

Gruppentheorie und Quantenmechanik

Kilian Höfling
Universität Heidelberg
Seminar: Quantenmechanik
Prof. Wolschin
Hoefling@stud.uni-heidelberg.de

Zusammenfassung: Der vorliegende Text beinhaltet eine Einführung in die Theorie der Gruppen und Darstellungen, sowie deren Anwendung in der Quantenmechanik, wie sie im Rahmen des Quantenmechanik Seminars von Professor Wolschin, am **29. November 2019** in einem Vortrag des Autors gegeben wurde. Nach einem Überblick über die Geschichte der Gruppentheorie werden systematisch wichtige und grundlegende Begriffe der mathematischen Theorie eingeführt und die Verbindung zur Quantenmechanik anhand von Beispielen verdeutlicht. Davon ausgehend wird das Wigner Theorem im Lichte der entwickelten, mathematischen Konzepte vorgestellt und seine Bedeutung, mit Blick auf Symmetrieuntersuchungen in der Quantenmechanik, manifestiert. Abschließend werden die diskutierten Inhalte auf das Konzept des Spins angewendet.

1. Einleitung

"We will have to abandon the philosophy of Democritus and the concept of elementary particles. We should accept instead the concept of elementary symmetries." [3]

Dieses Zitat von Werner Heisenberg aus dem Jahre 1928 verdeutlicht zwei Aspekte, die für diese Arbeit von großer Bedeutung sind: Zum Einen, dass das Aufkommen der Quantenmechanik, anfangs des 20. Jahrhunderts, fordert, eine der ältesten Fragen der Physik aus einem fundamental neuen Blickwinkel zu betrachten. Demnach empfiehlt Heisenberg, anstelle der ewigen Suche nach den elementaren, materiellen Bestandteilen des Universums, die Erforschung elementarer Symmetrien in der Natur zu forcieren. Dies ist gleichbedeutend mit einer Abkehr des "Matroschka-Puppen-Prinzips", welches die Physik seit ihren philosophischen Wurzeln, zur Zeit der alten Griechen, verfolgt. Gemeint ist damit der Drang nach immer tieferer Einsicht in die Bausteine der Materie, mit dem Ziel noch kleinere Substrukturen aufzulösen, welche wiederum aus kleineren Konstituenten bestehen, die auf ihre Entdeckung warten. Zum Anderen gibt er damit indirekt eine Antwort auf die Frage, warum es sich lohnt, sich als theoretischer Physiker mit den Ideen der Gruppentheorie auseinanderzusetzen. Der Grund ist schlicht, dass es sich dabei um jenes mathematische Teilgebiet handelt, welches den Begriff der Symmetrie auf abstrakte Weise behandelt.

2. Geschichte

Erste Schritte zur Entwicklung der Gruppentheorie können in die erste Hälfte des 19. Jahrhunderts datiert, und auf den französischen Mathematiker Évariste Galois zurückgeführt werden. Galois nutzte in seiner Arbeit 1831 erstmalig den Abstraktionsgrad, den ihm die spezielle, algebraische Struktur der Gruppe bot, um ein Jahrhunderte altes Problem aus der Auflösungstheorie algebraischer Gleichungen zu lösen. Ausgehend von seinen Arbeiten, die damals kaum Anklang im mathematischen Etablisment Frankreichs fanden, legten etwa zwanzig Jahre später die Mathematiker Augustin Cauchy und Arthur Cayley mit dem *Satz von Cauchy* und der - heute als Verknüpfungstabelle bekannte - *Cayley-Tafel* weitere Grundsteine der Theorie. Jedoch bedurfte es Camille Jordans Buch *Traité des substitutions* aus dem Jahre 1870, um die Gruppentheorie einer breiten Öffentlichkeit bekannt zu machen, woraufhin 1882 die erste formale Definition, nach heutigem Verständnis, von Walther von Dyck und Heinrich Weber gegeben wurde. Der norwegische Mathematiker Sophus Lie und der deutsche Felix Klein, beides Schüler Jordans, errichteten mit ihren Arbeiten, im späten 19. Jahrhundert,

über die Verbindung von Gruppentheorie und Geometrie eine Brücke zweier Teilgebiete der Mathematik, die Jahrzehnte später als wichtiges Werkzeug zur Beschreibung quantenmechanischer Effekte wiederentdeckt und vielfach angewendet werden sollte. Eine ebensolche Brücke zwischen der Mathematik und der Physik stellte 1918 Emmy Noether mit ihrer Arbeit *Invarianten beliebiger Differentialausdrücke* [4] vor, in der sie die enge Verbindung zwischen kontinuierlichen Symmetrietransformationen und Erhaltungsgrößen formalisierte. Das von Eugen Wigner, am Ende der 1920er Jahre entwickelte, nach ihm benannte Theorem, kann als quantenmechanische Entsprechung des Noether Theorems interpretiert werden und bildet damit ein zentrales Werkzeug in der Verbindung klassischer Anwendungen der Symmetrie physikalischer Systeme und dem quantenmechanischen Formalismus. Die Arbeiten zu den Atomspektren, die Wigner in Zusammenarbeit mit John von Neumann in diesen Jahren veröffentlichte, zeigten darüber hinaus zum ersten Mal die immense physikalische Strahlkraft der Gruppentheorie. In dem Buch *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren* [11], aus dem Jahr 1931 gelang es ihnen, ausgehend von grundlegenden Symmetriebetrachtungen, die Auswahlregeln der Übergänge innerhalb der Atomhülle mit rein gruppentheoretischen Methoden abzuleiten. Das, von Hermann Weyl 1926 publizierte Werk *Gruppentheorie und Quantenmechanik* [10] ist schließlich das erste Buch, welches den engen Zusammenhang des mathematischen Apparats der Gruppen und Darstellungen, mit der Physik in seiner Gesamtheit darstellt. Es ist zudem eines der ersten Bücher über die Grundlagen der Quantenmechanik überhaupt. Seither finden Gruppen- und Darstellungstheorie Anwendung in weiten Teilen physikalisch theoretischer Grundlagenforschung, von den Kristallstrukturen der Festkörper, bis hin zur Quantenfeldtheorie. [12] [7]

3. Grundlegendes zur Gruppentheorie

3.1. Theorie endlicher Gruppen

Eine *Gruppe* ist eine algebraische Struktur, definiert als ein Tupel (G, \circ) , welches sich aus einer Grundmenge G und einer inneren Verknüpfung $\circ: G \times G \rightarrow G$ zusammensetzt. Zudem müssen folgende Axiome gelten:

$$G1) f \circ g = h \in G \quad \forall f, g \in G \quad (1)$$

$$G2) (f \circ g) \circ h = f \circ (g \circ h) \quad \forall f, g, h \in G \quad (2)$$

$$G3) \exists! e \in G : e \circ g = g \circ e = g \quad \forall g \in G \quad (3)$$

$$G4) \forall g \in G : \exists! g^{-1} \in G : g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = e \quad (4)$$

G1) entspricht der *Abgeschlossenheit*, G2) der *Assoziativität* der Gruppen-Verknüpfung. Die Axiome G3) und G4) fordern die Existenz eines *neutralen* Elements, sowie die Existenz von Elementen, die unter Verknüpfung mit ihren *Inversen* auf das neutrale Element abgebildet werden.

Die *Ordnung* einer endlichen Gruppe entspricht der Anzahl ihrer Elemente.

Ihre *Darstellung* ist eine Abbildung $D: G \rightarrow \mathcal{L}$, wobei \mathcal{L} der Raum der linearen Operatoren ist, die auf Elemente eines Vektorraumes - in der Quantenmechanik typischerweise der Hilbertraum der physikalischen Zustände - wirken. Für die Darstellung müssen folgende Axiome gelten:

$$D1) D(e) = \mathbb{1} \quad (5)$$

$$D2) D(g) \cdot D(h) = D(g \circ h) \quad \forall g, h \in G \quad (6)$$

In Worten bedeutet dies, dass das neutrale Element der Gruppe auf den *Identitätsoperator* abgebildet wird und das Produkt im *Darstellungsraum* mit der Gruppenverknüpfung verträglich sein muss. Auf diese Weise gelingt es, die Gruppe und ihre Verknüpfung in eine lineare Struktur einzubetten, aus der heraus physikalische Untersuchungen mit Hilfe des, in der Quantenmechanik allgegenwärtigen *Operatorkalküls* (Stichwort: *Spektraltheorie*) oftmals erst möglich werden. Die *Dimension* einer Darstellung ist die Dimension des Vektorraumes, auf den die Operatoren in \mathcal{L} wirken. Als wichtige Feststellung soll hier festgehalten werden, dass die Darstellung einer Gruppe nicht eindeutig ist, es also je nach Anwendung mehrere Möglichkeiten gibt die Eigenschaften der Gruppe linear abzubilden. Es obliegt dann dem Anwender, die für seine Zwecke nützlichste Darstellung zu wählen. Für Darstellungen endlicher Gruppen existiert ein Standardverfahren, mit dessen Hilfe ohne längeres Ausprobieren die sogenannte *reguläre Darstellung* konstruiert werden kann. Man betrachte dazu die folgende Definition der regulären Darstellung einer Gruppe G mit den Elementen g_1 bis g_n :

$$D(g_1) |g_2\rangle \equiv |g_1 g_2\rangle \quad (7)$$

Dabei sind g_1 und g_2 beliebig wählbare Elemente aus G . Man prüft leicht nach, dass hierfür die Axiome D1) und D2) erfüllt sind. Als Nächstes werden die Gruppenelemente wie folgt umbenannt:

$$|e_1\rangle \equiv |g_1\rangle, |e_2\rangle \equiv |g_2\rangle, \dots, |e_n\rangle \equiv |g_n\rangle \quad (8)$$

Dies scheint für den allgemeinen Fall überflüssig, ist aber bei expliziter Angabe der Gruppenelemente (zum Beispiel Zahlen) ein wichtiger Abstraktionsgrad, um folgende Formel zur expliziten Angabe der Gruppenelemente in Matrix-Darstellung, korrekt auszuwerten:

$$[D(g_k)]_{ij} = \langle e_i | D(g_k) | e_j \rangle \quad (9)$$

Die Auswertung von (9) für ein beliebiges Gruppenelement g_k geschieht dann durch Anwendung der Definition der regulären Darstellung (7) auf den hinteren Teil des Matrixelements und anschließender Matrix-Multiplikation des i -ten Zeileneinheitsvektor mit dem entsprechenden Spalteneinheitsvektor. [2]

3.2. Theorie kontinuierlicher Gruppen

Bei der unten folgenden Diskussion der Symmetrien quantenmechanischer Systeme spielen kontinuierliche Gruppen eine herausragende Rolle, da viele Transformationsgruppen, wie die Rotationen und Translationen im Raum, die Eigenschaft der Kontinuität auf natürliche Weise besitzen. Diese Transformationen wiederum sind es, die unter Invarianz des physikalischen Systems Rückschlüsse auf dessen Erhaltungsgrößen erlauben. Um diesen Gedankengang später anhand von Beispielen auf einer abstrakten Ebene nachvollziehen zu können, werden im Folgenden die wichtigen Begriffe der *Lie-Gruppe* und der *Lie-Algebra* hergeleitet.

Kontinuierliche Gruppen zeichnen sich dadurch aus, dass ihre Elemente mithilfe reeller Zahlen parametrisiert werden können:

$$G \ni g \rightarrow g(\alpha), \alpha \in \mathbb{R} \quad (10)$$

Das neutrale Element wird hierbei sinnvoller Weise beim Wert $\alpha = 0$ definiert

$$g(\alpha) |_{\alpha=0} = e, \quad (11)$$

woraus für die Darstellung des neutralen Elements folgt:

$$D(\alpha) |_{\alpha=0} = \mathbb{1} \quad (12)$$

Um zum Begriff des *Generators* vorzudringen, betrachtet man nun die Darstellung der Gruppenelemente in der Nähe des neutralen Elements. Dazu führt man den Parameter a ein, der die Elemente in der Nähe von e durchnummeriert und führt anschließend eine Taylorentwicklung in der infinitesimalen Umgebung um $\alpha = 0$ durch:

$$\alpha \rightarrow \alpha_a, a \in \mathbb{N} \quad (13)$$

$$D(d\alpha) \approx \mathbb{1} + id\alpha(-i) \frac{\partial}{\partial \alpha_a} D(\alpha) |_{\alpha=0} + \dots \quad (14)$$

Die eingeführte 1 , die sich aus der Multiplikation der imaginären Einheiten unterschiedlichen Vorzeichens ergibt, wird später noch wichtig, wenn es darum geht *hermitesche* Operatoren zu erhalten, wie sie in der Quantenmechanik entscheidend sind. Die Entwicklung zeigt, dass Gruppenelemente, in der Nähe des neutralen Elements, mithilfe des Generators:

$$X_a = (-i) \frac{\partial}{\partial \alpha_a} D(\alpha) |_{\alpha=0} \quad (15)$$

dargestellt werden können.

Die Darstellung eines beliebigen Elements am Punkt α ergibt sich damit, und dem zweiten Axiom der Darstellung zu:

$$D(\alpha) = \lim_{k \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} + \frac{i\alpha_a X_a}{k} \right)^k = e^{i\alpha_a X_a} \quad (16)$$

Kontinuierliche Gruppen, deren Elemente auf diese Weise durch ihren Generator dargestellt werden können, heißen *Lie-Gruppen*. Eine andere, aus der Geometrie stammende Definition, setzt den Begriff der Lie-Gruppe mit einer Gruppe gleich, welche gleichzeitig eine differenzierbare Mannigfaltigkeit definiert. Für die Zwecke dieser Arbeit genügt allerdings die erstgenannte Definition.

Der zweite fundamentale Begriff der in diesem Zusammenhang erklärt werden muss ist die sogenannte *Lie-Algebra*. Hierbei handelt es sich um einen Vektorraum, der im vorliegenden Fall von den Generatoren der Lie-Gruppe aufgespannt wird und auf dem zusätzlich ein bilineares Produkt, die sogenannte *Lie-Klammer* definiert ist. Im Folgenden soll eine Herleitung der eben genannten Begriffe gegeben werden.

Die Frage, die letztlich auf den Begriff der Lie-Algebra führt ist, wie sich die Exponenten der Darstellungen zweier Gruppenelemente bei Multiplikation der Darstellungen verhalten. Mit anderen Worten entspricht dies der Frage, wie sich die Gruppenverknüpfung in den neuen Rahmen der gefundenen Darstellung der Gruppenelemente [(16)] einfügt. Im Allgemeinen gilt nämlich für die Multiplikationen zweier Darstellungen:

$$e^{i\alpha_a X_a} e^{i\beta_b X_b} \neq e^{i(\alpha_a + \beta_b) X_a} \quad (17)$$

Die Multiplikation ist also nicht trivial, muss aber aufgrund von D2) und der Abgeschlossenheit der Gruppe mittels:

$$e^{i\alpha_a X_a} e^{i\beta_b X_b} = e^{i\delta_a X_a} \quad (18)$$

dargestellt werden können.

Den gesuchten Ausdruck für den Exponenten auf der rechten Seite der Gleichung erhält man mittels logarithmieren beider Seiten und anschließendem Einfügen einer 0:

$$i\delta_a X_a = \ln(1 + e^{i\alpha_a X_a} e^{i\beta_b X_b} - 1) \quad (19)$$

Nun definiert man:

$$K \equiv e^{i\alpha_a X_a} e^{i\beta_b X_b} - 1 \quad (20)$$

und entwickelt den Ausdruck $\ln(1+K)$ um $K = 0$ in eine Taylor-Reihe:

$$\ln(1 + K) \approx K - \frac{1}{2}K^2 + .. \quad (21)$$

Schließlich wird (20) in die rechte Seite von (21) eingesetzt, womit man letztlich unter Vernachlässigung höherer Ordnungen folgende Gleichung erhält:

$$i\delta_a X_a = i\alpha_a X_a + i\beta_b X_b - \frac{1}{2}[\alpha_a X_a, \beta_b X_b] \quad (22)$$

Der dritte Summand in Gleichung (22) ist die bereits angesprochene Lie-Klammer der Generatoren. [2] Sie ist allgemein als *Bilinearform* $[\cdot, \cdot]: V \times V \rightarrow V$ definiert, für die zudem gilt:

$$(LK1) [v, v] = 0 \quad \forall v \in V \quad (23)$$

$$(LK2) [u, [v, w]] + [v, [w, u]] + [w, [u, v]] = 0 \quad \forall u, v, w \in V \quad (24)$$

(LK2) ist die sogenannte *Jacobi-Identität*. [8]

Ein Vektorraum, ausgestattet mit dem speziellen Produkt der Lie-Klammer, ist per Definition eine Lie-Algebra.

Die für die Quantenmechanik wichtige Lie-Algebra ist nun jene, die von den Generatoren der zugrundeliegenden Lie-Gruppe aufgespannt wird. Der entsprechende Vektorraum der Operatoren ist mit der, für die Quantenmechanik essentiellen Lie-Klammer: dem *Kommutator* ausgerüstet. Der Kommutator zweier Operatoren \hat{A} und \hat{B} ist definiert als:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (25)$$

Man prüft leicht nach, dass die obigen Eigenschaften der Lie-Klammer für den Kommutator erfüllt sind.

Damit sind die wichtigsten Begriffe der Gruppen- und Darstellungstheorie genannt, die im Folgenden in zwei Beispielen Anwendung finden.

4. Anwendungen

In Abschnitt 3 wurde gezeigt, wie für eine allgemeine kontinuierliche Gruppe elementweise eine Darstellung der Form $e^{i\alpha_a X_a}$ konstruiert werden kann. Nun wird diese Idee auf die kontinuierlichen Transformationsgruppen der *Verschiebungen* und *Drehungen* um einen reellen Parameter ϵ angewendet und die Verbindung zu den jeweils zugrunde liegenden Generatoren aufgezeigt.

Die Idee besteht hierbei darin, ausgehend von der Anwendung einer infinitesimalen Transformation auf die Wellenfunktion Ψ mithilfe einer Taylorentwicklung auf die explizite Darstellung des Gruppen-Generators zu schließen.

4.1. Translationen

Man betrachte dazu zunächst die Verschiebung um den infinitesimalen Wert ϵ :

$$T_\epsilon : \Psi(x) \rightarrow \Psi(x + \epsilon) \quad (26)$$

Nun wird T_ϵ auf die Ortswellenfunktion in einer Dimension $\Psi(x)$ angewendet:

$$T_\epsilon \Psi(x) = \Psi(x + \epsilon) \quad (27)$$

$$\approx \Psi(x) + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) + \frac{\epsilon^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + \dots \quad (28)$$

$$= (1 + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\epsilon^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots) \Psi(x) \quad (29)$$

$$= \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\epsilon \frac{\partial}{\partial x})^n}{n!} \right) \Psi(x) \quad (30)$$

$$= e^{\epsilon \frac{\partial}{\partial x}} \Psi(x) \quad (31)$$

Mit der Konvention $\hbar = 1$ folgt somit:

$$T_\epsilon \Psi(x) = e^{i\epsilon \hat{p}} \Psi(x) \quad (32)$$

Mit dem Impulsoperator:

$$\hat{p} = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (33)$$

In Worten bedeutet dieses wichtige Resultat, dass der Impulsoperator der Generator der Lie-Gruppe der Translationen ist. [1] [5]

4.2. Rotationen

Analog zu 4.1 betrachtet man nun Drehungen um einen infinitesimalen Winkel ϵ . Aus offensichtlichen Gründen wird die Wellenfunktion in diesem speziellen Fall in 3 Dimensionen, unter Verwendung der Kugelkoordinaten r , θ und φ beschrieben.

$$R_\epsilon : \Psi(r, \theta, \varphi) \rightarrow \Psi(r, \theta, \varphi + \epsilon) \quad (34)$$

Daraus folgt durch Anwendung:

$$R_\epsilon \Psi(r, \theta, \varphi) = \Psi(r, \theta, \varphi + \epsilon) \quad (35)$$

$$\equiv \Psi(r, \theta, \varphi + \delta\varphi) \quad (36)$$

$$\approx \Psi(r, \theta, \varphi) + \delta\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (37)$$

$$= (1 + \delta\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}) \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (38)$$

Nun betrachtet man ausgehend von (38) folgenden Grenzwert:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (1 + \frac{\varphi}{k} \frac{\partial}{\partial \varphi})^k \Psi(r, \theta, \varphi) = e^{\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}} \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (39)$$

Hierbei wurde schlicht:

$$\delta\varphi = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\varphi}{k} \quad (40)$$

benutzt.

Wiederum mit $\hbar = 1$ folgt nun:

$$R_\varphi \Psi(r, \theta, \varphi) = e^{i\varphi \hat{L}} \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (41)$$

mit dem Drehimpulsoperator:

$$\hat{L} = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (42)$$

Es bleibt also festzuhalten, dass der Drehimpulsoperator endliche Rotationen um den Winkel φ generiert. [1] [6]

5. Wigner Theorem

Das Wigner Theorem kann, wie anfangs angedeutet, als die quantenmechanische Entsprechung des Noether Theorems interpretiert werden, auch wenn es sich dabei ausdrücklich nicht um die selbe Theorie in angepasstem mathematischen Gewand handelt. Vielmehr geht es bei obigem Vergleich der Theoreme, um die physikalische Einordnung und Nützlichkeit. Mit Hilfe des Wigner Theorems können in der klassischen Physik *Erhaltungsgrößen* physikalischer Systeme abgeleitet werden, die *invariant* unter Anwendung *kontinuierlicher Transformationen* sind. Derartig ausgezeichneten Transformationen werden als *Symmetrie-Transformationen* bezeichnet. Die mathematische Formalisierung dieser Idee erfolgt unter expliziter Anwendung der jeweiligen Transformation auf die Lagrange-Funktion des physikalischen Systems. Die *Symmetrie* des Systems erfolgt dann aus der Folgerung, dass der Wert der Lagrange-Funktion unter der Transformation der entsprechenden Variablen unverändert bleibt. Im Falle einer infinitesimalen Verschiebung des Ortes ergibt sich somit, im Falle vorliegender Symmetrie, beispielsweise:

$$\mathbf{L}(q, p, t) \stackrel{!}{=} \mathbf{L}(q + \epsilon, p, t), \quad (43)$$

Wobei q der verallgemeinerte Ort, p der verallgemeinerte Impuls und t die Zeit ist. Mit Hilfe der Taylorentwicklung kann daraus ein allgemeiner Ausdruck für die zugehörige Erhaltungsgröße hergeleitet werden. Nach abgeschlossener Analyse folgt so für obiges Beispiel der Invarianz unter Translationen, die *Impulserhaltung* des Systems.

Basierend auf diesen grundlegenden Überlegungen, werden nun die wesentlichen Aspekte des Wigner Theorems geschildert.

Man betrachte dazu zwei Zustände $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ auf einem Hilbertraum \mathcal{H} :

$$|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H} \quad (44)$$

Auf dem Hilbertraum wirke der Operator

$$T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad (45)$$

mit der folgenden Eigenschaft:

$$|\langle T(\psi) | T(\phi) \rangle| = |\langle \psi | \phi \rangle| \quad (46)$$

Das bedeutet konkret, dass die Anwendung von T das Skalarprodukt der Zustände $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ invariant lässt und der Operator somit als Symmetrie-Transformation des Systems aufgefasst werden kann, welches durch die Zustände beschrieben wird. Gleichung (46) ist also das Pendant zur Invarianz der Lagrange-Funktion in der klassischen Physik, also zur verallgemeinerten Version der Gleichung (43). Das Wigner Theorem besagt nun, dass ein Operator der (46) erfüllt mittels eines *unitären* Operators dargestellt werden kann, skaliert mit einer komplexen Zahl vom Betrag 1:

$$T \text{ erfüllt (46)} \Rightarrow T = \varphi U \quad (47)$$

mit U unitär und

$$|\varphi| = 1, \quad \varphi \in \mathbb{C} \quad (48)$$

Für die Physik entscheidend ist nun das Folgende: Findet man einen Operator, der die Physik invariant lässt (also eine Symmetrie-Transformation definiert) und eine dazugehörige Darstellung gemäß Gleichung (47), dann folgt mit dem Wigner Theorem direkt die Unitarität der Darstellung. Dazu wurde bereits in Abschnitt 4.1 und 4.2 explizit geschildert, wie man für gewisse Transformationen, die gesuchte Darstellung berechnen kann! Gemäß der Annahme, dass T_ϵ und R_ϵ Gleichung (46) erfüllen und ihre Darstellungen, wie in Abschnitt 4 geschildert, berechnet wurden, kann darauf das Wigner Theorem angewendet werden. Die Darstellungen:

$$U(\epsilon) = e^{i\epsilon\hat{p}} \quad (49)$$

und

$$U(\varphi) = e^{i\varphi\hat{L}} \quad (50)$$

sind demnach unitäre Operatoren. Daraus wiederum folgt, nach Konstruktion des Generators in (15) direkt, dass die Generatoren in den Exponenten *hermitesch* und damit beobachtbare *Observablen* des quantenmechanischen Systems sind!

Summa summarum bedeutet dies, dass mithilfe des Wigner Theorems, unter Voraussetzung der Symmetrie und der Kenntnis der entsprechenden Darstellung der Transformationen die Erhaltungsgrößen des quantenmechanischen Systems abgeleitet werden können!

Die entsprechenden Erhaltungsgrößen in den Beispielen 4.1 und 4.2 sind also der *Impuls* im Falle der Translationssymmetrie und der *Drehimpuls* bei vorliegender Rotationssymmetrie des Systems. Das ist das erwartete Ergebnis, wie es durch Anwendung der entsprechenden Transformationen und des Noether Theorems analog in der klassischen Mechanik auftritt.

Wichtig zu erkennen ist noch, dass sich dieser Formalismus auf allgemeine, kontinuierliche Symmetrie-Transformationen anwenden lässt, bei denen die zugehörigen Erhaltungsgrößen weniger direkt geraten werden können, als in den genannten Anwendungen. [9]

6. Spin

Zuletzt soll im Lichte der gewonnenen Erkenntnisse aus den vorangegangenen Abschnitten kurz auf das Konzept des *Spins* eingegangen werden.

Um den Spin in die allgemeine quantenmechanische Beschreibung einzugliedern, bedarf es einer Erweiterung des Hilbertraumes der quadratintegrierbaren Funktionen $L^2(\mathbb{R}^3)$ in folgender Weise:

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_S : L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathcal{V}_I \quad (51)$$

Der Raum \mathcal{V}_I beinhaltet Linearkombinationen der Form

$$\sum \psi_m |lm\rangle, \quad (52)$$

welche sich mithilfe des Tensorproduktes der Basiszustände in Zustände aus \mathcal{H}_S erweitern lassen.

Betrachtet man nun ein quantenmechanisches System mit Spin = 1/2, treten bei genauerer Analyse die Pauli-Matrizen σ_i als Generatoren der Drehungen auf, die auf \mathcal{H}_S wirken. Die entsprechende Drehung der Wellenfunktion im Ortsraum um den reellen Parameter α entspricht dann der Transformation:

$$\Psi(x) \rightarrow e^{i\alpha_i\sigma_i}\Psi(e^{i\alpha_i\hat{R}_i}x) \quad (53)$$

Das Argument wird also auf kanonische Weise mittels der Generatoren R_i der $SO(3)$ gedreht, während die Drehung der Gesamtwellenfunktion im größeren Spinraum durch die Pauli-Matrizen σ_i generiert wird. Analog zu obiger Argumentation lässt sich somit der Spin als die erhaltene Größe, bei geeigneten Drehungen durch Operatoren der $SU(2)$ identifizieren. Die Eigenwerte können, nach einfacher Anwendung auf die Wellenfunktion, im Exponenten der Darstellung abgelesen werden. [1]

Literatur

- [1] Arthur Hebecker. Quantenmechanik. *Vorlesungsskript*, 2019.
- [2] Howard Georgi. Lie Algebras in Particle Physics. *From Isospin to Unified Theories*. ABP, 1999.
- [3] E. Maor. To Infinity and Beyond. *A Cultural History of the Infinite*. University Press Group, 1991.
- [4] E. Noether. Invarianten beliebiger Differentialausdrücke. *Nachrichten von der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen. Mathematisch-physikalische Klasse, aus dem Jahre 1918*, S.37-44. Weidmannsche Buchhandlung, 1918.
- [5] W. Nolting. Grundkurs Theoretische Physik 5/1. *Quantenmechanik - Grundlagen*. Springer Spektrum, 2013.
- [6] W. Nolting. Grundkurs Theoretische Physik 5/2. *Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*. Springer Spektrum, 2015.
- [7] M. R. Schneider. Zwischen zwei Disziplinen. *B.L. van der Waerden und die Entwicklung der Quantenmechanik*. Springer Verlag, 2011.
- [8] F. Schuster. Lie Algebren und Darstellungstheorie. *Vorlesungsskript*, 2017/2018.
- [9] N. Straumann. Quantenmechanik. *Ein Grundkurs über nichtrelativistische Quantentheorie*. Springer Spektrum, 2013.
- [10] H. Weyl. Gruppentheorie und Quantenmechanik. *Wissenschaftliche Buchgesellschaft Darmstadt*, 1967.
- [11] E. Wigner. Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren. *Vieweg*, 1977.
- [12] H. Wußing. 6000 Jahre Mathematik. *Eine kulturgeschichtliche Zeitreise. II: Von Euler bis zur Gegenwart*. Springer Spektrum Verlag, 2009.