Gruppentheorie und Quantenmechanik

Mirija Lea Fahm

28. November 2022

Zusammenfassung

Diese Ausarbeitung ist eine Zusammenfassung des gleichnamigen Vortrags der Autorin im Rahmen des Bachelorseminars Quantenmechanik bei Prof. Dr. Georg Wolschin im Wintersemester 2022/2023 an der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg. Nach einer historischen Einführung und mathematischen Grundlagen der Gruppen- und Darstellungstheorie steht die Analyse des Wigner Theorems inklusive Beweis und Anwendung im Mittelpunkt.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

In seiner historisch herausragend bedeutsamen Arbeit *„Gruppentheorie und Quantenmechanik"* [8] vom 13.10.1928 stellt Hermann Weyl zwei zentrale Fragen der Quantenmechanik:
„1. Wie komme ich zu der Matrix, der Hermiteschen Form, welche eine gegebene Größe in einem seiner Konstitution nach bekannten physikalischen System repräsentiert? 2. Wenn einmal die Hermitesche Form gewonnen ist, was ist ihre physikalische Bedeutung, was für physikalische Aussagen kann ich ihr entnehmen? " Zur ersten Frage erlangte Weyl unter Anwendung der Gruppentheorie eine tiefere Einsicht. Hier wird auch die folgende Ausarbeitung zum gleichnamigen Vortrag anknüpfen.

2 Historische Entwicklung

Die Gruppentheorie entwickelte sich schon sehr viel früher als die Quantenmechanik, so spielten Gruppen schon bei Gauß und Lagrange gegen Ende des 18. Jahrhunderts eine implizite Rolle. Als *Entdeckung der Gruppentheorie* gilt allerdings eine Arbeit von Évariste Galois, welche im Jahr 1846 veröffentlicht wurde. Er befasste sich in dieser Arbeit mit der allgemeinen Lösung algebraischer Gleichungen mit Radikalen und erkannte dabei die dahinterstehenden Konstruktionen der Gruppentheorie. Mit dem *Satz von Cauchy* und der *Cayley-Tafel*, auch bekannt als Gruppentafel, wurden weitere wichtige Grundsteine der Theorie gelegt. Es folgt die *Theorie kontinuierlicher Transformationsgruppen* von Sophus Lie, mit der wir uns im folgenden auch außeinandersetzen werden. Das aus dem Jahr 1881 stammende Zitat von Henri Poincaré: *„Les mathématiques ne sont qu'une histoire des groupes "*, zu Deutsch *„Die Mathematik ist nur eine Geschichte der Gruppen "*, verdeutlicht, welch große Bedeutung die Gruppentheorie in kurzer Zeit erlangt hat.
Als Geburtsstunde der Quantenphysik gilt die erste Anwendung der Quantenhypothese in der Formulierung des *Plank'schen Strahlungsgesetzes* 1900. Der Eingang der Gruppentheorie in die Physik erfolgte durch Austausch von Mathematikerinnen und Physikern, so löste beispielsweise Emmy Noether in *Invariante Variationsprobleme* mit Hilfe von Gruppentheorie ein Problem, welches in Albert Einsteins erster Veröffentlichung zur *Allgemeinen Relativitätstheorie* offen blieb. Die erste gruppentheoretische Formulierung der Quantenmechanik veröffentlichte Hermann Weyl in der bereits zitierten Arbeit *Gruppentheorie und Quantenmechanik* aus 1928.

3 Mathematische Grundlagen

3.1 Grundbegriffe der Gruppentheorie

Eine *Gruppe* G ist ein Tupel $(G, \circ)$, bestehend aus einer Menge zusammen mit einer Verknüpfung $G \times G \to G$, die folgende Gruppenaxiome erfüllt:

G1. Assoziativität:

$$g \circ (h \circ i) = (g \circ h) \circ i \quad \forall g, h, i \in G \tag{1}$$

G2. Neutrales Element:

$$\exists e \in G : \quad e \circ g = g = g \circ e \quad \forall g \in G \tag{2}$$

G3. Inverses Element:

$$\forall g \in G \;\; \exists g^{-1} : \quad g \circ g^{-1} = e = g^{-1} \circ g \tag{3}$$

In der Physik treten Gruppen üblicherweise als Transformationen auf. Da es sich hierbei häufig um kontinuierliche Transformationen handelt, wie beispielsweise bei der Rotation oder Translation, spielen kontinuierliche Gruppen zur Beschreibung der Symmetrien physikalischer Systeme eine herausragende Rolle. Darum werden wir nun einen genaueren Blick auf die Konstruktion kontinuierlicher Gruppen werfen [6]:

Dafür betrachten wir zunächst eine endliche Gruppe $G = \{g_1, ..., g_n\}$ und bezeichnen deren Elemente durch $g(a) := g_a$. Die Verknüpfungstafel beschreibt die Gruppenstruktur vollständig

$$g(a) \circ g(b) = g(c) \quad a, b, c \in \{1, .., n\} = M \tag{4}$$

Dies definiert eine Funktion $\phi : M \times M \to M$ mit

$$c = \phi(a, b) \tag{5}$$

Nun gehen wir von diskreten Parametern zu kontinuierlichen Parametern über. Eine Gruppe G heißt *kontinuierliche Gruppe in r Parametern*, wenn ihre Elemente von r kontinuierlichen Parametern abhängen. Dabei ist r die minimal mögliche Anzahl der zur Beschreibung notwendigen Parameter und entspricht der Dimension der Gruppe. Die Gruppenmultiplikation wird beschrieben durch

$$g(a) \circ g(b) = g(c) \tag{6}$$

wobei (5) gilt und

$$\phi_i(a_1, ..., a_r, b_1, ..., b_r), \quad i = 1, ..., r \tag{7}$$

reelle Funktionen von reellen Parametern sind. Die Parametrisierung wählen wir so, dass $a = 0$ dem neutralen Element der Gruppe entspricht.

3.2 Lie-Gruppen und Lie-Algebren

Eine *Lie-Gruppe* ist eine kontinuierliche Gruppe, deren Funktionen ϕ_i aus (7) analytisch sind, was bedeutet, dass sie sind lokal durch eine konvergente Potenzreihe gegeben sind. Nun betrachten wir zunächst den Begriff der Algebra, um dann zur Definition der Lie-Algebra vorzudringen.
Eine *Algebra A* über einem Körper $\mathbb{K}$ ist ein $\mathbb{K}$-Vektorraum, der abgeschlossen bezüglich seiner bilinearen Multiplikation ist. Für die bilineare Multiplikation gilt außerdem Assoziativität und Distributivität. Eine *Lie-Algebra* $\mathcal{L}$ erfüllt die zusätzlichen Eigenschaften:

LA1. Antikommutativität

$$x \cdot y = -y \cdot x \quad \forall x, y \in \mathcal{L} \tag{8}$$

LA2. Jacobi-Identität

$$x \cdot (y \cdot z) + y \cdot (z \cdot x) + z \cdot (x \cdot y) = 0 \quad \forall x, y, z \in \mathcal{L} \tag{9}$$

Das bilineare Produkt einer Lie-Algebra heißt *Lie-Produkt* oder *Lie-Klammer*. Der Zusammenhang zwischen der Lie-Gruppe und der zugehörigen Lie-Algebra ist für die Anwendung in der Quantenmechanik von großer Bedeutung und wird klar, wenn man die Lie-Gruppe als glatte reelle Mannigfaltigkeit G mit zusätzlicher Gruppenstruktur auffasst. Die Funktionen (7) entsprechen den Karten der Mannigfaltigkeit. Da diese analytisch sind, sind Gruppenverknüpfung und Inversion beliebig oft differenzierbar. Die Lie-Algebra entspricht dann dem Tangentialraum von G an der Stelle des neutralen Elements T_eG. Demnach ist die Dimension der Lie-Algebra gleich der Dimension der der Lie-Gruppe zugrundeliegenden Mannigfaltigkeit. Nach einer kurzen Einführung in die Darstellungstheorie werden wir diese Konstruktion an einem Beispiel aus der Physik nachvollziehen.

3.3 Grundbegriffe der Darstellungstheorie

Die konkrete Erfassung von Symmetrieeigenschaften verlangt eine Korrelation zwischen den Elementen einer Symmetriegruppe und Vektorräumen [7]. Darstellungen ermöglichen es uns, diese Verbindung herzustellen. Zunächst betrachen wir eine spezielle Darstelllung, die Matrixdarstellung von Gruppen [1], da diese von besonderer praktischer Bedeutung ist:
Die *Matrixdarstellung* einer Gruppe ist eine Homomorphie der Gruppe auf quadratische, nicht-singuläre Matrizen, daher auf Matrizen, deren Determinante ungleich 0 ist.

Sind die Matrizen unitär, so nennt man auch die Darstellung *unitär*. Eine Matrixdarstellung heißt *reduzibel*, falls sie sich auf Blockdiagonale Form transformieren lässt. Die einzelnen Blöcke der Blockdiagonalen Form sind dann selbst Darstellungen der Gruppe. Ist eine Darstellung nicht reduzibel, so heißt sie *irreduzibel*. In der Quantenmechanik entsprechen die Matrizen den linearen Operatoren, die auf dem Hilbertraum der physikalischen Zustände wirken. Für Lie-Algebren wollen wir uns nun einer etwas allgemeineren Formulierung bedienen [7], das zugrundeliegende Konzept ist dasselbe:
Die Darstellung einer d-dimensionalen, linearen Lie-Algebra über $\mathbb{K}$ ist die Abbildung der Elemente auf Endomorphismen (Selbstabbildungen) eines d-dimensionalen, linearen Vektorraums über $\mathbb{K}$:

$$D = \begin{cases} \mathcal{L} \rightarrow gl(\mathcal{V}) \\ a \rightarrow D(a), \quad a \in \mathcal{L} \end{cases} \tag{10}$$

wobei $gl(\mathcal{V})$ die der allgemeinen linearen Lie-Gruppe zugeordnete Lie-Algebra beschreibt. Man nennt $\mathcal{V}$ *Darstellungsraum*. Diese Definition deckt sich mit der obigen insofern, dass $n \times n$-Matrizen auch als Endomorphsimen des $\mathbb{R}^n$ aufgefasst werden können. Die verallgemeinerte Bedingung für Reduzibilität ist, dass der Darstellungsraum $\mathcal{V}$ mindestens einen nicht-trivialen, invarianten Unterraum $\mathcal{V}'$ hat. Jede Darstellung muss die folgenden Darstellungsaxiome erfüllen:

D1. Abbildung des neutralen Elements auf die Identitätsabbildung (bzw. die Einheitsmatrix):

$$D(e) = \mathbb{1} \tag{11}$$

D2. Verträglichkeit des Produkts der Elemente mit dem Produkt der Abbildungen
Für Lie-Gruppen muss also das Produkt der Darstellungen mit der Gruppenverknüpfung verträglich sein:

$$D(g \circ h) = D(g) \circ D(h) \quad \forall g, h \in G \tag{12}$$

Für Lie-Algebren wird entsprechend die Verträglichkeit mit der Lie-Klammer gefordert:

$$D([a_1, a_2]) = [D(a_1), D(a_2)] = D(a_1)D(a_2) - D(a_2)D(a_1) \quad \forall a_1, a_2 \in \mathcal{L} \tag{13}$$

Bei der quantenmechanisch relevanten Darstellung der Lie-Algebra durch Operatoren wird das Lie-Produkt auf den Kommutator abgebildet. Im Folgenden werden die mathematischen Grundlagen auf konkrete Transformationsgruppen angewendet.

4 Lie-Gruppen in der Physik

4.1 Die Rotationsgruppe

Rotationen werden beschrieben durch orthogonale $n \times n$-Matrizen mit reellen Elementen. Diese Matrizen, deren Zeilen- und Spaltenvektoren orthonormal bezüglich des Standardskalarprodukts sind, bilden die *Orthogonale Gruppe* $O(n)$. Es wird unterschieden zwischen Drehungen, die die Spezielle Orthogonale Gruppe $SO(3)$ bilden, und Drehspiegelungen $O(n) \setminus SO(n)$. Die Drehmatrizen haben Determinante 1, die Drehspiegelmatrizen haben Determinante -1. Es handelt sich um eine kontinuierliche Gruppe, da mit den Drehwinkeln reelle, kontinuierliche Variablen die Gruppenelemente beschreiben. Insbesondere handelt es sich um eine Lie-Gruppe, da die auftretenden (trigonometrischen) Funktionen analytisch sind. Um den Zusammenhang zwischen Lie-Gruppe und Lie-Algebra zu veranschaulichen und den Begriff des Generators zu definieren, betrachten wir beispielhaft eine Rotation um die z-Achse im $\mathbb{R}^3$:

$$D_z(\varphi) = \begin{pmatrix} cos(\varphi) & -sin(\varphi) & 0 \\ sin(\varphi) & cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{14}$$

Die Matrix ist ein Element der Matrixdarstellung der Lie-Gruppe der Drehungen. Um zu den Elementen der Lie-Algebra zu gelangen, werden nun die Tangentialvektoren an der Stelle des neutralen Elements berechnet. In der Matrixdarstellung ist das nach dem ersten Darstellungsaxiom D1. (11) die Einheitsmatrix und man sieht leicht, dass diese bei (14) für $\varphi = 0$ gegeben ist. Wir bilden also den Tangentialvektor:

$$\left.\frac{\partial D_z(\varphi)}{\partial \varphi}\right|_{\varphi=0} = \left.\begin{pmatrix} -sin(\varphi) & -cos(\varphi) & 0 \\ cos(\varphi) & -sin(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\right|_{\varphi=0} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{15}$$

Verfährt man analog mit den restlichen Gruppenelementen, lässt sich die zugehörige Lie-Algebra bestimmen zu

$$\mathfrak{o}(n) = \mathfrak{so}(n) = \{A \in Mat(n, \mathbb{R}) : A^T = -A\} \tag{16}$$

was der Menge der schiefsymmetrischen Matrizen entspricht. Es ist festzustellen, dass die verschiedenen Gruppen $O(n)$ und $SO(n)$ zur selben Lie-Algebra führen. Das ist möglich, umgekehrt kann aber nicht zwei verschiedenen Lie-Algebren dieselbe Lie-Gruppe zugrundeliegen. Da die Lie-Algebra nun auf natürliche Weise die lokalen Eigenschaften der Lie-Gruppe in der Umgebung des Einselements beschreibt, finden wir sie auch in der entsprechenden Taylorentwicklung der Drehung um einen infinitesimalen Winkel φ wieder:

$$D_z(\varphi) = \mathbb{1} + \varphi \cdot \left.\frac{\partial D_z(\varphi)}{\partial \varphi}\right|_{\varphi=0} + \mathcal{O}(\varphi^2) \tag{17}$$

Die Elemente der Lie-Algebra sind *Generatoren* der Lie-Gruppe, wir definieren:

$$A_z = -i \left.\frac{\partial D_z(\varphi)}{\partial \varphi}\right|_{\varphi=0} \tag{18}$$

Die imaginäre Einheit wird künstlich eingeführt, da wir diese später für die Hermitizität quantenmechanischer Operatoren benötigen. Gehen wir nun zur Drehung um einen beliebigen Winkel φ über, so folgt mit dem zweiten Darstellungsaxiom (13) und der Reihendarstellung der Matrixexponentialfunktion:

$$D_z(\varphi) = \lim_{n \to \infty} \left(\mathbb{1} + \frac{i\varphi A_z}{n}\right)^n = e^{i\varphi A_z} \tag{19}$$

Die Generatoren generieren somit jeweils einparametrige Untergruppen der Lie-Gruppe. Über die Rechenregeln der Matrixexponentialfunktion, speziell über die sogenannte *Baker-Campbell-Hausdorff-Formel*, hängen daher auch die Gruppenverknüpfung und das Lie-Produkt zusammen.

5 Noether-Theorem

Eines der grundlegendsten Theoreme der Physik ist das Noether-Theorem: *„Zu jeder kontinuierlichen Symmetrie gehört eine Erhaltungsgröße.“* Auch die Umkehrung gilt: *„Jede Erhaltungsgröße ist Generator einer Symmetriegruppe.“* In ihrer Habilitationsschrift *Invariante Variationsprobleme* [5] schreibt Emmy Noether: *„Ist das Integral I invariant gegenüber einer endlichen, von ρ Parametern abhängenden Gruppe im Lieschen Sinne, so werden ρ linear unabhängige Verbindungen der Lagrangeschen Ausdrücke zu Divergenzen - umgekehrt folgt daraus die Invarianz von I gegenüber einer endlichen, von ρ Parametern abhängenden Gruppe im Lieschen Sinne. Der Satz gilt auch im Grenzfall von unendlich vielen Parametern.“* Die genannten Divergenzgleichungen werden in der Physik als *Erhaltungssätze* bezeichnet. Das Wigner-Theorem ist interpretierbar als quantenmechanische Realisierung des Noether-Theorems.

6 Wigner-Theorem

Das Wigner-Theorem ermöglicht, aus der Symmetrie eines quantenmechanischen Systems die entsprechende Erhaltungsgröße abzuleiten. In der Quantenmechanik bezeichnet man eine Messgröße und den ihr zugeordneten Operator als *Observable*. Die Operatoren beobachtbarer Observablen müssen hermitesch sein, damit deren Erwartungswert reell ist. Nach der ausführlichen Betrachtung des Theorems werden wir sehen, dass diese Bedingung automatisch erfüllt ist, da nach dem Noether-Theorem jede Erhaltungsgröße eine Symmetriegruppe generiert. Das Wigner-Theorem [9] besagt: *„Jede Symmetrietransformation von Zustandsvektoren hat eine unitäre oder eine antiunitäre Darstellung."* Um das Theorem mathematisch zu formulieren, definieren wir zunächst einige Begriffe. Ein *Zustandsvektor*

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{20}$$

beschreibt einen physikalischen Zustand im Hilbertraum der quantenmechanischen Zustände. Da sich nur die Wahrscheinlichkeitsamplitude eines Zustandes messen lässt, ist ein Zustandsvektor eines physikalischen Zustands nur bis auf eine *globale Phase*, einen komplexen Vorfaktor von Betrag 1, eindeutig festgelegt. Daher definieren wir den *Einheitsstrahl*

$$\hat{\psi} = \{e^{i\alpha} |\psi\rangle \,, \alpha \in \mathbb{R}\} \tag{21}$$

welcher der Definition nach äquivalent zu einem physikalischen Zustand ist. Das *Strahlprodukt*

$$\hat{\psi}\hat{\phi} = |\, \langle\psi|\phi\rangle \,| \tag{22}$$

entspricht dem Betrag des Skalarprodukts von Repräsentanten des Einheitsstrahls. Analog hat auch jede Gruppe G von Transformationen eine Strahldarstellung $\hat{G}$. In der Quantenmechanik entspricht die Transformation eines physikalischen Systems also einer Transformation von Strahlen. Dabei handelt es sich um eine *Symmetrietransformation* $\hat{T}$, falls diese bijektiv ist und das Strahlprodukt, also die Physik, invariant lässt, dh.

$$\hat{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}, \;\; \hat{\psi} \to \hat{T}\hat{\psi} =: \hat{\psi}', \quad \hat{\psi}'\hat{\phi}' = \hat{\psi}\hat{\phi} \quad \forall \hat{\psi}, \hat{\phi} \in \mathcal{H} \tag{23}$$

Die Symmetrietransformationen eines Systems bilden eine Gruppe, die *Symmetriegruppe*.
Die mathematische Formulierung des Wigner-Theorems lautet:
Für eine Symmetrietransformation $\hat{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ gilt:
Entweder gibt es eine *unitäre Darstellung*

$$\langle T\psi|T\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle \quad \forall\, |\psi\rangle \,, |\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{24}$$

oder es gibt eine *antiunitäre* Darstellung

$$\langle T\psi|T\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^* \quad \forall\, |\psi\rangle \,, |\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{25}$$

wobei die angegebenen Relationen die Definitionen von unitären bzw. antiunitären Transformationen sind. Dabei ist es durch die Transformation selbst bestimmt, ob es eine unitäre oder eine antiunitäre Darstellung gibt, die Existenz beider Darstellungen ist nicht möglich. Der Operator der Darstellung ist eindeutig bis auf einen komplexen Faktor bestimmt. Unsere Voraussetzung ist eine Symmetrietransformation innerhalb eines physikalischen Systems, da diese Transformationen in der physikalischen Anwendung von besonderer Relevanz sind. Damit ist per Definition Bijektivität gegeben, in Weiterentwicklungen des Wigner-Theorems zeigt sich allerdings, dass es genügt, Surjektivität einer Transformation zwischen zwei beliebigen Hilberträumen vorauszusetzen. Wir wollen nun die zuvor formulierte Version des Theorems beweisen.

6.1 Beweis des Wigner-Theorems

Betrachte eine Symmetietransformation (23) einer Symmetriegruppe $\hat{G}$. Zunächst ist zu zeigen, dass eine beliebige Symmetrietransformation der Gruppe ein vollständiges Orthonormalsystem des d-dimensionalen Hilbertraums zu einem vollständigen Orthonormalsystem desselben Hilbertraums transformiert [3]. Um die Notation zu vereinfachen, betrachten wir die Strahltransformation stets auf repräsentativen Zustandsvektoren. Wir betrachten also die Wirkung der Transformation auf die vollständige Orthonormalbasis:

$$T: \ \mathcal{B} = \{|\varphi_n\rangle, n = 1, ..., d\} \ \longrightarrow \ \mathcal{B}' = \{|\varphi'_n\rangle, n = 1, ..., d\} \tag{26}$$

Zunächst betrachten wir die Orthonormalität von $\mathcal{B}'$ und nutzen hierfür die Symmetrieeigenschaft (23) und die Orthonormalität von $\mathcal{B}$:

$$\delta_{nm} = |\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle| = |\langle\varphi'_n|\varphi'_m\rangle| \quad \forall n, m \tag{27}$$

Das Skalarprodukt ist per Definition eine positiv definite hermitesche Sesquilinearform. Aufgrund der Hermitizität folgt

$$\langle\varphi'_n|\varphi'_m\rangle = \langle\varphi'_m|\varphi'_n\rangle^* \ \Rightarrow \ \langle\varphi'_n|\varphi'_m\rangle = \delta_{nm} \tag{28}$$

da somit das Skalarprodukt eines Vektors mit sich selbst reell sein muss. Damit ist $\mathcal{B}'$ ein Orthonormalsystem. Die Vollständigkeit zeigen wir über einen Beweis per Widerspruch. Dafür nehmen wir an, dass $\mathcal{B}'$ nicht vollständig ist. Dann muss es einen Vektor $|\psi'\rangle \neq 0$ geben, der orthogonal zu allen Vektoren in $\mathcal{B}'$ ist:

$$\exists\, |\psi'\rangle \neq 0: \ \langle\varphi'_n|\psi'\rangle = 0 \quad \forall n \tag{29}$$

Aufgrund der Bijektivität unserer Transformation und der Symmetrieeigenschaft (23) gibt es dann einen entsprechenden Vektor $|\psi\rangle \neq 0$, der orthogonal zu allen Vektoren in $\mathcal{B}$ ist:

$$\exists\, |\psi\rangle \neq 0: |\langle\varphi_n|\psi\rangle| = |\langle\varphi'_n|\psi'\rangle| = 0 \quad \forall n \tag{30}$$

Das ist ein Widerspruch zur Vollständigkeit unserer Ausgangsbasis. Damit ist der erste Teil des Beweises abgeschlossen. Da wir nun zwei Basen gegeben haben, können wir die Transformation eines beliebigen Vektors wie folgt beschreiben:

$$T: \ |\psi_c\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \ \longrightarrow \ |\psi'_c\rangle = \sum_n c'_n |\varphi'_n\rangle, \quad c_n \in \mathbb{C} \tag{31}$$

Um die Wirkung der Transformation auf das Skalarprodukt zu ermitteln, müssen wir untersuchen, wie die Faktoren c_n transformieren. Es wird sich später als nützlich erweisen, dazu folgende Vektoren zu definieren:

$$|\alpha_n\rangle \equiv |\varphi_1\rangle + |\varphi_n\rangle \tag{32}$$

Aus der Konstruktion von $\mathcal{B}'$ und der Symmetrieeigenschaft (23) folgt:

$$\langle\varphi'_m|\alpha'_n\rangle = e^{i\tau_m}(\delta_{m1} + \delta_{mn}), \ \ \tau_m \in \mathbb{R} \tag{33}$$

Da $\mathcal{B}'$ ein vollständiges Orthonormalsystem bildet, können wir schreiben:

$$|\alpha'_n\rangle = \sum_m |\varphi'_m\rangle \langle\varphi'_m|\alpha'_n\rangle = e^{i\tau_1} |\varphi'_1\rangle + e^{i\tau_2} |\varphi'_n\rangle \tag{34}$$

Da die Umdefinition komplexer Phasen weder die lineare Unabhängigkeit noch die Vollständigkeit der Basis beeinträchtigt, können wir die komplexen Phasen so umdefinieren, dass

$$T: \ |\alpha_n\rangle = |\varphi_1\rangle + |\varphi_n\rangle \ \longrightarrow \ |\alpha'_n\rangle = |\varphi'_1\rangle + |\varphi'_n\rangle \tag{35}$$

Wie wir gleich sehen werden, haben wir damit die gewünschte Phasenbeziehung bereits festgelegt. Dafür betrachten wir nochmal die Transformation eines allgemeinen Vektors (31), wobei wir $c_1 \neq 0$ und c_1 reell fordern. Die erste Forderung ist ohne Beschränkung der Allgemeinheit möglich, da die Nummerierung der Basisvektoren beliebig war und diese andernfalls entsprechend angepasst werden könnte. Die zweite Forderung ist möglich durch die Wahlfreiheit einer globalen Phase. Unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaft (23) finden wir für die Transformation der Koeffizienten:

$$\begin{aligned} |\langle\varphi_n|\psi_c\rangle| &= |\langle\varphi'_n|\psi'_c\rangle| && (36)\\ \Leftrightarrow \quad |\langle\varphi_n|\sum_m c_m|\varphi_m\rangle| &= |\langle\varphi'_n|\sum_m c'_m|\varphi'_m\rangle| && (37)\\ \Leftrightarrow \quad |\sum_m \delta_{nm}c_m| &= |\sum_m \delta_{nm}c'_m| && (38)\\ \Leftrightarrow \quad |c_n| &= |c'_n| && (39)\end{aligned}$$

Analoge Rechnung mit den in (32) definierten Vektoren ergibt:

$$\begin{aligned} |\langle\alpha_n|\psi_c\rangle| &= |\langle\alpha'_n|\psi'_c\rangle| && (40)\\ \Leftrightarrow \quad |c_1+c_n| &= |c'_1+c'_n| && (41)\end{aligned}$$

Durch Quadrieren der Gleichung erhalten wir:

$$c_1^*c_1 + c_1^*c_n + c_n^*c_1 + c_n^*c_n = c_1'^*c'_1 + c_1'^*c'_n + c_n'^*c'_1 + c_n'^*c'_n \tag{42}$$

Durch Kürzen mit (39) und Teilen der Gleichung durch $c_1 = c'_1$ kommen wir zu:

$$c_n + c_n^* = c'_n + c_n'^* \tag{43}$$

Die Gleichung ist erfüllt, wenn

$$c'_n = \begin{cases} c_n \\ c_n^* \end{cases} \tag{44}$$

Wenn die Koeffizienten beider Vektoren gleichermaßen transformieren, sind die gewünschten Beziehungen für das Skalarprodukt erfüllt. Es bleibt zu zeigen, dass die Koeffizienten zweier beliebiger Vektoren unter derselben Transformation gleichermaßen transformieren müssen. Hierfür machen wir einen Beweis per Widerspruch und nehmen an, dass dem nicht so ist:

$$\begin{aligned} T: \ |\psi_c\rangle \quad &\longrightarrow \quad |\psi'_c\rangle\,,\ \ c'_n = c_n && (45)\\ T: \ |\psi_d\rangle \quad &\longrightarrow \quad |\psi'_d\rangle\,,\ \ d'_n = d_n^* && (46)\end{aligned}$$

Mit den Rechenregeln des Skalarpodukt erhalten wir:

$$|\langle\psi'_c|\psi'_d\rangle| = |\sum_n c_n^* d_n^*| \neq |\sum_n c_n^* d_n| = |\langle\psi_c|\psi_d\rangle| \tag{47}$$

Das ist ein Widerspruch zur Symmetrieeigenschaft (23) und die Aussage des Wigner-Theorems (6), (25) ist vollständig beweisen.

6.2 Kontinuierliche und Diskrete Transformationen

Über die Interpretation von Lie-Gruppen als Mannigfaltigkeiten und Zusammenhangsargumente kann man zeigen, dass es nur für diskrete Symmetrietransformationen antiunitäre Darstellungen geben kann. Zum Beispiel für die Zeitumkehrtransformation ist das notwendigerweise der Fall. In der Konsequenz bedeutet das, dass Gruppenelemente kontinuierlicher Symmetrien unitär sind. Eine kontinuierliche Transformation T ist durch einen unitären Operator U darstellbar als

$$T = zU, \;\; z \in \mathbb{C}, \;\; |z| = 1 \tag{48}$$

Betrachten wir nun die Darstellung der Elemente U durch die Generatoren A_n

$$U(a_n) = e^{ia_n A_n} \tag{49}$$

so ist leicht nachzurechnen, dass aus der Unitarität von $U(a_n)$ die Hermitizität von A_n folgt. Die Observablen und damit die Erhaltungsgrößen sind also direkt durch die Lie-Algebra bestimmt.

6.3 Anwendung auf die Rotationssymmetrie

Die in Matrixdarstellung bereits diskutierte Rotationsgruppe wollen wir nun in Operatordarstellung betrachten und unter Anwendung des Wigner-Theorems die Erhaltungsgröße ermitteln. Dafür betrachten wir die Wirkung einer infinitesimalen Rotation im Winkel φ und machen dabei folgende Näherung:

$$D_{\delta\varphi}\Psi(r,\theta,\varphi) \equiv \Psi(r,\theta,\varphi+\delta\varphi) \approx (1+\delta\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})\Psi(r,\theta,\varphi) \tag{50}$$

Für Drehung um einen beliebigen Winkel φ bilden wir analog zu (19) den Limes

$$\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{\varphi}{n}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^n \Psi(r,\theta,\varphi) = e^{\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}}\Psi(r,\theta,\varphi) \tag{51}$$

wobei wir genutzt haben, dass

$$\delta\varphi = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{\varphi}{n}\right) \tag{52}$$

Führen wir nun mit $\hbar = 1$ den Drehimpulsoperator ein

$$\hat{L}_\varphi = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{53}$$

so erhalten wir

$$D_\varphi\Psi(r,\theta,\varphi) = e^{i\varphi\hat{L}_\varphi}\Psi(r,\theta,\varphi) \tag{54}$$

Der Zusammenhang zwischen der Matrixdarstellung und der Operatordarstellung der Lie-Algebra ergibt sich zu [2]

$$e^{i\varphi\hat{L}_\varphi}\Psi(\vec{r}) = \Psi(e^{i\varphi A_\varphi}\vec{r}) \tag{55}$$

Da es sich bei der Rotationssymmetrie um eine kontinuierliche Symmetrie handelt, folgt mit dem Wigner-Theorem, dass D_φ unitär ist und daraus, dass $\hat{L}_\varphi$ hermitesch ist. Der Drehimpuls ist die Erhaltungsgröße der Rotationsgruppe. Allerdings sind die einzelnen Drehimpulskomponenten aufgrund der Kommutatorrelation

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \tag{56}$$

nicht gleichzeitig messbar. Dazu ist anzumerken, dass unsere Darstellung nicht irredizibel ist, sondern in eine direkte Summe vieler Unterdarstellungen zerfällt. Ein Summand wird aufgespannt von einer Drehimpulsquantenzahl l und den erlaubten $m \in \{-l, ..., l\}$.

6.4 Die Spingruppe

Um die Diskussion zu erleichtern, betrachten wir spezifisch die Spingruppe im dreidimensionalen Raum. Dies ist die $SU(2)$, die Gruppe der unitären 2×2-Matrizen mit Determinante 1. Diese haben die Form

$$\begin{pmatrix} z_1 & z_2 \\ -z_2^* & z_1^* \end{pmatrix} \quad mit \quad |z_1|^2 + |z_2|^2 = 1 \tag{57}$$

Offensichtlich handelt es sich hierbei um eine Lie-Gruppe. Die dazugehörige Lie-Algebra ist die Menge der schiefhermiteschen Matrizen

$$\mathfrak{su}(2) = \{A \in Mat(2, \mathbb{C}) : A^\dagger = -A\} \tag{58}$$

Eine mögliche Basis bilden die Pauli-Matrizen multipliziert mit i:

$$i\sigma_1 = i\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad i\sigma_2 = i\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad i\sigma_3 = i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{59}$$

Die Paulimatrizen erfüllen außerdem die Lie-Algebra-Relation

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \tag{60}$$

welche, wie sich leicht erkennen lässt, der der Drehgruppe $SO(3)$ mit einem zusätzlichen Faktor 2 entspricht. Bei Betrachtung der $SO(3)$ fällt auf, dass nur ganzzahlige Drehimpulsquantenzahlen l zulässig sind. Es gibt aber experimentell begründete Forderungen nach halbzahligen Drehimpulsen, beispielsweise im Stern-Gerlach-Experiment. Auch in den Atomspektren gibt es einen zusätzlichen Freiheitsgrad, der sich nur so erklären lässt. Zusammen mit (60) begründet das die Forderung nach einer Erweiterung der Rotationsgruppe. Es ist nicht möglich, einen Gruppenhomomorphismus zwischen der $SU(2)$ und der $SO(3)$ zu finden, aber es gibt eine wohldefinierte „zwei-zu-eins"Abbildung $SU(2) \to SO(3)$ über die Lie-Algebren [2]. Es lässt sich daraus schließen, dass die $SU(2)$ eine zweifache Überlagerung der $SO(3)$ ist und einer Drehung im Komplexen entspricht. Damit ist die eigentliche Rotationssymmetriegruppe des Raumes die $SU(2)$. Im Alltag fällt uns das bloß nicht auf, da wir nicht sehen können, dass eine Rotation um 360° die Phase der Wellenfunktion eines Spin-1/2-Teilchens ändert.

6.5 Ausblick

Zum Abschluss bleibt zu sagen, dass das Wigner-Theorem natürlich von größerem Nutzen ist, wenn entweder die Erhaltungsgröße oder die zugrundeliegende Symmetrie nicht so offensichtlich ist wie bei der Rotationssymmetrie. Ein komplexeres Beispiel aus der Teilchenphysik ist der Eightfold Way [4], welcher mit Hilfe des Theorems konstruiert wurde. Es handelt sich um eine Klassifikation von Hadronen in der Quantenchromatik und ist eine Konsequenz der Flavour-Symmetrie. Die $SU(2)$-Symmetriegruppe des Isospins wird erweitert zur $SU(3)$-Flavour-Symmetriegruppe und nach deren Eigenschaften werden Baryonen und Mesonen jeweils als Oktett angeordnet. Ein Austausch von Quarks über die starke Wechselwirkung wird durch die Gruppenverknüpfung der $SU(3)$ beschrieben.

Literaturverzeichnis

[1] B. Aradi. "Einführung in die Gruppentheorie". In: *Vorlesungsskript* ().

[2] A. Hebecker. "Quantenmechanik". In: *Vorlesungsskript* (2019).

[3] H. van Hees. "Diskrete Symmetrietransformationen". In: *Vorlesungsskript* (1998).

[4] Y. Ne'eman M. Gell-Mann. "The Eightfold Way". In: *Perseus Pub.* (2000).

[5] E. Noether. "Invariante Variationsprobleme". In: *Nachrichten von der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen. Mathematisch-physikalische Klasse, aus dem Jahre 1918, S.235-257. Weidmannsche Buchhandlung* (1918).

[6] S. Scherer. "Gruppentheorie in der Physik". In: *Vorlesungsskript* (2009).

[7] S. Scherer. "Symmetrien und Gruppen in der Teilchenphysik". In: *Springer Spektrum* (2016).

[8] H. Weyl. "Gruppentheorie und Quantenmechanik". In: *Wissenschaftliche Buchgesellschaft Darmstadt* (1967).

[9] E. Wigner. "Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantrenmechanik der Atomspektren". In: *Vieweg* (1977).