem fixen Laborsystem, so würde man berechnen

$$\langle \psi' | \mathbf{R} | \psi' \rangle = \langle \psi | T^\dagger(\mathbf{b}) \mathbf{R} T(\mathbf{b}) | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{R} | \psi \rangle + \mathbf{b} = \langle \mathbf{R} \rangle + \mathbf{b} \quad (\text{IV.43b})$$

Der Unterschied zwischen den beiden Situationen erklärt das Minuszeichen in Gl. (IV.43a), obwohl die Translation in beiden Fällen $T(\mathbf{b})$ ist. Ein ähnliches Verhalten entsteht bei einer Galilei-Transformation, die alle Geschwindigkeiten um \mathbf{v} erhöht: Man erhält den transformierten Geschwindigkeits- oder Impulsoperator durch Addition von $-\mathbf{v}$ bzw. $-\mathbf{M}\mathbf{v}$, was der Messung durch einen mit \mathbf{v} bewegten Beobachter am ursprünglichen System entspricht. Wir werden auf dieses Verhalten im Zusammenhang mit den Symmetrietransformationen (Drehungen) zurückkommen, die von dem Drehimpulsoperator erzeugt werden, s. Kapitel VIII, §A.1.

D Unitäre Darstellungen auf einem Zustandsraum

D.1 Wirkung einer Transformationsgruppe

Betrachten wir Transformationen \mathcal{T} , die eine Gruppe \mathcal{G} bilden. Jedem \mathcal{T} wird ein unitärer Operator T zugeordnet (nach dem Satz von Wigner linear oder antilinear), der auf dem Zustandsraum \mathcal{H} wirkt

$$|\psi'\rangle = T(\mathcal{T})|\psi\rangle, \quad |\psi\rangle = [T(\mathcal{T})]^\dagger |\psi'\rangle \quad (\text{IV.44})$$

Wir beschränken uns im Folgenden auf lineare T . In der Tat werden wir sehen, dass es für viele Fälle in der Quantenmechanik nicht nötig ist, antilineare Operatoren zu betrachten. Einen Sonderfall diskutieren wir in Anhang A, nämlich die Zeitumkehr.

Bilden die Transformationen eine Lie-Gruppe, so können die Operatoren T nicht antilinear sein, solange T in der Nähe des Einselements liegt. Um dies zu sehen, kann man (wie in Abschnitt §D.2) die Transformationen \mathcal{T} und T durch reelle Zahlentupel \mathbf{a} parametrisieren und $T(\delta\mathbf{a})$ für infinitesimales $\delta\mathbf{a}$ bis zur ersten Ordnung entwickeln, s. Gl. (IV.50), (IV.52). Dabei erhält man