Kapitel V

Symmetrien in der Quantenmechanik

V.1 Grundbegriffe über Symmetrien

In diesem Kapitel werden wir simultane Transformationen $\mathcal{T}$ der Zeitkoordinate und des Ortsvektors (bezüglich eines gegebenen Bezugssystems) und des Zustandsvektors eines physikalischen Systems

$$\mathcal{T}: \begin{cases} t \to t' & \text{(V.1a)} \\ \vec{r} \to \vec{r}\,' & \text{(V.1b)} \\ |\psi\rangle \to |\psi'\rangle & \text{(V.1c)} \end{cases}$$

betrachten, entsprechend einer Änderung des Gesichtspunkts auf das System.

V.1.1 Symmetrietransformationen

Eine Transformation der Art (V.1) heißt *Symmetrietransformation*, wenn sie die Naturgesetze invariant lässt.[26] Dabei ist die Bedeutung der „geometrischen“ Transformation (V.1b) intuitiv: das System wird z.B. verschoben oder gedreht, so dass sich seine Position ändert. Dann stellt Gl. (V.1c) die Transformation des Zustands dar, die aus der Änderung der Position folgt.

In der obigen Beschreibung wird von einer Verschiebung des physikalischen Systems im Raum unter der geometrischen Transformation: dabei handelt es sich um eine sog. *aktive Transformation*. Im Gegensatz bleibt bei einer *passiven Transformation* das physikalische System fest, während das Bezugs- und das Koordinatensystem, in denen es beschrieben wird, geändert wird. Beide Möglichkeiten führen zum gleichen Formalismus, wobei einer aktiven Transformation $\mathcal{T}$ die passive Transformation $\mathcal{T}^{-1}$ entspricht.

Wenn die Naturgesetze invariant bleiben, müssen unter einer Symmetrietransformation $\mathcal{T}$ insbesondere alle quadrierten Skalarprodukte $|\langle\chi|\psi\rangle|^2$ unverändert bleiben:

$$|\langle\chi'|\psi'\rangle|^2 = |\langle\chi|\psi\rangle|^2 \quad \forall|\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathscr{H}. \tag{V.2}$$

$|\langle\chi|\psi\rangle|^2$ stellt die Wahrscheinlichkeit (oder Wahrscheinlichkeitsdichte) für das Ergebnis einer Messung dar, die durch die Transformation definitionsgemäß nicht geändert werden darf.

Da $|\psi\rangle$ und $|\psi'\rangle$ Vektoren desselben Hilbert-Raums $\mathscr{H}$ sind, existiert ein Operator $\hat{\mathscr{S}}$ auf $\mathscr{H}$ derart, dass

$$|\psi'\rangle = \hat{\mathscr{S}}(\mathcal{T})|\psi\rangle$$

gilt, wobei die genaue Form von $\hat{\mathscr{S}}(\mathcal{T})$ von der Transformation $\mathcal{T}$ abhängt.

Laut dem Wigner[ab]-Theorem muss der Operator $\hat{\mathscr{S}}(\mathcal{T})$ entweder unitär oder antiunitär sein, um der Eigenschaft (V.2) zu genügen. Deshalb es ab jetzt mit $\hat{\mathcal{U}}(\mathcal{T})$ bezeichnet wird:

$$\boxed{|\psi'\rangle = \hat{\mathcal{U}}(\mathcal{T})|\psi\rangle \quad \text{mit} \quad \big[\hat{\mathcal{U}}(\mathcal{T})\big]^\dagger\hat{\mathcal{U}}(\mathcal{T}) = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}.} \tag{V.3}$$

[26] Genauer sollte man vielleicht nur von den Naturgesetzen reden, die für das Problem relevant sind.

[ab] E. P. Wigner, 1902–1995

Bemerkungen:

∗ Die einzige Symmetrietransformation der nichtrelativistischen Quantenmechanik, die auf den Hilbert-Raum $\mathscr{H}$ anhand eines antiunitären Operators wirkt, ist die *Zeitumkehr* $\mathcal{T}: t \to t' = -t$.

Unter der Wirkung der Zeitumkehr bleibt der Ortsoperator $\hat{\vec{r}}$ invariant, während der Impulsoperator $\hat{\vec{p}}$ zu $-\hat{\vec{p}}$ wird. Damit der fundamental Kommutator $[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = \mathrm{i}\hbar\delta_{jk}\hat{\mathbb{1}}$ invariant bleibt, soll $\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbb{1}}$ in $-\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbb{1}}$ transformiert werden, was auf die Antiunitarität hinweist.

∗ Neben den physikalisch anschaulichen (Symmetrie-)Transformationen der Art (V.1), bei denen die Zeit t oder der Ortsvektor $\vec{r}$ geändert wird, gibt es auch Transformationen, die nur auf den Zustandsvektor $|\psi\rangle$ des Systems wirken.

Ein triviales Beispiel davon ist die Multiplikation des Zustandsvektors durch einen konstanten Phasenfaktor $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$. Da diese Symmetrie immer vorliegt und keinen Einfluss auf die Physik hat, wird sie aber meistens nicht als Symmetrie erwähnt.

V.1.2 Infinitesimale Symmetrietransformationen

Die Klassen von Symmetrietransformationen $\mathcal{T}$, die in der Physik relevant sind, versehen mit der Verknüpfung von Transformationen, bilden allgemein jeweilige *Gruppen*, wie man bei den hiernach diskutierten räumlichen Translationen (Abschn. V.2) und Drehungen (Abschn. V.3) prüfen kann. Dementsprechend sollen die damit assoziierten Operatoren $\hat{\mathcal{U}}(\mathcal{T})$ auch eine Gruppe von Automorphismen des Hilbert-Raums des Systems bilden.[27]

Dabei wird zwischen „diskreten“ und „kontinuierlichen“ Symmetrien unterscheidet, wobei sich die Bezeichnungen eher auf die jeweiligen Symmetriegruppen beziehen. Beispielsweise sind die Zeitumkehr $t \to t' = -t$, die Raumspiegelung — eigentlich eine Punktspiegelung — $\vec{r} \to \vec{r}\,' = -\vec{r}$, oder Translationen um das Vielfache eines Vektors $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$, d.h. $\vec{r} \to \vec{r}\,' = \vec{r} + n\vec{a}$ mit $n \in \mathbb{Z}$ wie im Beispiel des Abschn. IV.3, diskrete Symmetrien.

Dagegen sind Raumtranslationen um eien beliebigen Vektor oder Drehungen um beliebige Winkel Beispiele von kontinuierlichen Symmetrien.[28] Bei den letzteren existieren sog. *infinitesimale Symmetrietransformationen*, d.h. Transformationen „in der Nähe“ der Identitätstransformation. Sei $\mathcal{T}(\varepsilon)$ eine solche infinitesimale Transformation, wobei $\varepsilon \in \mathbb{R}$ ein „kleiner“ Parameter ist. Dann kann der mit $\mathcal{T}(\varepsilon)$ assoziierte unitäre Operator auf $\mathscr{H}$, mit dessen Hilfe Zustandsvektoren transformiert werden, als

$$\hat{\mathcal{U}}\big(\mathcal{T}(\varepsilon)\big) = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} + \mathrm{i}\varepsilon\hat{T} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \tag{V.4}$$

geschrieben werden. Dabei ist der Operator $\hat{T}$ auf $\mathscr{H}$ der *Generator* der Transformationengruppe. Allgemeiner können mehrere reelle Parameter nötig sein, um Transformationen zu charakterisieren — z.B. drei Winkel für dreidimensionale Drehungen, wegen Drehungen in der Ebene nur einen Winkel erfordern. Dementsprechend hängt eine infinitesimale Transformation von $N \in \mathbb{N}$ Parametern $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N) \in \mathbb{R}^N$ ab, und es gibt N Generatoren:

$$\boxed{\hat{\mathcal{U}}\big(\mathcal{T}(\{\varepsilon_a\})\big) = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} + \mathrm{i}\sum_{a=1}^{N}\varepsilon_a\hat{T}_a + \mathcal{O}(\varepsilon_a^2).} \tag{V.5}$$

Die Kommutatoren $\big[\hat{T}_a, \hat{T}_b\big]$ mit $a, b \in \{1, \dots, N\}$ sind charakteristisch für die Transformationengruppe unter Betrachtung.

[27] Die Gruppe der Automorphismen $\big\{\hat{\mathcal{U}}(\mathcal{T})\big\}$ ist eine *lineare Darstellung* auf $\mathscr{H}$ der Transformationengruppe.
[28] Die zugehörigen Gruppen sind *Lie*[ac]*-Gruppen*.

[ac] S. Lie, 1842–1899

Genauer gilt

$$\boxed{[\hat{T}_a, \hat{T}_b] = \mathrm{i} \sum_c f_{abc} \hat{T}_c} \tag{V.6}$$

mit *Strukturkonstanten* f_{abc}, die charakteristisch für die Gruppe sind.(29)

Aus der hermiteschen Konjugation der Gl. (V.4),

$$\hat{\mathcal{U}}\big(\mathcal{T}(\varepsilon)\big)^\dagger = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} - \mathrm{i}\varepsilon\hat{T}^\dagger + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \tag{V.7}$$

folgt das Produkt

$$\hat{\mathcal{U}}\big(\mathcal{T}(\varepsilon)\big)^\dagger \hat{\mathcal{U}}\big(\mathcal{T}(\varepsilon)\big) = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} + \mathrm{i}\varepsilon(\hat{T} - \hat{T}^\dagger) + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

Die Anforderung $\hat{\mathcal{U}}\big(\mathcal{T}(\varepsilon)\big)^\dagger \hat{\mathcal{U}}\big(\mathcal{T}(\varepsilon)\big) = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}$ unabhängig von ε führt zur notwendigen Bedingung

$$\hat{T}^\dagger = \hat{T}$$

d.h. der Generator $\hat{T}$ ist ein hermitescher Operator. Dieser Beweis lässt sich einfach auf den Fall einer Transformationenengruppe mit mehreren Parametern verallgemeinern.

V.1.3 Transformation der Operatoren

Um eine Transformation (V.1) zu berücksichtigen, wird jedem Operator $\hat{A}$ auf dem Hilbert-Raum des Systems einen anderen Operator $\hat{A}'$ zugeordnet:

$$\hat{A} \to \hat{A}'. \tag{V.8a}$$

Dabei wird $\hat{A}'$ so definiert, dass die Matrixelemente von $\hat{A}$ im transformierten Zustand gleich den Matrixelementen von $\hat{A}'$ im „alten" Zustand sind:(30)

$$\langle\chi|\hat{A}'|\psi\rangle = \langle\chi'|\hat{A}|\psi'\rangle \quad \forall|\chi\rangle, |\psi\rangle. \tag{V.8b}$$

Aus dem Transformationsgesetz (V.3) für die Zustandsvektoren und der (Anti-)Unitarität des dabei auftretenden Operators $\hat{\mathcal{U}}(\mathcal{T})$ folgert man

$$\boxed{\hat{A}' = \hat{\mathcal{U}}(\mathcal{T})^\dagger \hat{A} \hat{\mathcal{U}}(\mathcal{T}).} \tag{V.9}$$

Im Fall einer infinitesimalen Transformation (V.5) liefert eine einfache Berechnung

$$\hat{A}' = \hat{\mathcal{U}}\big(\mathcal{T}(\{\varepsilon_a\})\big)^\dagger \hat{A} \hat{\mathcal{U}}\big(\mathcal{T}(\{\varepsilon_a\})\big) = \hat{A} - \mathrm{i}\sum_a \varepsilon_a[\hat{T}_a, \hat{A}] + \mathcal{O}(\varepsilon_a^2). \tag{V.10}$$

Somit ist der Operator $\hat{A}$ invariant unter der Symmetrie, d.h. $\hat{A}' = \hat{A}$, wenn $\hat{A}$ mit allen Generatoren $\hat{T}_a$ der Symmetriegruppe kommutiert.

V.1.4 Symmetrien und Hamilton-Operator

Ein bestimmtes physikalisches System wird *symmetrisch* unter einer gewissen Gruppe von Transformationen genannt, falls der Hamilton-Operator $\hat{H}$ invariant unter den Transformationen bleibt. Laut Gl. (V.9) soll somit

$$\hat{H} = \hat{\mathcal{U}}(\mathcal{T})^\dagger \hat{H} \hat{\mathcal{U}}(\mathcal{T}) \tag{V.11}$$

gelten. Daraus folgt, dass $|\psi\rangle$ und $|\psi'\rangle$ dieselbe Schrödinger-Gleichung erfüllen:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial|\psi'\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi'\rangle. \tag{V.12}$$

(29) Die imaginäre Einheit i auf der rechten Seite wird manchmal in den Generatoren und manchmal in den Strukturkonstanten „absorbiert".

(30) In manchen Lehrbüchern wird stattdessen die alternative Konvention $\langle\chi'|\hat{A}'|\psi'\rangle = \langle\chi|\hat{A}|\psi\rangle$ gewählt.

Insbesondere soll für eine infinitesimale Transformation

$$\hat{H} = \hat{\mathcal{H}}\big(\mathcal{T}(\{\varepsilon_a\})\big)^\dagger \hat{A}\, \hat{\mathcal{H}}\big(\mathcal{T}(\{\varepsilon_a\})\big) = \hat{A} - \mathrm{i}\sum_a \varepsilon_a[\hat{T}_a, \hat{A}] + \mathcal{O}(\varepsilon_a^2) \tag{V.13}$$

gelten, vgl. Gl. (V.10), woraus sich die Bedingung

$$[\hat{T}_a, \hat{H}] = \hat{0} \tag{V.14}$$

für jeden Generator $\hat{T}_a$ ergibt.

Diese Anforderung bedeutet einerseits, dass $\hat{T}_a$ und $\hat{H}$ gleichzeitig diagonalisierbar sind, d.h. dass man eine Basis von gemeinsamen Eigenvektoren finden kann. Dementsprechend können diese Eigenzustände durch ihre Energie und ihren $\hat{T}_a$-Eigenwert gekennzeichnet werden: in der Praxis ist es deshalb nützlich, die Symmetrien eines Systems zu untersuchen.

Laut dem Ehrenfest-Theorem (II.60) besagt Gl. (V.14) auch, dass der Erwartungswert von $\hat{T}_a$ eine Konstante der Bewegung ist.

V.1.5 Alternative Definition der Generatoren

Anstatt Gl. (V.5) werden die Generatoren in der Quantenmechanik oft durch

$$\boxed{\hat{\mathcal{U}}\big(\mathcal{T}(\{\varepsilon_a\})\big) = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{a=1}^{N} \varepsilon_a \hat{G}_a + \mathcal{O}(\varepsilon_a^2)} \tag{V.15}$$

definiert, weil die „neuen“ Generatoren $\hat{G}_a$ eine einfachere physikalische Bedeutung haben.

V.2 Raumtranslationen

Als erstes Beispiel betrachten wir die Raumtranslationen um einen beliebigen Vektor

$$\vec{r} \to \vec{r}\,' = \mathcal{T}(\vec{a})\vec{r} \equiv \vec{r} + \vec{a} \tag{V.16a}$$

mit $a \in \mathbb{R}^3$. Für eine infinitesimale Verschiebung um einen „kleinen“ Vektor $\delta\vec{a}$ gilt

$$\mathcal{T}(\delta\vec{a})\vec{r} = \vec{r} + \delta\vec{a} + \mathcal{O}(|\delta\vec{a}|^2). \tag{V.16b}$$

V.2.1 Operation auf dem Hilbert-Raum eines quantenmechanischen Systems

Sei $\mathscr{H}$ der Hilbert-Raum eines gegebenen quantenmechanischen Systems, dessen Zustandsvektoren mit $|\psi\rangle$ bezeichnet werden. In Übereinstimmung mit der allgemeinen Form (V.3) einer Symmetrietransformation soll sich ein Ket gemäß[31]

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \hat{\mathcal{U}}(\vec{a})\,|\psi\rangle \tag{V.17}$$

mit einem unitären Operator $\hat{\mathcal{U}}(\vec{a})$ transformieren, wenn das System um $\vec{a}$ verschoben ist. In diesem Abschnitt wollen wir $\hat{\mathcal{U}}(\vec{a})$ bestimmen, indem wir erstens den Operator $\hat{\mathcal{U}}(\delta\vec{a})$ für eine infinitesimale Translation finden.

V.2.1 a Operation auf Operatoren

Unter einer Raumtranslation des physikalischen Systems um $\vec{a}$ transformiert sich dessen Position gemäß $\vec{r} \to \vec{r}\,' = \vec{r} + \vec{a}$. Dementsprechend transformiert sich der Ortsoperator des Systems gemäß

$$\hat{\vec{r}} \to \hat{\vec{r}}\,' = \hat{\vec{r}} + \vec{a}\,\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}},$$

[31] Der Kürze halber wird $\hat{\mathcal{U}}(\vec{a})$ anstatt $\hat{\mathcal{U}}\big(\mathcal{T}(\vec{a})\big)$ geschrieben.

damit das Ergebnis $\vec{r}\,'$ einer Messung von $\hat{\vec{r}}\,'$ um $\vec{a}$ verschoben ist. Zum anderen wird $\hat{\vec{r}}\,'$ auch durch Gl. (V.9) gegeben, d.h.

$$\hat{\vec{r}}\,' = \hat{\mathcal{U}}(\vec{a})^\dagger\,\hat{\vec{r}}\,\hat{\mathcal{U}}(\vec{a}).$$

Zusammen liefern die beiden letzten Gleichungen die Bedingung

$$\hat{\mathcal{U}}(\vec{a})^\dagger\,\hat{\vec{r}}\,\hat{\mathcal{U}}(\vec{a}) = \hat{\vec{r}} + \vec{a}\,\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} \tag{V.18}$$

für alle Vektoren $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$.

Betrachte man nun eine infinitesimale Translation $\delta\vec{a} = \delta a_x\,\vec{e}_x + \delta a_y\,\vec{e}_y + \delta a_z\,\vec{e}_z$. Unter Nutzung der Gl. (V.15) lässt sich der damit assoziierte Transformationsoperator in der Form

$$\hat{\mathcal{U}}(\delta\vec{a}) = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=x,y,z}\delta a_j\hat{P}_j + \mathcal{O}(\delta a^2) \tag{V.19}$$

schreiben, wobei die (hermiteschen) Operatoren $\hat{P}_x$, $\hat{P}_y$, $\hat{P}_z$ die zugehörigen Generatoren sind. Dann lautet der Term auf der linken Seite der Gl. (V.18) mit $\delta\vec{a}\cdot\hat{\vec{P}} \equiv \sum_j \delta a_j\hat{P}_j$

$$\left(\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\vec{a}\cdot\hat{\vec{P}}^{\,\dagger} + \mathcal{O}(\delta a^2)\right)\hat{\vec{r}}\left(\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\vec{a}\cdot\hat{\vec{P}} + \mathcal{O}(\delta\vec{a}^2)\right) = \hat{\vec{r}} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=x,y,z}\delta a_j\big[\hat{\vec{r}},\hat{P}_j\big] + \mathcal{O}(\delta\vec{a}^2),$$

wobei $\hat{P}_j^\dagger = \hat{P}_j$ für $j = x, y, z$ benutzt wurde. Wiederum ist der Term auf der rechten Seite derselben Gleichung $\hat{\vec{r}} + \delta\vec{a}\,\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}$, so dass

$$-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=x,y,z}\delta a_j\big[\hat{\vec{r}},\hat{P}_j\big] = \delta\vec{a}\,\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} = \sum_{i=x,y,z}\delta a_i\,\vec{e}_i\,\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}$$

für alle gelten soll. Da $\hat{\vec{r}}$ sich als $\hat{\vec{r}} = \hat{x}\,\vec{e}_x + \hat{y}\,\vec{e}_y + \hat{z}\,\vec{e}_z$ schreiben lässt, müssen

$$-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big[\hat{x},\hat{P}_x\big] = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} \quad,\quad -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big[\hat{x},\hat{P}_x\big] = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} \quad,\quad -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big[\hat{x},\hat{P}_x\big] = \hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}}$$

und

$$\big[\hat{x},\hat{P}_y\big] = \big[\hat{x},\hat{P}_z\big] = \big[\hat{y},\hat{P}_x\big] = \big[\hat{y},\hat{P}_z\big] = \big[\hat{z},\hat{P}_x\big] = \big[\hat{z},\hat{P}_x\big] = \hat{0}$$

erfüllt sein. Insgesamt lassen sich diese Gleichungen als

$$\big[\hat{x}_i,\hat{P}_j\big] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\hat{\mathbb{1}}_{\mathscr{H}} \quad \forall i,j \tag{V.20}$$

umschreiben, entsprechend dem fundamentalen Kommutator (III.27) von der i-ten Komponente des Ortsoperators mit der j-ten Komponente des Impulsoperators — was im Nachhinein die Bezeichnung mit $\hat{P}_j$ des Generators der Translationen entlang der j-Richtung rechtfertigt. Ab jetzt wird $\hat{p}_j$ statt $\hat{P}_j$ geschrieben.

Indem man schreibt, dass zwei sukzessive Translationen um $\delta\vec{a}$, $\delta\vec{b}$ in beliebiger Ordnung durchgeführt werden können:

$$\hat{\mathcal{U}}(\delta\vec{b})\,\hat{\mathcal{U}}(\delta\vec{a}) = \hat{\mathcal{U}}(\delta\vec{a})\,\hat{\mathcal{U}}(\delta\vec{b}),$$

weil die Gruppe der Raumtranslationen kommutativ ist, findet man unter Einführung der Komponenten δa_i, δb_j, dass die Generatoren $\hat{p}_i$, $\hat{p}_j$ entlang unterschiedlicher Richtungen kommutieren:

$$[\hat{p}_i,\hat{p}_j] = \hat{0} \quad \forall i,j. \tag{V.21}$$

Das heißt, dass alle durch Gl. (V.6) definierten Strukturkonstanten der Gruppe der Translationen Null sind.

V.2.1 b Operation auf Wellenfunktionen

Dass die Generatoren der räumlichen Translationen die drei Komponenten des Impulsoperators sind, kann auch in der Ortsdarstellung gefunden werden. Seien $\psi(\vec{r}) \equiv \langle\vec{r}\,|\psi\rangle$ und $\psi'(\vec{r}\,') \equiv \langle\vec{r}\,'|\psi'\rangle$

die „originelle“ und „translatierte“Wellenfunktionen eines Systems. Es gilt

$$\psi'(\vec{r}\,') = \psi(\vec{r}) \tag{V.22}$$

für alle $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$ und $\vec{r}\,' = \vec{r} + \vec{a}$ mit $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$. Dies kann auch in der Form

$$\psi'(\vec{r}\,') = \psi\big(\mathcal{T}(\vec{a})^{-1}\vec{r}\,'\big) = \psi\big(\mathcal{T}(-\vec{a})\vec{r}\,'\big) = \psi(\vec{r}\,' - \vec{a}) \quad \forall \vec{r}\,', \vec{a} \in \mathbb{R}^3$$

geschrieben werden, wobei die Form der inversen Translation benutzt wurde. Im Fall einer infinitesimalen Transformation gibt eine Taylor-Entwicklung

$$\psi(\vec{r}\,' - \delta\vec{a}) \simeq \psi(\vec{r}\,') - \delta\vec{a} \cdot \vec{\nabla}\psi(\vec{r}\,') + \mathcal{O}(\delta\vec{a}^2) = \big(1 - \delta\vec{a} \cdot \vec{\nabla}\big)\psi(\vec{r}\,') + \mathcal{O}(\delta\vec{a}^2).$$

Zum anderen soll laut Gl. (V.17) $\psi'(\vec{r}\,') = \hat{\mathcal{U}}(\delta\vec{a})\psi(\vec{r}\,')$ gelten. Daher liefern die zwei letzten Gleichungen

$$\hat{\mathcal{U}}(\delta\vec{a}) = \hat{\mathbb{1}} - \delta\vec{a} \cdot \vec{\nabla},$$

wobei die Operatoren $\hat{\mathcal{U}}(\delta\vec{a})$, $\vec{\nabla}$ und $\hat{\mathbb{1}}$ — entsprechend der Multiplikation mit 1 — auf quadratintegrablen Funktionen ψ auf $\mathbb{R}^3$ wirken. Mit einiger trivialen Umschreibung ergibt sich

$$\hat{\mathcal{U}}(\delta\vec{a}) = \hat{\mathbb{1}} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \big(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\big), \tag{V.23}$$

was genau Gl (V.19) mit der Ortsdarstellung des Impulsoperators entspricht.

Für eine beliebige Translation um einen Vektor $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$ prüft man, dass der zugehörige unitäre Operator auf Funktionen $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ durch

$$\hat{\mathcal{U}}(\vec{a}) = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{a} \cdot \big(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\big)\right] \tag{V.24}$$

gegeben ist. Dabei sieht man, dass Gl. (V.23) nur die zwei ersten Terme der Taylor-Entwicklung der allgemeineren Formel darstellt.

Die sukzessiven Terme in der Entwicklung von $\hat{\mathcal{U}}(\vec{a}) = \mathrm{e}^{-\vec{a}\cdot\vec{\nabla}}$ in Potenzreihe realisieren nämlich die Taylor-Entwicklung der Funktion, auf die sie wirken. □

V.2.2 Operation auf Vektoren von $\mathbb{R}^3$

Die Wirkung einer infinitesimalen Translation um $\delta\vec{a}$ auf einen Vektor $\vec{r}$ kann in der freilich komplizierten Form

$$\mathcal{T}(\delta\vec{a})\vec{r} = \vec{r} + \delta\vec{a} = \left[\mathbb{1}_3 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \big(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\big)\right]\vec{r} \tag{V.25}$$

geschrieben werden, wobei $\mathbb{1}_3$ die 3×3-Identitätsmatrix bezeichnet.

Hier auch kann diese Formel „exponentiert“ werden, um die Wirkung einer endlichen Translation zu geben:

$$\mathcal{T}(\vec{a})\vec{r} = \vec{r} + \vec{a} = \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{a} \cdot \big(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\big)\right]\vec{r} = \mathrm{e}^{\vec{a}\cdot\vec{\nabla}}\vec{r}. \tag{V.26}$$

Für Drehungen werden wir ähnliche Ergebnisse finden.

V.2.3 Spektrum der Generatoren von Translationen

Da die Generatoren von den räumlichen Translationen die kartesischen Komponenten $\hat{p}_j$ des Ortsoperators sind, sind uns ihre möglichen Eigenwerte schon bekannt, und zwar die reellen Zahlen $p \in \mathbb{R}$.

Nun wird der Hamilton-Operator $\hat{H}$ eines Systems invariant unter allen räumlichen Translationen nur dann sein, wenn $\hat{H}$ mit allen relevanten Operatoren $\hat{p}_j$ kommutiert. In der Tat passiert dies nur, wenn $\hat{H}$ der Hamilton-Operator eines freien Teilchens ist, d.h. für das System des Abschn. III.3, oder allgemeiner für ein System aus nicht-wechselwirkenden Teilchen.