Grundlagen der Darstellungstheorie
(Symmetrien in der QM)

Literatur: Grawert, Fonda - Ghirardi

Viele Naturgesetze sind invariant unter Symmetrie - Transformationen.

* diskrete Symmetrien

  Parität P : $\vec{x} \to -\vec{x}$

  Zeitumkehr T : $t \to -t$

* kontinuierliche Symmetrien

  Translation: $\vec{x} \to \vec{x} + \vec{a}$

  Drehung: $\vec{x} \to R\vec{x}$ $(R \in SO(3))$

  etc.

Diese bilden i.a. Symmetrie - Gruppen

G Gruppe $\Leftrightarrow$

* Produkt

  $\forall_{g_1, g_2 \in G} \quad g_1 \circ g_2 \in G$

* neutrales Element

  $\exists_{e \in G} \forall_{g \in G} \quad e \circ g = g \circ e = g$

* inverses Element

  $\forall_{g \in G} \exists_{g^{-1} \in G} \quad g^{-1} \circ g = g \circ g^{-1} = e$

* Assoziativität

  $\forall_{a,b,c \in G} \quad (a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)$

Wichtige Symmetriegruppen sind die (kompakten) Lie-Gruppen, z.B. $SO(n)$, $SU(n)$, $Sp(n)$, E_6, E_7, E_8, ...

($\rightarrow$ Klassifikation durch E. Cartan)

Betrachte als Beispiel die Drehgruppe $SO(3)$ in 3 Raumdimensionen.

$$SO(3) = \{ R : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3 \mid R \text{ linear}, \; R R^T = \mathbb{1}, \; \det R = 1 \}$$

mit der Gruppenstruktur

$$\circ : SO(3) \times SO(3) \longrightarrow SO(3)$$

$$(R_1, R_2) \longmapsto R_1 R_2$$

Die zugehörige Lie-Algebra ist $so(3)$:

$$so(3) = \{ \Theta : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3 \mid \Theta \text{ linear}, \; \Theta^T = -\Theta \}$$

Es gelten folgende Eigenschaften:

1) $so(3) \cong \mathbb{R}^3$: $\quad \vec{a} \mapsto I(\vec{a})$

mit $I(\vec{a})\vec{b} = \vec{a} \times \vec{b}$

2) $\Theta \in so(3) \Rightarrow \exp \Theta \in SO(3)$

3) $\exp$ ist surjektiv:

$$\forall_{R \in SO(3)} \; \exists_{\vec{\omega} \in \mathbb{R}^3} \quad R = e^{I(\vec{\omega})}$$

wobei $\quad \vec{\omega}$ Drehvektor

$|\vec{\omega}|$ Drehwinkel

$\dfrac{\vec{\omega}}{|\vec{\omega}|}$ Drehachse

4) Die von der Gruppenstruktur auf $so(3)$ induzierte Struktur ist:

$$[\ldots,\ldots]: \quad so(3) \times so(3) \longrightarrow so(3)$$
$$(\theta_1, \theta_2) \longmapsto [\theta_1, \theta_2]$$

mit $[\Theta_1, \Theta_2] = \Theta_1\Theta_2 - \Theta_2\Theta_1$.

$[\ldots,\ldots]$ ist antisymmetrisch, bilinear und erfüllt die Jacobi-Identität

5) Für $\Theta_1 = I(\vec{\omega}_1)$, $\Theta_2 = I(\vec{\omega}_2)$:

$$[\Theta_1, \Theta_2] = I(\vec{\omega}_1 \times \vec{\omega}_2)$$

6) Für eine O.N.-Basis e_1, e_2, e_3 von $\mathbb{R}^3$ erhält man Basis von $so(3)$ durch $D_k = I(e_k)$ $(k = 1,2,3)$. Dann

$$(D_k)_{lm} = \varepsilon_{klm}$$

und

$$[D_k, D_l] = \varepsilon_{klm} D_m$$

Strukturkonstanten d. Lie-Algebra

Drehungen in <u>klassischer</u> Mechanik.

Die Aktion von $SO(3)$ auf Orts- und Impulsvektor ist

$$(\vec{x}, \vec{p}) \longmapsto (R\vec{x}, R\vec{p}),$$

so daß man aus Kurven $\vec{x}(t)$, $\vec{p}(t)$ gedrehte Kurven $R\vec{x}(t)$, $R\vec{p}(t)$ erhält.

Es gilt mit der Definition

$$H(\vec{x}, \vec{p}) \text{ rotationsinvariant}$$
$$:\Longleftrightarrow \forall_{R \in SO(3)} \; H(R\vec{x}, R\vec{p}) = H(\vec{x}, \vec{p})$$

und mit $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$

$$H(\vec{x}, \vec{p}) \text{ rotationsinvariant} \Longleftrightarrow \{\vec{L}, H\} = 0$$

Ist z.B.

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(r),$$

so ist mit einer Lösung $\vec{x}(t)$, $\vec{p}(t)$ auch $R\vec{x}(t)$, $R\vec{p}(t)$ eine Lösung, und $\vec{L}(t) = \vec{x}(t) \times \vec{p}(t)$ ist zeitunabhängig.

Es gilt also Drehimpulserhaltung (wie auch aus dem Noether-Theorem folgt).

In der Quantenmechanik sind die Objekte nicht mehr Vektoren, sondern Wellenfunktionen in einem Hilbertraum.

→ Was bedeutet es, eine Drehung auf eine Wellenfunktion anzuwenden?

→ Darstellung der Drehgruppe

Wir haben einen Hilbertraum (zunächst ohne Spin)

$$\mathcal{H} = \{ \psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C} \mid \langle \psi | \psi \rangle < \infty \}.$$

Wir suchen dann eine Darstellung der Drehgruppe auf dem Hilbertraum

$$D : SO(3) \longrightarrow \mathrm{Aut}\, \mathcal{H}$$

Automorphismen von $\mathcal{H}$

so daß

$$\psi(\vec{x}) \longmapsto (D(R)\psi)(\vec{x}) = \psi'(\vec{x})$$

den „gedrehten Zustand" ergibt.

Sei $\vec{l}(s)$ eine Höhenlinie, d.h. $\psi(\vec{l}(s)) = \text{const.}$

Wir wollen dann fordern, daß $R\,\vec{l}(s)$ eine Höhenlinie des gedrehten Zustands ψ' ist.

Diese Forderung wird erfüllt durch

$$\boxed{(D(R)f)(\vec{x}) = f(R^{-1}\vec{x})}$$

Diese Abbildung hat folgende Eigenschaften:

a) $D(R_1)\,D(R_2) = D(R_1 R_2)$

(Darstellungseigenschaft)

b) $D(Id_{\mathbb{R}^3}) = Id_{\mathcal{H}}$

c) $D^+(R) = D^{-1}(R)$

(Unitarität)

↳ $D(R)f = f' \rightarrow \langle f', f' \rangle = \langle f, f \rangle$

* Die Darstellungseigenschaft zeigt man durch (für $R_1, R_2 \in SO(3)$)

$$\begin{aligned} D(R_1)\,D(R_2)\,f(\vec{x}) &= D(R_1)\,f(R_2^{-1}\vec{x}) \\ &= f(R_2^{-1}R_1^{-1}\vec{x}) \\ &= f((R_1R_2)^{-1}\vec{x}) \\ &= D(R_1R_2)\,f(\vec{x}). \end{aligned}$$

Eigenschaft b) ist offensichtlich.

* Man kann zeigen, daß allg.

$$D(R_{\vec{\omega}}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{L}\right).$$

d.h. die Komponenten des Drehimpulses sind gerade die Generatoren (Erzeugenden) der Drehungen auf q.m. Zuständen.

z.B. in sphärischen Polarkoordinaten r, ϑ, φ:

$$\psi(\vec{x}) = \sum_{l,m} \tilde{f}_l(r)\, Y_l^m(\vartheta,\varphi)$$

mit

$$L_3 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \qquad \vec{\omega} = \alpha\, e_3$$

also

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha L_3\right) = \exp\left(-\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

Es ist

$$Y_l^m = f(\vartheta)\, e^{im\varphi}$$

Also

$$\begin{aligned}\exp\left(-\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) Y_l^m &= f(\vartheta)\sum_{k=0}^{\infty}(-\alpha)^k (im)^k e^{im\varphi} \\ &= f(\vartheta)\exp(-im\alpha)\, e^{im\varphi} \\ &= f(\vartheta)\, e^{im(\varphi-\alpha)} \\ &= Y_l^m(\vartheta, \varphi-\alpha)\end{aligned}$$

und durch Linearität für allg.

$$\psi(\vec{x}) = \sum_{l,m}\tilde{f}_l(r)\, Y_l^m(\vartheta,\varphi).$$

Also hat $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{L}\right)$ die für $D(R_{\vec{\omega}})$ gewünschten Eigenschaften.

* Die Unitarität $D^+(R) = D^{-1}(R)$
folgt unmittelbar aus $D(R_{\vec{\omega}}) = \exp(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\,\vec{L})$,
da $\vec{L}$ selbstadjungiert ist.
Alternativ zeigt man die Erhaltung
der Norm bzw. des Skalarprodukts:

$$< D(R)\,\phi(\vec{x}),\ D(R)\,\psi(\vec{x}) > =$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} \phi^*(R^{-1}\vec{x})\ \psi(R^{-1}\vec{x})\ d^3x$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} \underbrace{|\det R|}_{=1}\ \phi^*(\vec{x})\ \psi(\vec{x})\ d^3x$$

$$= < \phi(\vec{x}), \psi(\vec{x}) >$$

Für eine beliebige Symmetriegruppe G
nennt man eine Abbildung

$$D : G \to \mathrm{Aut}\,\mathcal{H}$$

mit den Eigenschaften

a) $\forall_{g_1, g_2 \in G} \quad D(g_1)\,D(g_2) = D(g_1 g_2)$
(Darstellungseigenschaft)

b) $D(\mathrm{Id}_G) = \mathrm{Id}_{\mathcal{H}}$

c) $\forall_{g \in G} \quad D^+(g) = D^{-1}(g)$ (Unitarität)

eine unitäre Darstellung der Gruppe G
auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}$.

Dynamische Konsequenzen von Symmetrien in der QM

Betrachte als Beispiel wieder Drehungen.

$\hat{H}$ rotations-invariant $:\Leftrightarrow \forall_{R\in SO(3)} [D(R), \hat{H}] = 0$

$\Leftrightarrow [L_k, \hat{H}] = 0 \quad , k = 1,2,3$

Konsequenzen für die Zeitabhängigkeit:

Wenn $f(t)$ Lösung von $\hat{H} f = i\hbar \dot{f}$ und $\hat{H}$ rotationsinvariant, so ist für alle $R \in SO(3)$ $D(R) f$ ebenfalls eine Lösung, denn

$$\hat{H} D f = D \hat{H} f = D i\hbar \dot{f} = i\hbar (D\dot{f}).$$

Für das Spektrum von $\hat{H}$ ergeben sich die bekannten Konsequenzen, d.h. Entartung etc.

Ähnliches gilt für andere Symmetriegruppen.

Sei nun G eine beliebige Gruppe, V ein Vektorraum und $D : G \to \mathrm{Aut}\, V$ eine unitäre Darstellung.

Def:

D heißt reduzibel $:\Leftrightarrow$

$:\Leftrightarrow$ Es existiert eine Zerlegung $V = V_1 \oplus V_2$, so daß V_1 und V_2 invariante Unterräume bzgl D sind (d.h. z.B. $\forall_{v\in V_1} \forall_{g\in G} \; D(g)v \in V_1$)

D heißt irreduzibel $:\Leftrightarrow$ D ist nicht reduzibel

Wichtiges über Darstellungen von kompakten Lie-Gruppen:

* Jede Darstellung ist voll ausreduzierbar,

$$V = \bigoplus_\alpha V_\alpha \quad \text{mit} \quad D|_{V_\alpha} \text{ irreduzibel}$$

* Alle irreduziblen Darstellungen sind bekannt und endlich-dimensional

* Für die Drehgruppe $SO(3)$ sind alle irreduziblen Darstellungen durch eine ganze Zahl $l = 0, 1, \ldots$ charakterisiert.

$$D_l : SO(3) \longrightarrow \mathrm{Aut}\, \mathbb{C}^{2l+1}$$

($\rightarrow$ Spin etc)

Allgemein entspricht in der QM jeder Symmetrietransformation (Rotation, Translation, Zeittranslation etc.) – wie der Drehimpuls bzw. $\exp(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{L})$, s.o. – ein unitärer Operator. [Genauer: fast jeder, denn die Zeitumkehr T ist antiunitär.]

Wichtige Bemerkung zu Zuständen in der QM

Wellenfunktionen ψ liegen im Hilbertraum $\mathcal{H}$. Observablen sind selbstadjungierte Operatoren auf $\mathcal{H}$. Meßbare Größen sind nur Erwartungswerte von Observablen A,

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi, \psi \rangle}$$

Offenbar ändert sich $\langle A \rangle$ nicht bei Multiplikation von ψ mit einer beliebigen komplexen Zahl $c \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. Physikalisch ist also $c\psi$ äquivalent zu ψ.

Die physikalisch relevanten Zustände in der QM sind daher nicht Wellenfunktionen, sondern Äquivalenzklassen von Wellenfunktionen $\{c\psi \mid c \in \mathbb{C} \setminus \{0\}\}$, sogenannte Strahlen im Hilbertraum. (Denn diese sind über $\mathbb{C}$ eindimensionale Objekte)

Nach Festlegung einiger grundlegender Axiome, z.B.:

- separabler und vollständiger Hilbertraum
- selbstadjungierte Operatoren als Observablen
- Strahlen als Zustände im Hilbertraum
- Meßprozeß mittels Projektionsoperatoren
- Heisenbergsche Vertauschungsrelationen für x_i, p_j
- Dynamik mittels Hamiltonoperator $H\psi = i\hbar\dot{\psi}$
- Symmetrieeigenschaften von Vielteilchen-wellenfunktionen

gilt:

Eine quantenmechanische Theorie ist fixiert durch die Angabe einer unitären Strahldarstellung der fundamentalen Symmetriegruppe.

Beachte: manche Symmetrien erfordern notwendig Strahlen im Hilbertraum als Zustände

Die fundamentale Symmetriegruppe der nicht-relativistischen QM ist die Galilei-Gruppe, die der relativistischen QM die Poincaré-Gruppe.

Darstellung der Galilei-Gruppe

Galilei-Transf	Aktion auf qm Zuständen
Zeittranslation $t \to t+\tau$	$\psi(t-\tau, \vec{x})$
Translation $\vec{x} \to \vec{x}+\vec{a}$	$\psi(t, \vec{x}-\vec{a})$
Rotation, $R \in SO(3)$ $\vec{x} \to R\vec{x}$	$D_s(\alpha)\, \psi(t, R^{-1}\vec{x})$
Boost $\vec{x} \to \vec{x}+\vec{v}t$	$e^{i(m\vec{v}\cdot\vec{x} - \frac{m}{2}\vec{v}^2 t)/\hbar}\, \psi(t, \vec{x}-\vec{v}t)$

diskrete Transformationen:

Parität $\vec{x} \to -\vec{x}$	$\psi(t, -\vec{x})$
Zeitumkehr $t \to -t$	$A\psi^*(-t, \vec{x})$

Galilei-Gruppe besteht aus allen Kombinationen.

<u>Bemerkungen</u> zu obiger Darstellung.

* Beim <u>Boost</u> ist der Phasenfaktor wichtig, da sonst die geboostete Wellenfunktion keine Lösung der Schrödingergleichung ist.

Bei Vielteilchensystemen muß im Phasenfaktor ersetzt werden:

$$m \longrightarrow M = \sum_i m_i$$

$$\vec{x} \longrightarrow \vec{x}_s = \frac{1}{M} \sum_i m_i \vec{x}_i$$

* Bei den <u>Rotationen</u> hängt $D_s(\alpha)$ vom <u>Spin</u> ab.

$$D_{s=0}(\alpha) = 1 \qquad \text{für Spin } 0$$

$$D_{s=\frac{1}{2}}(\alpha) = \alpha \qquad \text{für Spin } \tfrac{1}{2}$$

wobei α in $SU(2)$ liegt. Der Zusammenhang mit $SO(3)$ ist gegeben durch

$$h : SU(2) \longrightarrow SO(3)$$
$$\alpha \longmapsto h(\alpha) = R$$

mit

$$\alpha^+ \sigma_k \alpha = R_{kl} \sigma_l .$$

Mit Spin s:

$$\psi \in \mathcal{H}_s = \mathbb{C}^{2s+1} \otimes \mathcal{H}_0$$

und

$$D = D_s \otimes D_0$$

* Bei der <u>Zeitumkehr</u> ist

$$A = 1 \quad \text{für Spin } 0$$
$$A = -i\sigma_2 \quad \text{für Spin } \tfrac{1}{2}$$

Beachte, daß die Zeitumkehr eine <u>antiunitäre</u> Operation ist, d.h. insbesondere <u>antilinear</u>

$$T(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha^* T\psi_1 + \beta^* T\psi_2$$

Die <u>Erzeugenden</u> der kontinuierlichen Galilei-Transformationen sind

Zeittranslation	$e^{iH\tau/\hbar}$	, H Hamiltonop.
Translation	$e^{i\vec{p}\cdot\vec{a}/\hbar}$	
Rotation	$e^{-i\vec{J}\cdot\vec{\omega}/\hbar}$	, $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$
Boost	$e^{i(\vec{p}\cdot t - m\vec{x})/\hbar}$	

Die nicht-relativistische QM ist eine unitäre (bis auf Zeitumkehr) Strahldarstellung der Galilei-Gruppe