Anhang A

Erhaltungssätze und Symmetrien

Invarianzen von Naturgesetzen bezüglich Transformationen, auch Symmetrien genannt, spielen in der Physik eine wesentliche Rolle. Wahrscheinlich sind sie sogar der Schlüssel zur Formulierung von Naturgesetzen überhaupt. Beispiele für solche Transformationen, die die Naturgesetze invariant lassen, sind Verschiebungen in Raum und Zeit oder Verschiebungen mit einer konstanten Geschwindigkeit (Lorentz-Transformation). Wir glauben, daß es keine Rolle spielt, wo im Universum, zu welcher Zeit oder in welchem Inertialsystem wir ein Experiment machen. Ob diese Annahme allgemeine Gültigkeit hat, wissen wir nicht exakt, sondern nur mit einer durch die Experimente gegebenen Genauigkeit.

Es zeigt sich, daß mit solchen Invarianzen Erhaltungsgrößen (quantenmechanisch sind es erhaltene Quantenzahlen) verknüpft sind, wie zum Beispiel Energie, Impuls, Drehimpuls, Ladung usw. Es gibt ein Theorem (Noether-Theorem), das besagt, daß es zu jeder Transformation, die ein System invariant läßt, eine in diesem System erhaltene Größe gibt. Dieser Satz hat für die Physik eine fundamentale Bedeutung.

A.1 Symmetrien, Transformationen und Erhaltungssätze

A.1.1 Invarianz der Hamilton-Funktion

a) Klassisch: Die Hamilton-Funktion $H(p_i, q_i)$ für n Massenpunkte ($i = 1, \ldots, 3n$; p_i, q_i sind die Impuls- und Ortskoordinaten) entspricht der Gesamtenergie des Systems:

$$H = T + V \tag{A.1}$$

Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen lauten:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}; \qquad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{A.2}$$

Der erste Term beschreibt die Kräfte, der zweite die Geschwindigkeiten. Am Beispiel eines Massepunktes im Erdfeld ergibt sich:

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + m \cdot g \cdot z \tag{A.3}$$

$$\dot{p}_{x,y} = 0, \qquad \dot{p}_z = -mg, \qquad \dot{q}_i = p_i/m$$

Als weiteres Beispiel betrachten wir ein freies, relativistisches Teilchen mit

$$H = E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}. \tag{A.4}$$

Da die Energie nicht von den Ortskoordinaten q_i abhängt, folgt $\dot{\vec{p}} = 0$ wie für ein freies Teilchen erwartet. Für die Geschwindigkeit ergibt sich:

$$\dot{q}_i = \beta_i = \frac{\partial E}{\partial p_i} = \frac{p_i}{E} \tag{A.5}$$

Wir betrachten eine Hamilton-Funktion, die gegenüber Translationen des Bezugssystems invariant bleibt. Die Translation sei (zur Vereinfachung schreiben wir x, y, z statt q:

$$\begin{aligned} x_i &\to x_i + \delta x_i, & \delta x_i &= \delta x \;\; \forall\, i \\ y_i &\to y_i + \delta y_i, & \delta y_i &= \delta y \;\; \forall\, i \\ z_i &\to z_i + \delta z_i, & \delta z_i &= \delta z \;\; \forall\, i \end{aligned} \tag{A.6}$$

Dabei können die $\delta x,\ \delta y,\ \delta z$ unabhängig gewählt werden. Die Änderung von H ist:

$$\delta H = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial x_i}\delta x + \frac{\partial H}{\partial y_i}\delta y + \frac{\partial H}{\partial z_i}\delta z \right) = -\delta x \sum_i \dot{p}_{xi} - \delta y \sum_i \dot{p}_{yi} - \delta z \sum_i \dot{p}_{zi} \tag{A.7}$$

Wenn H invariant gegenüber dieser Transformation ist, das heißt $\delta H = 0$, ergibt sich:

$$\sum_i \dot{p}_{xi} = 0 \;\Leftrightarrow\; \sum_i p_{xi} = const. \tag{A.8}$$

und entsprechend für die $y,\ z$ Komponenten. Aus der Invarianz der Hamilton-Funktion gegenüber Translationen des Raumes folgt also die Erhaltung des Gesamtimpulses des Systems.

Entsprechend folgt aus der Invarianz der Hamilton-Funktion gegenüber Translationen der Zeit die Energieerhaltung.

b) Quantenmechanisch: In der Quantenmechanik wird die Hamilton-Funktion H zum Hamilton-Operator $\mathbb{H}$, der auf Energie-Eigenzustände ψ angewandt ergibt:

$$\mathbb{H}\psi = E\psi \tag{A.9}$$

Eine Transformation U wirkt wie folgt auf das System:

$$U(\mathbb{H}\psi) = U\mathbb{H}U^{-1}U\psi = \mathbb{H}' \cdot \psi' \tag{A.10}$$

Wenn $\mathbb{H}$ invariant ist:

$$\mathbb{H}' = U\mathbb{H}U^{-1} = \mathbb{H} \qquad \Rightarrow U\mathbb{H} = \mathbb{H}U \Rightarrow\; [U, \mathbb{H}] = 0 \tag{A.11}$$

Das heißt, wenn $\mathbb{H}$ unter der Transformation U invariant ist, vertauschen U und $\mathbb{H}$ und können deshalb gemeinsame Eigenzustände haben. Allgemein gilt:

> Zu jeder Transformation, die $\mathbb{H}$ invariant läßt, gibt es einen Operator, dessen Eigenwerte erhalten sind.

Zum Beispiel ist der Operator für die räumliche Translation der Impulsoperator. Wir machen uns das folgendermaßen klar: Unter einer infinitesimalen Translation

$$\delta U: \ \vec{x} \to \vec{x} + \delta\vec{x} \tag{A.12}$$

transformiert sich eine Wellenfunktion:

$$\psi(\vec{x}) \to \psi(\vec{x} + \delta\vec{x}) = \psi(\vec{x}) + \delta\vec{x} \cdot \nabla\psi(\vec{x}) = (1 + i\delta\vec{x}\,\vec{\mathbb{P}})\psi(\vec{x}). \tag{A.13}$$

Dabei wurde $\nabla = i\vec{\mathbb{P}}$ benutzt. Eine endliche Translation

$$U(\Delta\vec{x}): \ \vec{x} \to \vec{x} + \Delta\vec{x}, \qquad \text{mit } \Delta\vec{x} = \lim_{n\to\infty} n\,\delta\vec{x}, \tag{A.14}$$

läßt sich aus unendlich vielen infinitesimalen Translationen aufbauen:

$$\lim_{n\to\infty}(1 + i\vec{\mathbb{P}}\delta\vec{x})^n = \exp(i\vec{\mathbb{P}}\Delta\vec{x}) = U(\Delta\vec{x}) \tag{A.15}$$

Die Operatoren $\vec{\mathbb{P}} = (\,\mathbb{P}_x,\, \mathbb{P}_y,\, \mathbb{P}_z)$ nennt man die Generatoren der Translationsgruppe (zum Gruppenbegriff siehe unten). Da $\mathbb{H}$ mit $\vec{\mathbb{P}}$ kommutiert, $[\mathbb{H}, \vec{\mathbb{P}}] = 0$, gibt es gemeinsame Eigenzustände, die Impulszustände

$$\psi(\vec{x}) = \psi_0 \cdot e^{-i(E\,t - \vec{p}\,\vec{x})}, \tag{A.16}$$

und der Eigenwert, der Impuls, ist erhalten.

A.1.2 Gruppen

Mathematisch hat eine Transformation die Struktur einer Gruppe, die folgenden Axiomen genügt:

> Eine Gruppe ist eine Menge $\mathcal{G}$ mit einer Verknüpfung ($\cdot$ oder $+$) der Gruppenelemente mit folgenden Eigenschaften:
>
> - $a \cdot b \in \mathcal{G} \quad \forall a, b \in \mathcal{G}$
> - $a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c \quad \forall a, b, c \in \mathcal{G}$
> - $\exists\ e$ (Einselement) $: a \cdot e = e \cdot a = a \quad \forall a \in \mathcal{G}$
> - $\exists\ a^{-1}$(Inverses) $: a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e \quad \forall a \in \mathcal{G}$

Beispiele sind die ganzen Zahlen mit der Addition oder die rationalen Zahlen mit der Multiplikation. Auch Translationen oder Drehungen mit der Verknüpfung einer Hintereinanderausführung bilden eine Gruppe. Zwei Drehungen nacheinander ausgeführt sind äquivalent einer Gesamtdrehung. Die kontinuierlichen Drehungen entsprechen der Gruppe der orthogonalen Transformationen (im Dreidimensionalen die Gruppe $O(3)$). Eine Gruppe kann aber auch diskrete Elemente haben, zum Beispiel Drehungen, die die 6-fach symmetrische Figur in Abb. A.1 in sich selbst überführt.

Interessant ist, daß die Reihenfolge von zwei Translationen oder Drehungen in einer Ebene keine Rolle spielt (Abb. A.2 oben). Man sagt dann, die Gruppe ist kommutativ oder abelsch. Drehungen im Dreidimensionalen dagegen sind nicht-kommutativ oder nicht-abelsch (Abb. A.2 unten).

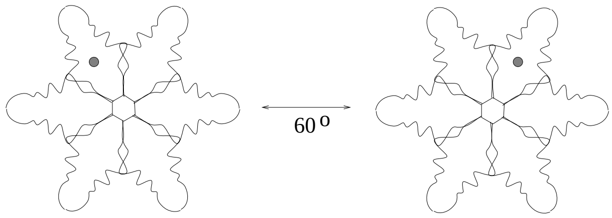

Abbildung A.1: Diskrete Symmetrie eines Kristalls.

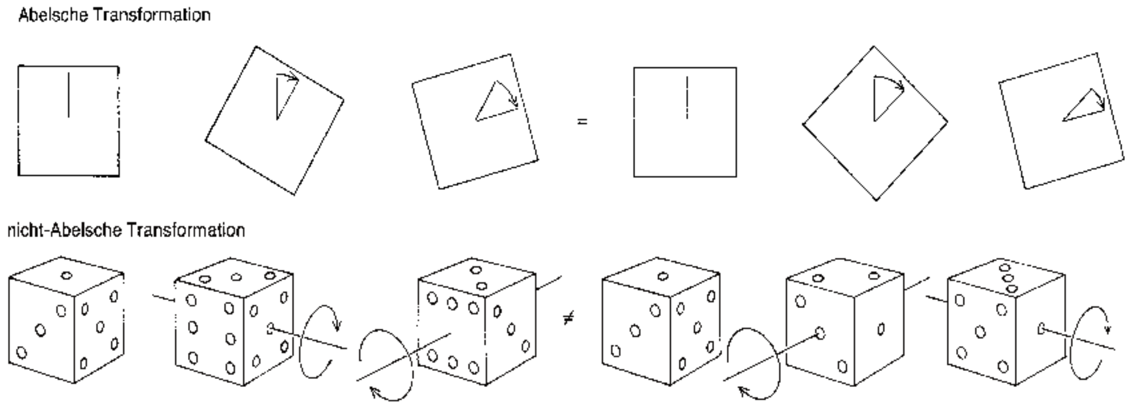

Abbildung A.2: Die Abbildung zeigt anschaulich, daß Drehungen in der Ebene (oben) unabhängig von der Reihenfolge sind, während das im Dreidimensionalen (unten) allgemein nicht gilt.

A.2 Drehungen

A.2.1 Generatoren der Drehgruppe

Wir betrachten eine infinitesimalen Drehung

$$\delta U: \ \vec{x} \to \vec{x} + \delta\vec{x} \tag{A.17}$$

Als Beispiel nehmen wir eine Drehung um $\delta\phi$ um die z-Achse:

$$R_z(\delta\phi): \qquad \vec{x} + \delta\vec{x} = \begin{pmatrix} 1 & -\delta\phi & 0 \\ \delta\phi & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x - \delta\phi\, y \\ y + \delta\phi\, x \\ z \end{pmatrix} \tag{A.18}$$

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) \to \psi(\vec{x} + \delta\vec{x}) &= \psi(\vec{x}) - \delta\phi\, y \frac{\partial\psi}{\partial x} + \delta\phi\, x \frac{\partial\psi}{\partial y} + \ldots && \text{(A.19)} \\ &= \left\{ 1 + \delta\phi \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} \psi(\vec{x}) && \text{(A.20)} \\ &= (1 + iL_z\delta\phi)\, \psi(\vec{x}) && \text{(A.21)} \end{aligned}$$

mit

$$L_z = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right) \tag{A.22}$$

und entsprechend $L_x,\ L_y$. Der Operator $D(R_j(\delta\phi)) = 1 + iL_j\delta\phi$ ist eine lineare, unitäre Transformationen im Hilbertraum der Zustände $\psi(\vec{x})$ und wird eine Darstellung der infinitesimalen Drehung $R_j(\delta\phi)$ genannt.

Die Darstellung einer endlichen Drehung erhält man durch wiederholte Anwendung einer infinitesimalen Drehung:

$$D(R_j(\phi)) = \lim_{n\to\infty}\left(1 + L_j\frac{\phi}{n}\right)^n = e^{iL_j\phi} \tag{A.23}$$

Die Operatoren L_j sind die "Generatoren der Drehgruppe SO(3), die spezielle orthogonale Gruppe, das sind die ortogonalen 3×3-Matrizen mit der Determinante 1, für deren Elemente U gilt:

$$UU^T = 1, \qquad \det U = 1 \tag{A.24}$$

Die Gruppe SO(3) hat 3 kontinuierliche Parameter und ist damit eine Lie-Gruppe. Sei zum Beispiel $\vec{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$, dann kann eine endliche Drehung im Hilbertraum dargestellt werden als:

$$D(R(\vec{\theta})) = e^{i\vec{L}\vec{\theta}} \tag{A.25}$$

A.2.2 Ganzzahlige Drehimpulse

Die Generatoren der Drehgruppe sind die Drehimpulsoperatoren $\vec{\mathbb{L}} = (\mathbb{L}_x,\ \mathbb{L}_y,\ \mathbb{L}_z)$:

$$\vec{\mathbb{L}} = \vec{x}\times\vec{\mathbb{P}} = -i\vec{x}\times\vec{\nabla} \tag{A.26}$$

Wenn der Hamilton-Operator invariant gegenüber Drehungen ist, gibt es gemeinsame Eigenzustände zu $\mathbb{H}$, $\vec{\mathbb{L}}^2$ und $\mathbb{L}_z$. Die Drehimpulsoperatoren wirken nur auf die Winkelabhängigkeit der Wellenfunktion, ausgedrückt in Kugelkoordinaten $(r,\ \theta,\ \phi)$. Die Eigenfunktionen zu ganzzahligem Drehimpuls sind die Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta,\phi)$ (siehe Particle Physics Booklet [**?**]):

$$\vec{\mathbb{L}}^{\,2} Y_l^m = l(l+1)\,Y_l^m, \qquad \mathbb{L}_z Y_l^m = m\,Y_l^m \tag{A.27}$$

Bei Rotation des Zustandes $Y_l^m(\theta,\phi)$ um die y-Achse mit dem Winkel α ergibt sich der neue Zustand:

$$e^{-i\alpha\mathbb{L}_y}\cdot Y_l^m(\theta,\phi) = \sum_{m'=-l}^{+l} d^l_{m',m}(\alpha)\cdot Y_l^{m'}(\theta,\phi) \tag{A.28}$$

Die d-Funktionen findet man tabelliert zum Beispiel im Particle Data Book. Die Gleichung (A.28) benutzt, dass die Funktionen Y_l^m zu festem l $(2l+1)$-dimensionale Darstellungen der Drehgruppe sind, das heißt, unter Drehungen transformieren sich die Y_l^m so, dass sie als Linearkombinationen von $Y_l^{m'}$ mit gleichem l dargestellt werden können. Die Funktionen $d^l_{m',m}$ sind die Elemente der entsprechenden Darstellungsmatrix.

A.2.3 Halbzahlige Drehimpulse

Experimentell hat man festgestellt, daß auch Zustände mit halbzahligem Spin auftreten (Stern-Gerlach-Experiment zur Bestimmung des Spins des Elektrons).

Wir wollen im folgenden den formalen Weg der Einführung halbzahliger Spins über die Darstellung von Gruppen skizzieren: Die Generatoren der Drehgruppe, die wir jetzt mit $\vec{\mathbb{J}} = (\mathbb{J}_x, \mathbb{J}_y, \mathbb{J}_z)$ bezeichnen wollen (L soll weiterhin Bahndrehimpulse bezeichnen), bilden eine "Lie-Algebra"[1], die durch durch folgende Vertauschungsrelationen definiert ist:

$$[\mathbb{J}_i, \mathbb{J}_j] = \mathbb{J}_i\mathbb{J}_j - \mathbb{J}_j\mathbb{J}_i = i\,\epsilon_{ijk}\,\mathbb{J}_k \tag{A.29}$$

Dieser Ausdruck ist ungleich 0 für $i \neq j$, das heißt die Ausführung infinitesimaler Drehungen ist nicht-kommutativ (= nicht-abelsch). Man kann zeigen, daß $\vec{\mathbb{J}}^2$ mit allen Operatoren der Algebra vertauscht (= 'Casimir-Operator'), also:

$$\left[\mathbb{J}^2, \mathbb{J}_i\right] = 0 \qquad \text{für alle } i \tag{A.30}$$

$$[\mathbb{J}_i, \mathbb{J}_j] \neq 0 \qquad \text{für } i \neq j \tag{A.31}$$

Damit ist die maximale Anzahl kommutierender Operatoren 2, zum Beispiel $\mathbb{J}^2$, $\mathbb{J}_z$.

Die Eigenzustände zu $\mathbb{J}^2$, $\mathbb{J}_z$ bestimmen die 'irreduziblen Darstellungen' $|j, j_z\rangle$ der Drehgruppe:

$$\mathbb{J}^2|j, j_z\rangle = j(j+1)|j, j_z\rangle \tag{A.32}$$

$$\mathbb{J}_z|j, j_z\rangle = j_z|j, j_z\rangle \tag{A.33}$$

Zu jedem j gehören $2j+1$ Zustände mit unterschiedlichen j_z. Diese Zustände transformieren sich bei Drehungen untereinander (j bleibt fest wegen der Drehimpulserhaltung). Die Darstellung heißt 'irreduzibel', weil man auch mindestens die $2j+1$ Zustände braucht.

Die Drehgruppe $O(3)$ ist homomorph[2] zu der Gruppe $SU(2)$, der speziellen unitären Gruppe in 2 Dimensionen ('speziell' heißt hier, daß die Determinanten der Matrizen gleich 1 (und nicht -1) sind.

Die niedrigste Darstellung (Fundamentaldarstellung) der $SU(2)$ hat $j = 1/2$ mit $2j+1 = 2$ Zuständen, die als 2-komponentige Spinoren dargestellt werden können:

$$\left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{A.34}$$

$$\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{A.35}$$

Die beiden Spinoren sind die Basisvektoren der Fundamentaldarstellung. In dieser Darstellung werden die Drehimpulsoperatoren durch die Pauli-Matrizen (**??**) dargestellt:

$$\mathbb{J}_z = \frac{1}{2}\sigma_z \tag{A.36}$$

[1] In einer Algebra sind zwei Verknüpfungen definiert, Multiplikation und Addition; der Name 'Lie' weist darauf hin, daß die zugrundeliegende Gruppe kontinuierlich ist.

[2] Ein Gruppen-Homomorphismus ist eine Abbildung einer Gruppe auf eine andere, die die Verknüpfungen erhält.

Die Operatoren $\mathbb{J}^2$ und $\mathbb{J}_z$ sind diagonal, $\mathbb{J}^2$ ist ein Vielfaches der Einheitsmatrix und $\mathbb{J}_z$ hat die Eigenwerte $-j$, $-(j-1)$, $\ldots$, $j-1$, j) in der Diagonalen, für $j = 1/2$:

$$\mathbb{J}_z = \begin{pmatrix} +\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{A.37}$$

A.2.4 Kopplung von Drehimpulsen

In Systemen von Teilchen koppeln die einzelnen Drehimpulse (Eigen- und Bahndrehimpulse) zu einem Gesamtdrehimpuls, der die Rotationseigenschaften des Systems bestimmt. Die Zustände

$$|j_1, m_1\rangle, \quad |j_2, m_2\rangle \tag{A.38}$$

koppeln zu dem neuen Zustand:

$$|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle \;=\; |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \tag{A.39}$$

Die $(2j_1{+}1)(2j_2{+}1)$-dimensionalen Darstellungsmatrizen zu diesen Zuständen erhält man durch das direkte Produkt ($\otimes$) der Matrizen zu j_1 und j_2. Diese können allerdings zerlegt werden in eine direkte Summe ($\oplus$) von irreduziblen Darstellungen, die den möglichen Drehimpulskopplungen J mit $J = |j_1 - j_2|, \ldots, j_1 + j_2$ entsprechen. Symbolisch kann man schreiben:

$$j_1 \otimes j_2 \;=\; |j_1 - j_2| \;\oplus\; |j_1 - j_2 + 1| \;\oplus\; \ldots \;\oplus\; j_1 + j_2 - 1 \;\oplus\; j_1 + j_2 \tag{A.40}$$

Zum Beispiel können zwei Spin-1/2-Teilchen zum Gesamtspin 0 oder 1 koppeln:

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 0 \oplus 1 \tag{A.41}$$

Die Zustände des gekoppelten Systems $|J\,M\rangle$ erhält man durch Überlagerung der Zustände $|j_1\,m_1,\; j_2\,m_2\rangle$, für die $M = m_1 + m_2$ gilt:

$$|J\,M,\; j_1\,j_2\rangle = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1 + m_2 = M}} |j_1\,m_1,\; j_2\,m_2\rangle\langle j_1\,m_1,\; j_2\,m_2|J\,M,\; j_1\,j_2\rangle \tag{A.42}$$

Die Kopplung der einzelnen Drehimpulse zu einem neuen Gesamtdrehimpuls wird durch die Clebsch-Gordon-Koeffizienten $\langle j_1\,m_1,\; j_2\,m_2|J\,M,\; j_1\,j_2\rangle$ festgelegt. Die Clebsch-Gordon-Koeffizienten sind in folgender Form tabelliert zu finden (siehe zum Beispiel Particle Physics Booklet [**?**]):

$j_1 \otimes\ j_2$	J M ....
$m_1\,m_2$ · · · · ·	Koeffizienten (ohne $\sqrt{\ }$)

Für unser obiges Beispiel $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2}$ findet man:

$$J = 0,\, M = 0: \quad \left|0\,0,\, \tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\right\rangle \quad = \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\, +\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\, +\frac{1}{2}\right\rangle \tag{A.43}$$

$$J = 1,\, M = \pm 1: \quad \left|1\, \pm 1,\, \tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\right\rangle \quad = \left|\frac{1}{2}\, \pm\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\, \pm\frac{1}{2}\right\rangle \tag{A.44}$$

$$J = 1,\, M = 0: \quad \left|1\,0,\, \tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\right\rangle \quad = \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\, +\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\, +\frac{1}{2}\right\rangle \tag{A.45}$$

Man spricht hier von einer Zerlegung in Multipletts ('$(2j + 1)$-pletts'): zwei Spin-1/2-Teilchen können zu einem Singulett- oder Triplett-Zustand koppeln.

Jede höhere Darstellung kann durch Produkte der Fundamentaldarstellungen erzeugt werden:

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \;\ldots\; \otimes \frac{1}{2} = \ldots \;\oplus\; \ldots \;\oplus\; \ldots \tag{A.46}$$

Diese Aussage spielt auch für den Aufbau der Hadronen aus Quarks eine Rolle. Es treten Hadronenmultipletts auf, die Darstellungen einer Symmetriegruppe sind.