

Kapitel I

Symmetrietransformationen

A Grundlegende Symmetrien

A.1 Definition

Betrachten wir ein physikalisches System, das sich zu dem Zeitpunkt t_0 im Zustand $Q(t_0)$ befindet. Für ein klassisches System aus N Teilchen in drei Dimensionen fasst $Q(t_0)$ die $6N$ Komponenten von Position und Geschwindigkeit der Teilchen zusammen. Das System entwickelt sich in der Zeit und befindet sich zum Zeitpunkt t im Zustand $Q(t)$.

Wir führen nun eine Transformation $\mathcal{T}$ ein, die jeden Zustand Q auf einen Zustand Q' abbildet (s. Abb. 1). Natürlich sind eine Reihe von Transformationen möglich: die Abstände zwischen Teilchen um einen Faktor zwei vergrößern, Positionen und Geschwindigkeiten um einen Winkel drehen (der zeitabhängig sein kann), Umkehr der elektrischen Ladungen usw. Wenn wir die Transformation auf den Zustand $Q(t)$ anwenden, erhalten wir für jeden Zeitpunkt t einen neuen Zustand $Q'(t)$.

$\mathcal{T}$ heißt Symmetrietransformation, wenn die transformierten Zustände $Q'(t)$ auch eine Lösung der Bewegungsgleichungen des Systems sind, und zwar für beliebige Anfangszustände $Q'(t_0) = \mathcal{T}(Q(t_0))$. Hierbei nehmen wir an, dass sich $Q(t)$ und $Q'(t)$ gemäß denselben Naturgesetzen entwickeln. Anders ausgedrückt:

Eine **Symmetrietransformation** bildet jede physikalisch mögliche Zeitentwicklung auf eine ebenfalls mögliche Zeitentwicklung ab.

In Abb. 1 wird dies durch ein Diagramm dargestellt, das man kommutativ nennt: Ob man, von einem beliebigen Zustand $Q(t_0)$ ausgehend, zuerst die Zeitentwicklung berechnet und dann die Transformation $\mathcal{T}$ anwendet, oder zunächst $\mathcal{T}$ anwendet und dann in der Zeit entwickelt, man erreicht denselben Zustand $Q'(t)$.

In der Definition einer Symmetrietransformation haben wir nicht nur einen bestimmten Zustand $Q(t)$ des Systems betrachtet, sondern die gesamte Abfolge von Zuständen, die das System in der Zeit durchläuft. Die Definition ist somit allgemeiner als die Forderung, der

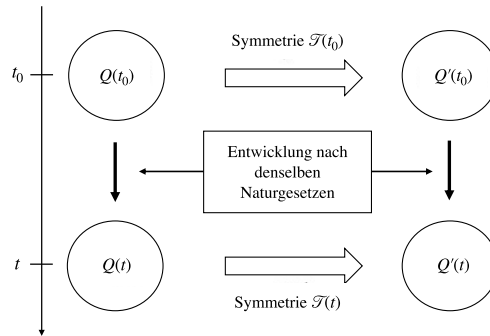


Abb. 1 Eine Symmetrietransformation ist eine Abbildung $\mathcal{T}: Q \mapsto Q'$ zwischen Zuständen Q, Q' eines physikalischen Systems. Ein Anfangszustand $Q(t_0)$ entwickelt sich in der Zeit in den Zustand $Q(t)$. Wenn beide Abfolgen von Zuständen $Q(t_0), \dots, Q(t)$ und $Q'(t_0), \dots, Q'(t)$ Lösungen derselben Bewegungsgleichungen sind, dann sagt man, dass $\mathcal{T}$ eine Symmetrietransformation ist.

Zustand des Systems selbst sei symmetrisch (wenn z. B. eine geometrische Figur unter einer Spiegelung oder Drehung in sich übergeht).

Nicht instantane Transformationen

Es gibt Transformationen, die selbst nicht instantan sind, etwa eine Verschiebung oder eine Umskalierung der Zeitachse. In Abb. 1 sind dann links und rechts verschiedene Zeitkoordinaten, etwa t und t' , zu verwenden. Die in Abschnitt A.2 erwähnte Lorentz-Transformation kann für ein ausgedehntes System im Allgemeinen nicht aus Operationen zusammengesetzt werden, die zu einem festen Zeitpunkt t wirken: Es muss stets der gesamte zeitliche Ablauf der Bewegung einbezogen werden. Man kann auch räumlich inhomogene Transformationen betrachten, die die Teile eines ausgedehnten Systems verschiedenen Zeittransformationen unterwerfen.

A.2 Beispiele

Gehen wir die bereits erwähnten Transformationen durch. Die Streckung der räumlichen Koordinaten um einen Faktor zwei wird im Allgemeinen keine Symmetrietransformation sein, weil Kräfte zwischen Teilchen von ihren Abständen abhängen. Die Transformation in ein rotierendes Bezugssystem (mit einem Drehwinkel proportional zur Zeit) ist auch keine, weil dies kein Inertialsystem ist und sogenannte Scheinkräfte auftreten. Dagegen liefern für ein *isoliertes* System eine Verschiebung und eine Drehung (um einen festen Winkel) Symmetrioperationen, was mit der Homogenität und der Isotropie des Raums zusammenhängt. Wir werden sie in diesem Buch ausführlich behandeln.

Die fundamentalen Symmetrien der Physik sind die folgenden

- Verschiebungen im Raum
- Drehungen
- Verschiebungen in der Zeit
- Lorentz- oder Galilei-Transformationen (Schub) zwischen Inertialsystemen
- Parität P (Raumspiegelung), Ladungskonjugation C und Zeitumkehr T
- Austausch identischer Teilchen

Alle diese Transformationen sind nach heutigem Stand Symmetrien für isolierte Systeme. Natürlich haben Galilei-Transformationen einen eingeschränkten Status. Die fundamentale Symmetrie unter Lorentz-Transformationen wird von ihnen nur näherungsweise abgebildet, nämlich im „nicht-relativistischen“ Grenzfall, in dem alle relevanten Geschwindigkeiten klein gegenüber der Lichtgeschwindigkeit c sind. Für Abstände Δx und Zeitintervalle Δt muss ebenfalls gelten $\Delta x \ll c \Delta t$. Ähnlich steht es mit den Symmetrien P, C und T: Diese drei sind exakt, wenn die Teilchen durch elektromagnetische Kräfte oder die starke Wechselwirkung gekoppelt sind. In der schwachen Wechselwirkung (z. B. im β -Zerfall) sind die Symmetrien P und CP allerdings verletzt, s. die Ergänzungen A_V und C_{V1}, §5.

Es ist anzumerken, dass es kaum vorstellbar ist, die Symmetrie unter räumlichen Verschiebungen eines isolierten Systems fallen zu lassen: Sie fällt praktisch mit der Definition eines „isolierten (kräftefreien) Systems“ zusammen. Für Verschiebungen in der Zeit gilt analog: Wären sie nicht zumindest näherungsweise eine Symmetrie für isolierte Systeme, stellte dies die naturwissenschaftliche Methode selbst in Frage: Ein Experiment lieferte nicht dasselbe Ergebnis, führte man es heute oder morgen durch. Es gibt seit Dirac theoretische Modelle in der Kosmologie, in denen physikalische Konstanten im Lauf der Expansion der Universums ihren Wert ändern. Damit wird die Struktur der Symmetrietransformationen verändert.

Nach heutigem Stand der Naturwissenschaft fordert man, dass die genannten Symmetrien mit allen physikalischen Gesetzen verträglich sein müssen, ob diese bereits bekannt oder noch zu entdecken sind. Man kann somit sagen, dass wir hier grundlegende „Super-Gesetze“ vor uns haben (der Begriff geht auf Wigner zurück). Dies ist eine der Motivationen für die Überlegungen in diesem Buch.

Bemerkungen

- Sind zwei Transformationen $\mathcal{T}$ und $\mathcal{T}'$ jeweils Symmetrien, ist auch ihre Hintereinanderausführung $\mathcal{T}'\mathcal{T}$ eine Symmetrie. Wir werden sehen, dass dies der Menge der Transformationen die mathematische Struktur einer Gruppe gibt: Man spricht von einer „Symmetriegruppe“ (s. Kapitel II und III).
- Unter der Symmetrie der Zeitumkehr durchläuft ein System die Zustände $Q'(t)$ in umgekehrter Reihenfolge, was man in Abb. 1 durch umgekehrte Pfeile darstellen kann. Siehe dazu der Anhang A und die Abb. 3 dort.

■ Wir hatten die Menge der Verschiebungen und Drehungen als Symmetrietransformationen für ein isoliertes System eingeführt. Ist ein physikalisches System äußeren Kräften unterworfen (nicht isoliert), können gewisse Transformationen immer noch Symmetrien sein (sie bilden eine kleinere Gruppe). Dies ist etwa der Fall für einen Körper in einem Zentralfeld und Drehungen um Achsen durch das Kräftezentrum.

A.3 Aktive und passive Perspektive

Eine Transformation $\mathcal{T}$ kann auf zwei Weisen definiert werden. In der ersten nimmt man den Standpunkt einer einzigen Beobachterin ein, mit einem gegebenen Koordinatensystem K . Sie wendet $\mathcal{T}$ an und bildet jeden Bewegungsablauf des Systems auf einen anderen ab: durch eine Verschiebung, eine Drehung, eine zeitliche Verschiebung usw. Wie in §A.1 definiert, liegt eine Symmetrietransformation vor, wenn die beiden Bewegungsabläufe durch dieselben Bewegungsgleichungen beschrieben werden können: Sie unterscheiden sich lediglich in ihren Anfangsbedingungen. Dies nennen wir die „aktive Perspektive“, weil man sich vorstellen kann, dass die Beobachterin selbst die Transformation ausführt, ein Teilchen verschiebt, dreht usw.

In der anderen, der „passiven Perspektive“ beschreiben zwei Beobachter dieselbe Bewegung, jeder von seinem Bezugssystem aus. Jeder gibt dem physikalischen System eine Position, Orientierung, Geschwindigkeit usw., die nicht dieselben sind, so dass sie zahlenmäßig verschiedene Modellierungen erhalten. In diesem Zusammenhang liegt eine Symmetrie vor, wenn die Modelle in den beiden Bezugssystemen als Lösungen derselben Bewegungsgleichungen entstehen.

Knapp ausgedrückt: In der aktiven Perspektive ändert sich das System, während in der passiven Perspektive das Bezugssystem ein anderes ist. Von Fall zu Fall ist der eine oder andere Standpunkt natürlicher. Bei einer Verschiebung in der Zeit kann man sich ganz einfach zwei Bahnkurven vorstellen, die zeitlich verschoben sind (s. Abb. 2). In der Relativitätstheorie, wenn bewegte Beobachter Koordinaten in ihren eigenen Inertialsystemen verwenden, ist der passive Standpunkt häufig bequemer.

Bemerkungen

- Die beiden Perspektiven sind insofern gleichwertig, dass eine Verschiebung oder Drehung per Definition mit einer Änderung der räumlichen Koordinaten eines physikalischen Systems zusammen hängt und diese Koordinaten seine Position relativ zu einem Koordinatensystem angeben. Die mathematischen Abbildungen, die die Transformation $\mathcal{T}$ beschreiben, sind in der Tat dieselben. Hat man einen einzigen Bewegungsablauf von zwei Bezugssystemen aus beobachtet, so kann man genauso gut eine verschobene (transformierte) Bewegung einführen, so dass diese für eine erste Beobachterin in derselben Weise erscheint wie die ursprüngliche Bewegung für einen zweiten Beobachter von seinem Bezugssystem aus.
- Die Unterscheidung zwischen dem aktiven und passiven Standpunkt ist vor allem dann physikalisch relevant, wenn es ein ausgezeichnetes Bezugssystem gibt. Dies klingt in dem

häufig verwendeten Ausdruck „Laborsystem“ an, das unabhängig von dem physikalischen System und z. B. den verwendeten Messgeräten ist. Ist ein Koordinatensystem K fest mit einem Messgerät verbunden, so bedeuten aktive und passive Perspektive jeweils: man „bewegt das System“ oder man „bewegt das Messgerät“.

Ein weiteres Beispiel, in dem sich aktiver und passiver Standpunkt unterscheiden, liefern ein Inertialsystem K und eine Transformation $\mathcal{T}$, die derart zeitabhängig ist, dass das neue Koordinatensystem K' kein Inertialsystem ist. Dies liegt etwa beim Übergang in ein sich drehendes Bezugssystem vor. In so einem Fall ist gerade in der Quantenmechanik die passive Perspektive besser geeignet, und deswegen werden wir sie öfter verwenden.

Ein einfaches Beispiel illustriert die unter der aktiven Perspektive entstehenden Schwierigkeiten: Es ist bekannt, dass die Zirkulation (das Ringintegral über die Geschwindigkeit) eines Elektrons in einem Zentralpotential quantisiert ist (Drehimpulsquantenzahl m). Es ist also in der Quantenmechanik nicht möglich, seine Winkelgeschwindigkeit um einen beliebigen (etwa sehr kleinen) Wert zu vergrößern.

B Symmetrien in der klassischen Mechanik

Wir wollen zeigen, dass die physikalischen Gesetze aufgrund von Symmetrien eine gewisse Form haben müssen. Außerdem erzeugen Symmetrien Erhaltungsgrößen (Konstanten der Bewegung). Wir beginnen mit dem einfachsten Fall, der Newtonschen Mechanik und „ $F = ma$ “.

B.1 Newtonsche Mechanik

Seien m_1, m_2 zwei Massepunkte an den Orten $\mathbf{r}_1$ und $\mathbf{r}_2$, die über ein Potential $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$ miteinander wechselwirken. Die Bewegungsgleichungen lauten:

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{\mathbf{r}}_1 &= \mathbf{f}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) = -\nabla_1 U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) \\ m_2 \ddot{\mathbf{r}}_2 &= \mathbf{f}_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) = -\nabla_2 U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) \end{aligned} \quad (\text{I.1})$$

Hier bezeichnet $\ddot{\mathbf{r}}_n$ die zweite Ableitung von $\mathbf{r}_n$ nach der Zeit, und ∇_n ist der (vektorielle) Gradient bezüglich der Koordinate $\mathbf{r}_n$ des Potentials ($n = 1, 2$).

■ Invarianz unter Verschiebungen

Betrachten wir die Verschiebung um einen Vektor $\mathbf{b}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{T}: \mathbf{r}_1 &\mapsto \mathbf{r}_1 + \mathbf{b} \\ \mathcal{T}: \mathbf{r}_2 &\mapsto \mathbf{r}_2 + \mathbf{b}\end{aligned}\tag{I.2}$$

und sei dies eine Symmetrietransformation: Das Bild einer möglichen Bewegung ist selbst eine mögliche Bewegung (in demselben Potential U). Weil die Beschleunigungen sich unter Gl. (I.2) nicht ändern ($\mathbf{b}$ hängt nicht von der Zeit ab), muss für die Kräfte gelten:

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_1(\mathbf{r}_1 + \mathbf{b}, \mathbf{r}_2 + \mathbf{b}; t) &= \mathbf{f}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) \\ \mathbf{f}_2(\mathbf{r}_1 + \mathbf{b}, \mathbf{r}_2 + \mathbf{b}; t) &= \mathbf{f}_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)\end{aligned}\tag{I.3}$$

Unter einer gleichzeitigen Verschiebung ihrer beiden Argumente $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ kann sich die Potentialfunktion U , die Gl. (I.3) durch ihre Gradienten erzeugt, höchstens additiv um eine Konstante ändern. Diese Konstante kann von der Zeit abhängen, bleibt aber ohne physikalische Auswirkungen. Fordert man außerdem, dass U im Unendlichen verschwindet, muss die Konstante gleich Null sein: Das Potential ist somit invariant unter der Verschiebung der beiden Variablen,

$$U(\mathbf{r}_1 + \mathbf{b}, \mathbf{r}_2 + \mathbf{b}; t) = U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)\tag{I.4}$$

Daraus folgt, dass U nur von der Differenz $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ abhängen kann. Wir haben somit eine Einschränkung an die möglichen physikalischen Potentiale gefunden

$$U = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; t)\tag{I.5}$$

Damit ergibt sich sofort $\mathbf{f}_1 = -\mathbf{f}_2$, also das Newtonsche Gesetz „*actio = reactio*“, und der Erhaltungssatz

$$\frac{d}{dt}(m_1 \dot{\mathbf{r}}_1 + m_2 \dot{\mathbf{r}}_2) = 0\tag{I.6}$$

für den Gesamtimpuls. Er ist also eine Erhaltungsgröße, wenn räumliche Verschiebungen eine Symmetrietransformation sind.

■ Invarianz unter Drehungen

Liegt eine Symmetrie unter Drehungen vor, ergeben sich weitere Eigenschaften. Wir wenden analoge Überlegungen auf ein Potential U an, das nur von dem Betrag $r = |\mathbf{r}| = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ des Differenzvektors abhängt

$$U = U(r; t)\tag{I.7}$$

In diesem Fall sind die Kräfte $\mathbf{f}_1$ und $\mathbf{f}_2$ (anti)parallel zu $\mathbf{r}$, und ihre Beträge hängen nur vom Abstand r ab. Daraus folgt die Erhaltung des Gesamtdrehimpulses

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(m_1 \mathbf{r}_1 \times \dot{\mathbf{r}}_1 + m_2 \mathbf{r}_2 \times \dot{\mathbf{r}}_2) &= \mathbf{r}_1 \times \mathbf{f}_1 + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{f}_2 \\ &= (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \mathbf{f}_1 = \mathbf{r} \times \mathbf{f}_1 = \mathbf{0}\end{aligned}\tag{I.8}$$

Sie ergibt sich somit aus der Invarianz der möglichen Bewegungen unter Drehungen.

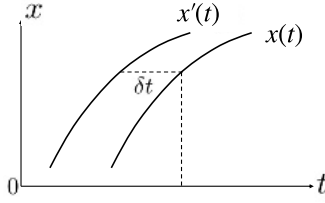


Abb. 2 Die Bahnkurven eines physikalischen Systems, mit einer Koordinate x als Funktion der Zeit. Die zwei Kurven stellen die Funktionen $x(t)$ und $x'(t) = x(t + \delta t)$ dar. Für $\delta t > 0$ läuft die Kurve $x'(t)$ gegenüber $x(t)$ zeitlich voraus (dieselben Funktionswerte werden bei kleineren = früheren Zeitkoordinaten erreicht).

■ Verschiebungen in der Zeit

Die Abbildung der Bahnkurven ist hier durch

$$\mathcal{T}: \mathbf{r}_1(t) \mapsto \mathbf{r}_1(t + \tau)$$

$$\mathcal{T}: \mathbf{r}_2(t) \mapsto \mathbf{r}_2(t + \tau) \quad (\text{I.9})$$

gegeben, mit einer Konstante τ . Wie in Abbildung 2 skizziert, läuft die verschobene Bewegung um τ in der Zeit voraus. Die Bedingung für eine Symmetrie ist nun, dass

$$\mathbf{f}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t + \tau) = \mathbf{f}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$$

$$\mathbf{f}_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t + \tau) = \mathbf{f}_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) \quad (\text{I.10})$$

für alle τ gilt: Die Kräfte hängen von den Koordinaten, aber nicht (explizit) von der Zeit ab. Für die potentielle Energie bedeutet dies

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t + \tau) = U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) + G(t, \tau) \quad (\text{I.11})$$

Hier ist die Funktion G wieder ohne physikalische Bedeutung, weil sie die Beschleunigungen nicht verändert. Wir eliminieren sie wie nach Gl. (I.3), und weil τ in Gl. (I.11) beliebig ist, können wir die potentielle Energie so wählen, dass sie zeitunabhängig ist:

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; 0) \quad (\text{I.12})$$

Die möglichen Bewegungen werden also durch ein zeitunabhängiges Potential W beschrieben.

Berechnen wir nun die Änderung der gesamten kinetischen Energie:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (m_1 \dot{\mathbf{r}}_1^2 + m_2 \dot{\mathbf{r}}_2^2) &= \dot{\mathbf{r}}_1 \cdot \mathbf{f}_1 + \dot{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{f}_2 \\ &= -(\dot{\mathbf{r}}_1 \cdot \nabla_1 W + \dot{\mathbf{r}}_2 \cdot \nabla_2 W) = -\frac{dW}{dt} \end{aligned} \quad (\text{I.13})$$

wobei die totale Zeitableitung dW/dt von W (mit „gerade“ gesetzten Differentialen d) durch den vorstehenden Ausdruck definiert ist. Es folgt die Erhaltung der Gesamtenergie

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m_1}{2} \dot{r}_1^2 + \frac{m_2}{2} \dot{r}_2^2 + W \right) = 0 \quad (\text{I.14})$$

die sich bekanntermaßen aus der kinetischen und der potentiellen Energie zusammensetzt.

Bemerkung Verschiebungen in Raum und Zeit gehören zu demselben Typ von Transformationen, unterscheiden sich aber auch. In den vorstehenden Rechnungen spielt die Zeit t nicht die Rolle einer „dynamischen Variablen“, wie es für die Position $\mathbf{r}(t)$ der Fall ist. Sie ist ein Parameter, um die Bewegung des Systems abzubilden. Bei einem Wechsel des Bezugssystems, vor allem in der Relativitätstheorie, kann die Zeit aber auch als gleichberechtigte Koordinate neben dem Ort aufgefasst werden und mit $(\mathbf{r}, t)$ ein Ereignis oder einen „Welt-punkt“ bezeichnen. In diesem Zusammenhang sind gewisse Vorzeichen ein wenig subtil zu verstehen.

Betrachten wir als einfaches Beispiel eine Bewegung in einer Raumdimension, wie in Abb. 3 skizziert. Dasselbe Ereignis auf der Bahnkurve wird von zwei Beobachtern durch Koordinaten (x, t) bzw. (x', t') beschrieben, wobei ihre Koordinatensysteme relativ zueinander um b (im Raum) und τ (in der Zeit) verschoben sind. Die Umrechnung der Koordinaten sei für positives b und τ

$$\begin{aligned} x' &= x + b \\ t' &= t - \tau \end{aligned} \quad (\text{I.15a})$$

Das unterschiedliche Vorzeichen fällt auf, ist aber nicht verwunderlich. Der Term $+b$ beschreibt eine Verschiebung entlang der positiven x -Achse, und die Subtraktion $-\tau$ bedeutet, dass das Ereignis früher stattfindet. Kommt ein Zug zehn Minuten vor eins statt um ein Uhr an, ist es klar ... dass er zehn Minuten *früher* ankommt.

Das unterschiedliche Vorzeichen der Zeit im Vergleich zu Gl. (I.9) entsteht dadurch, dass man von der Zeit als Koordinate zu der Zeit als Parameter einer Bahnkurve wechselt. Aus der Transformation (I.15a) kann man im Übrigen das Verhalten der Bahnkurve wiederfinden: Dazu beschreiben wir die Bewegung in den gestrichenen Koordinaten als Funktion $x'(t')$ und drücken sie durch die Funktion $x(t)$ aus. Weil beide Sätze von Koordinaten dasselbe Ereignis beschreiben, haben wir

$$x'(t') = x(t) + b = x(t' + \tau) + b \quad (\text{I.15b})$$

und wir finden Gl. (I.9) wieder. In der Verschiebung einer Funktion der Zeit ist in ihrem Argument die zu Gl. (I.15a) inverse Transformation anzuwenden.

Dasselbe gilt übrigens auch, wenn man eine räumliche Verschiebung für eine Funktion $f(x)$, etwa eine Dichteverteilung, definiert. Diese Transformation ist für eine Verschiebung $x' = x + b$ durch

$$f'(x') = f(x) = f(x' - b) \quad (\text{I.15c})$$

gegeben. In der Tat bewegt dies z.B. das Maximum der Verteilung in die positive x -Richtung. Für eine beliebige Bewegung $\mathcal{T} : \mathbf{r}, t \mapsto \mathbf{r}', t'$ der Koordinaten gilt analog $f \mapsto f' = f \circ \mathcal{T}^{-1}$, wobei der Kreis die Hintereinanderausführung angibt, $(f \circ \mathcal{T}^{-1})(\mathbf{r}', t') = f(\mathcal{T}^{-1}(\mathbf{r}', t'))$. Diese Vereinbarung ist mit der Hintereinanderausführung von Transformationen verträglich, denn es gilt $(\mathcal{T}_2 \circ \mathcal{T}_1)^{-1} = \mathcal{T}_1^{-1} \circ \mathcal{T}_2^{-1}$.

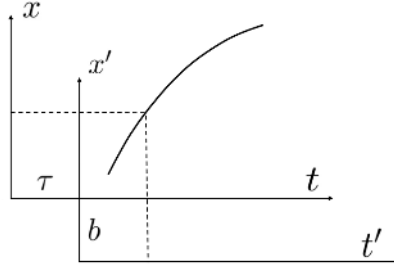


Abb. 3 Bewegung eines Systems in einer Dimension, dargestellt in zwei Sätzen von Koordinaten, x, t und x', t' . Die beiden Koordinatensysteme sind räumlich um b und zeitlich um τ gegeneinander verschoben. In den gestrichenen Koordinaten ist die Bewegung, relativ zu den ungestrichenen, in Richtung der positiven x -Achse und „vorwärts in die Zeit“ verschoben (vgl. Abb. 2).

Weil die Newtonschen Gleichungen für die Quantisierung eines Systems nicht bequem sind, verlassen wir sie hier und gehen zu den Formulierungen der klassischen Mechanik nach Lagrange und Hamilton über. Unsere Darstellung wird sich auf das Wesentliche beschränken, eine ausführliche Diskussion finden die Leser in jedem Lehrbuch der klassischen Mechanik, etwa Goldstein et al. (2006) oder Arnol'd (1988), sowie in Anhang III von Cohen-Tannoudji et al. (2020).

B.2 Lagrange-Mechanik

B.2.1 Allgemeine Formulierung

Das System wird hier mit einem Satz von verallgemeinerten Koordinaten $\{q_i, i = 1, \dots, N\}$ beschrieben. Seine Dynamik wird durch eine Funktion L bestimmt, genannt Lagrange-Funktion, die weitere Parameter (Massen, Ladungen, ...) enthält. Sie hängt von den Koordinaten und ihren Zeitableitungen $\{\dot{q}_i\}$ ab:

$$L \equiv L(q_i, \dot{q}_i; t) \quad (\text{I.16})$$

Die Bewegungsgleichungen sind die Euler-Lagrange-Gleichungen (zweiter Art)

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (\text{I.17})$$

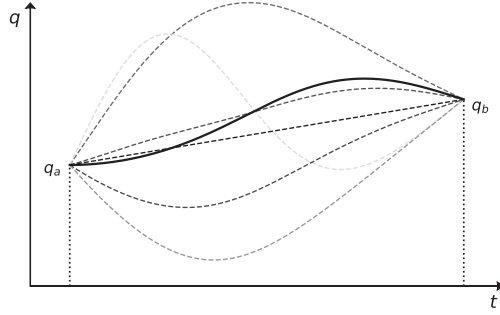


Abb. 4 Gemäß dem Prinzip der kleinsten Wirkung bewegt sich ein System vom Zustand Q_a zum Zustand Q_b entlang der Bahnkurve, die die Wirkung S aus Gl. (I.19) minimiert (extremal macht). Diese Kurve ist fett gezeichnet (sie ist für ein zeitabhängiges Potential berechnet), andere „virtuelle Pfade“ sind gestrichelt und um so heller eingetragen, je größer ihre Wirkung ist. Nur eine Koordinate q ist dargestellt.

Die totale Zeitableitung d/dt wird für eine Funktion $F(q_i, \dot{q}_i; t)$ durch

$$\frac{d}{dt}F(q_i, \dot{q}_i; t) = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial F}{\partial q_i} + \sum_i \ddot{q}_i \frac{\partial F}{\partial \dot{q}_i} + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (\text{I.18})$$

definiert. Wie die Newtonschen Bewegungsgleichungen (I.1) liefert auch der Lagrange-Formalismus mit Gl. (I.17) Differentialgleichungen zweiter Ordnung in der Zeitkoordinate.

Der Lagrange-Formalismus ist äquivalent zu einem Variationsprinzip, dem „Prinzip der kleinsten Wirkung“. Sein Ausgangspunkt ist ein globaler, nicht lokal in der Zeit: Unter allen Bewegungen, die das System von einem Zustand Q_a (damit ist der Satz der Koordinaten $\{q_i\}$ bei t_a gemeint) in den Zustand Q_b zum Zeitpunkt t_b führen, ist diejenige physikalisch realisiert, deren Wirkung S extremal ist mit

$$S = \int_{t_a}^{t_b} dt L(q_i(t), \dot{q}_i(t); t) \quad (\text{I.19})$$

In Abb. 4 sind mehrere Wege aufgetragen. Die durchgezogene Kurve gibt den Weg mit der kleinsten Wirkung: er beschreibt die physikalische Bewegung des Systems von Q_a nach Q_b . Die anderen Kurven sind „virtuell“ und nur insofern von Bedeutung, als sie eine „Variation“ der physikalischen Bahnkurve liefern. Etwas genauer verschwindet die Variation des Wirkungsintegrals in der ersten Ordnung um die physikalische Bahnkurve: an dieser Kurve ist die Wirkung „stationär“.

Die Lagrange-Mechanik hat Vorteile, weil die verallgemeinerten Koordinaten sehr flexibel gewählt werden können, z. B. Kugelkoordinaten statt cartesischer. Mit einer geeigneten Lagrange-Funktion kann man eine große Zahl von physikalischen Systemen beschreiben, während die Bewegungsgleichungen stets die Struktur der Euler-Lagrange-Gleichungen (I.17) haben. Für ein System aus mehreren Teilchen mit Koordinaten r_n in drei

Raumdimensionen, die über ein Potential $V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, \dots, t)$ in Wechselwirkung stehen, kann man die Lagrange-Funktion

$$L = \sum_n \frac{m_n}{2} \dot{\mathbf{r}}_n^2 - V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, \dots, t) = T - V \quad (\text{I.20})$$

verwenden. Der erste Term ist die kinetische Energie, proportional zu den Massen m_n der Teilchen und dem Quadrat ihrer Geschwindigkeiten $\dot{\mathbf{r}}_n$.

Der Lagrange-Formalismus kann auch gewisse Wechselwirkungen beschreiben, die von den Geschwindigkeiten abhängen. Dies betrifft z. B. elektrisch geladene Teilchen, die einem elektromagnetischen Feld ausgesetzt sind. Das Feld kann man durch das skalare Potential U und das Vektorpotential $\mathbf{A}$ gemäß den bekannten Beziehungen der Elektrodynamik darstellen. Eine mögliche Lagrange-Funktion wäre (s. etwa Anhang III, § 4.b aus Cohen-Tannoudji et al. (2020)):

$$L = \sum_n \left\{ \frac{m_n}{2} \dot{\mathbf{r}}_n^2 + e_n \dot{\mathbf{r}}_n \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_n, t) - e_n U(\mathbf{r}_n, t) \right\} \quad (\text{I.21})$$

Hier ist e_n die Ladung des n -ten Teilchens, und die Felder U , $\mathbf{A}$ sind von außen vorgegeben. Um die Wechselwirkung zwischen den Teilchen zu beschreiben, müssten sie selbst „dynamische Freiheitsgrade“ werden, deren zeitliche Entwicklung durch die Maxwell'schen Gleichungen bestimmt werden. Es gibt eine Reihe weiterer Systeme, deren Bewegungsgleichungen über das Prinzip der kleinsten Wirkung aus einer Lagrange-Funktion abzuleiten sind, etwa das erwähnte elektromagnetische Feld. Den Fall der Schrödinger-Gleichung finden die Leser in Ergänzung C_{VI}.

Bemerkungen

■ Einem gegebenen Satz von Bewegungsgleichungen kann man keine eindeutige Lagrange-Funktion zuordnen. Es gibt in der Tat viele „äquivalente“ Lagrange-Funktionen. Ist $K = K(q_i; t)$ zum Beispiel eine Funktion der Koordinaten, so kann man aus einer Lagrange-Funktion L eine weitere konstruieren:

$$L'(q_i, \dot{q}_i; t) = L(q_i, \dot{q}_i; t) + \frac{d}{dt} K(q_i; t) \quad (\text{I.22})$$

Weil K nicht von den Geschwindigkeiten abhängt, enthält ihre totale Zeitableitung gemäß Gl. (I.18) keine zweiten Ableitungen, so dass Gl. (I.22) eine Lagrange-Funktion definiert. Die Änderung von L ist

$$\Delta L = L' - L = \sum_j \dot{q}_j \frac{\partial K}{\partial q_j} + \frac{\partial K}{\partial t} \quad (\text{I.23})$$

Die beiden Terme in der Euler-Lagrange-Gleichung (I.17) ändern sich jeweils um

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \Delta L \right) &= \frac{d}{dt} \frac{\partial K}{\partial q_i} = \sum_j \dot{q}_j \frac{\partial^2 K}{\partial q_i \partial q_j} + \frac{\partial^2 K}{\partial q_i \partial t} \\ \frac{\partial}{\partial q_i} \Delta L &= \sum_j \dot{q}_j \frac{\partial^2 K}{\partial q_i \partial q_j} + \frac{\partial^2 K}{\partial q_i \partial t} \end{aligned} \quad (\text{I.24})$$

was sich gegenseitig weghebt. Die Bewegungsgleichungen sind exakt dieselben, deswegen sprechen wir von L und L' als äquivalenten Lagrange-Funktionen. Dies wird für unsere Symmetrieüberlegungen eine wichtige Rolle spielen.

Als einen alternativen Beweis für die Äquivalenz von L und L' berechnen wir den Unterschied im Wirkungsintegral:

$$\Delta S = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{dK}{dt} = K(q_i(t_b); t_b) - K(q_i(t_a); t_a) \quad (I.25)$$

Dieser Ausdruck hängt nicht von dem Weg von t_a nach t_b ab, sondern nur von den Endpunkten $q_i(t_b)$ und $q_i(t_a)$, die im Variationsprinzip festgehalten werden. Die Wirkungen S und $S + \Delta S$ werden somit für dieselben Wege stationär.

■ Es wird manchmal behauptet, dass zwei äquivalente Lagrange-Funktionen sich immer um eine totale Zeitableitung unterscheiden. Das ist allerdings falsch: Eine Gegenbeispiel sind Lagrange-Funktionen, die sich um einen globalen Skalenfaktor unterscheiden.

Aber die Menge von äquivalenten Lagrange-Funktionen ist noch größer. Für ein freies Teilchen können etwa die folgenden zwei verwendet werden:

$$L = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2$$

$$L' = \alpha \dot{x}^2 + \beta \dot{y}^2 + \gamma \dot{z}^2$$

mit beliebigen Konstanten α , β und γ . Es wäre eine interessante Aufgabe, eine allgemeine Vorschrift anzugeben, um alle Lagrange-Funktionen zu konstruieren, die zu einer gegebenen äquivalent sind. Daraus könnte man etwa notwendige und hinreichende Bedingungen dafür ablesen, dass eine Transformation $\mathcal{T}$ eine Symmetrie darstellt. Außerdem könnte man untersuchen, ob die Quantisierung dieser Lagrange-Funktionen auf dieselben quantenmechanischen Systeme führt. Es scheint, dass es im Moment keine abschließende Antwort auf diese Fragen gibt.

B.2.2 Erhaltungsgrößen und Satz von Noether

Einfache Fälle Wenn die Lagrange-Funktion L unter bestimmten Transformationen invariant ist, folgen daraus Erhaltungsgrößen (Konstanten der Bewegung). Ist L etwa invariant, wenn alle Positionen der Teilchen $\mathbf{r}_n$ um denselben Vektor $\mathbf{b}$ verschoben werden, $\mathbf{r}_n \mapsto \mathbf{r}_n + \mathbf{b}$, so folgt daraus die Erhaltung des Gesamtimpulses $\sum_n \mathbf{p}_n$. Dies kann man genau wie für die Newtonschen Gleichungen [s. Gl. (I.2) und folgende] überprüfen. In der Lagrange-Mechanik werden die Impulse durch

$$\mathbf{p}_n = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_n} = m_n \dot{\mathbf{r}}_n(t) \quad (I.26)$$

definiert, wobei der Vektor $\partial/\partial \dot{\mathbf{r}}_n$ aus den Ableitungen nach den Komponenten von $\dot{\mathbf{r}}_n$ besteht. Beachte dass der letzte Ausdruck für den Impuls nur für die kinetische Energie in Gl. (I.20) gilt. – Wir erinnern, dass in der Symmetrietransformation die Positionen aller Teilchen verschoben werden. Ist die Lagrange-Funktion selbst dann invariant, wenn nur eine Teilchenkoordinate verschoben wird, folgt daraus die Erhaltung des Impulses für dieses Teilchen.

Analog ergibt sich, wenn L nicht explizit von der Zeit abhängt ($\frac{\partial L}{\partial t} = 0$) die Erhaltung der Gesamtenergie, definiert in der Lagrange-Mechanik als

$$H = \sum_n \dot{\mathbf{r}}_n \cdot \mathbf{p}_n - L \quad (\text{I.27})$$

In der Tat folgt dies sofort aus Gl. (I.17) und (I.26):

$$\frac{d}{dt} H = \sum_n \left(\ddot{\mathbf{r}}_n \cdot \mathbf{p}_n + \dot{\mathbf{r}}_n \cdot \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_n} - \dot{\mathbf{r}}_n \cdot \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_n} - \ddot{\mathbf{r}}_n \cdot \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_n} \right) = 0 \quad (\text{I.28})$$

Es ist allerdings nicht immer der Fall, dass die Lagrange-Funktion L unter einer Symmetrietransformation $\mathcal{T}$ invariant ist. Für die Invarianz der Bewegungsgleichungen genügt es, dass $\mathcal{T}$ der Funktion L eine totale Zeitableitung hinzufügt [s. die Bemerkung um Gl. (I.22)]. Die Mathematikerin Emmy Noether veröffentlichte 1918 ein Theorem, das besagt: Auch in diesem Fall führt die Symmetrie $\mathcal{T}$ auf eine Erhaltungsgröße.

Formulierung des Satzes von Noether Wir betrachten eine Transformation der verallgemeinerten Koordinaten q_i eines beliebigen Systems

$$\mathcal{T}: q_i \mapsto q_i + \delta q_i \quad (\text{I.29})$$

Der Buchstabe δ deutet an, dass dies eine „infinitesimale“ (unendliche kleine) Transformation ist. Wir schreiben

$$\delta q_i = \delta \varepsilon f_i(q_j, \dot{q}_j; t) \quad (\text{I.30a})$$

wobei $\delta \varepsilon$ ein infinitesimal kleiner Parameter ist. Die Variation $\delta \dot{q}_i$ der Zeitableitungen schreiben wir in der Form

$$\delta \dot{q}_i = \delta \varepsilon g_i(q_j, \dot{q}_j, \ddot{q}_j; t) \quad (\text{I.30b})$$

mit Funktionen g_i , die auch von den verallgemeinerten Beschleunigungen $\ddot{q}_j$ abhängen können, im Gegensatz zu den f_i . Wir berechnen sie aus der Definition von $\delta \dot{q}_i$

$$\frac{d}{dt} (q_i + \delta q_i) = \dot{q}_i + \delta \dot{q}_i \quad (\text{I.31})$$

und erhalten

$$g_i = \frac{df_i}{dt} = \sum_j \left(\dot{q}_j \frac{\partial f_i}{\partial q_j} + \ddot{q}_j \frac{\partial f_i}{\partial \dot{q}_j} \right) + \frac{\partial f_i}{\partial t} \quad (\text{I.32})$$

Unter der Transformation $\mathcal{T}$ erfährt die Lagrange-Funktion die infinitesimale Änderung

$$\delta L = \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) = \delta \varepsilon \sum_i \left(f_i \frac{\partial L}{\partial q_i} + g_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \quad (\text{I.33})$$

Die zentrale Forderung an $\mathcal{T}$ ist, dass diese Änderung als eine totale Zeitableitung geschrieben werden kann

$$\delta L = \delta \epsilon \frac{d\Lambda}{dt} \quad (\text{I.34})$$

Wir konstruieren die Funktion

$$F = \sum_i f_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \Lambda \quad (\text{I.35})$$

Der Satz von Noether besagt nun, dass dies eine Erhaltungsgröße ist: Ihre totale Zeitableitung dF/dt verschwindet für alle physikalischen Bewegungen des Systems.

Beweis Die Ableitung von $\sum_i f_i \partial L / \partial \dot{q}_i$ ist

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\sum_i f_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) &= \sum_i \left(g_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + f_i \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \\ &= \sum_i \left(g_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + f_i \frac{\partial L}{\partial q_i} \right) \end{aligned} \quad (\text{I.36})$$

Im Übergang zur zweiten Zeile haben wir die Euler-Lagrange-Gleichungen (I.17) verwendet. Mit den Ausdrücken (I.33) und (I.34) können wir dies umschreiben in

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_i f_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\delta L}{\delta \epsilon} = \frac{d}{dt} \Lambda \quad (\text{I.37})$$

Der Vergleich mit Gl. (I.35) liefert sofort $dF/dt = 0$. $\square$

Falls es möglich ist, ohne Verwendung der Bewegungsgleichungen die Variation δL der Lagrange-Funktion [Gl. (I.33)] als totale Zeitableitung einer Funktion $\Lambda(q_i; t)$ zu schreiben, die nicht von den Geschwindigkeiten abhängt, sind L und $L + \delta L$ äquivalent. Die Transformation $\mathcal{T}$ ist dann definitionsgemäß eine Symmetrie. Dieser Fall kann nicht eintreten, wenn in die Transformation f_i der Koordinaten (I.30a) die Geschwindigkeiten $\dot{q}_j$ eingehen. In der Tat stehen in δL dann Terme mit $\ddot{q}_j$, die nicht auf die Form $d\Lambda(q_i; t)/dt$ gebracht werden können.

Bemerkungen

- Es mag notwendig sein, dass die Euler-Lagrange-Gleichungen verwendet werden müssen, um die Variation δL als totale Zeitableitung zu schreiben [Weg von Gl. (I.33) nach (I.34)]. Man kann mit ihrer Hilfe z. B. die Beschleunigung $\ddot{q}_j$ zugunsten der q_i und $\dot{q}_i$ eliminieren und so eine Funktion $\Lambda(q_i, t)$ der Koordinaten allein finden (in deren totaler Ableitung keine Beschleunigungen vorkommen).
- Der Satz von Noether ist natürlich nur von Interesse, wenn die Erhaltungsgröße F eine nicht-triviale Funktion der q_i und $\dot{q}_i$ ist. Unter den Bedingungen von Gl. (I.34) (die Variation δL lässt sich durch eine Funktion $\Lambda(q_i; t)$ der Koordinaten ausdrücken) liefert Gl. (I.35) in der Regel eine

„interessante“ Erhaltungsgröße F , weil diese von den $\dot{q}_i$ nur über die verallgemeinerten Impulse $\partial L / \partial \dot{q}_i$ und eventuell über die Funktionen f_i abhängt.

Es spricht nichts dagegen, dass eine Funktion $\Lambda(q_i, \dot{q}_i, t)$ entsteht, die auch von den Geschwindigkeiten abhängt. Relative häufig tritt dann allerdings der Fall ein, dass sich keine neue Information ergibt. Ein triviales Beispiel wären völlig beliebige Funktionen f_i und die Wahl $\Lambda = \sum_i f_i \partial L / \partial \dot{q}_i$. Dies ist immer möglich, weil die Bewegungsgleichungen dafür sorgen, dass Gl. (I.37) proportional zur totalen Ableitung dieser Funktion ist. Die Erhaltungsgröße ist dann aber $F \equiv 0$, was eine triviale Konstante ist.

Beispiele

■ Betrachten wir erneut ein System, dessen Lagrange-Funktion L nicht explizit von der Zeit abhängt. Als Symmetrietransformation nehmen wir eine Verschiebung der Zeitkoordinate

$$\mathcal{T}: q_i(t) \mapsto q'_i(t) = q_i(t + \delta t) \quad (\text{I.38})$$

Der infinitesimale Parameter ist hier der konstante Zeitschritt δt selbst: Er verschiebt die Bewegung um δt (wie in Abb. 2). Die Entwicklung von $q'_i(t)$ in der ersten Ordnung in δt liefert

$$\delta q_i(t) = \dot{q}_i \delta t \quad (\text{I.39})$$

so dass wir im Satz von Noether, Gl. (I.30), die Wahl $f_i = \dot{q}_i$, $g_i = \dot{q}_i$ getroffen haben. Außerdem ist die Variation der Lagrange-Funktion bereits eine totale Zeitableitung

$$\delta L = \delta t \sum_i \left(\dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial q_i} + \ddot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \delta t \frac{dL}{dt} \quad (\text{I.40})$$

denn wir sind von $\partial L / \partial t = 0$ ausgegangen. Die Größe Λ fällt also mit L zusammen, und wir erhalten

$$F = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L \quad (\text{I.41})$$

Dies ist die übliche Definition der Energie (Hamilton-Funktion) in der Lagrange-Mechanik, die wir in Gl. (I.27) noch ohne verallgemeinerte Koordinaten formuliert haben.

■ Welche Erhaltungsgröße folgt aus der Invarianz unter Galilei-Transformationen (Wechsel zwischen Inertialsystemen)? Betrachten wir dazu eine Lagrange-Funktion in der Form

$$L = \sum_n \frac{m_n}{2} \dot{\mathbf{r}}_n^2 - V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, \dots) \quad (\text{I.42})$$

wobei das Wechselwirkungspotential V unter einer gemeinsamen Translation aller Koordinaten $\mathbf{r}_n$ invariant sei. Dann ist der Gesamtimpuls

$$\mathbf{P} = \sum_n \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_n} = \sum_n \mathbf{p}_n \quad (\text{I.43})$$

eine erste Erhaltungsgröße. Der Wechsel in ein Bezugssystem, das sich mit der Geschwindigkeit $\delta \mathbf{v}$ bewegt (s. Abb. 6), wird durch

$$\mathcal{T}: \mathbf{r}_n \mapsto \mathbf{r}_n + t \delta \mathbf{v} \quad (\text{I.44})$$

vermittelt, was man eine Galilei-Transformation nennt. Alle drei Komponenten von $\delta \mathbf{v}$ spielen hier die Rolle des infinitesimal kleinen Parameters $\delta \varepsilon$ aus dem Satz von Noether, und wir haben offenbar

$$\delta \mathbf{r}_n = t \delta \mathbf{v} \quad \text{und} \quad \delta \dot{\mathbf{r}}_n = \delta \mathbf{v} \quad (\text{I.45})$$

Die Variation der Lagrange-Funktion ist

$$\delta L = \delta \mathbf{v} \cdot \sum_n \left(m_n \dot{\mathbf{r}}_n - t \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_n} \right) \quad (\text{I.46})$$

Ist V global translationsinvariant, verschwindet der zweite Term nach Ausführen der Summe, und wir lesen eine totale Zeitableitung ab

$$\delta L = \delta \mathbf{v} \cdot \frac{d}{dt} \mathbf{G} \quad (\text{I.47})$$

mit

$$\mathbf{G}(t) = \sum_n m_n \mathbf{r}_n(t) \quad (\text{I.48})$$

Offenbar ist $\mathbf{G}$ (bis auf einen Faktor $M = \sum_n m_n$, die Gesamtmasse der Teilchen) die Position des Schwerpunkts aller Teilchen. Wenn wir statt Λ die vektorielle Größe $\mathbf{G}$ in Gl. (I.35) einsetzen, finden wir als Erhaltungsgröße die Schwerpunktskoordinate zum Zeitpunkt $t = 0$ (mal $-M$)

$$\mathbf{G}_0 = t \sum_n m_n \dot{\mathbf{r}}_n - \sum_n m_n \mathbf{r}_n = \mathbf{P} t - \mathbf{G}(t) \quad (\text{I.49})$$

Der Schwerpunkt bewegt sich somit geradlinig gleichförmig

$$\mathbf{G}(t) = \mathbf{P} t - \mathbf{G}_0 \quad (\text{I.50})$$

mit einer Geschwindigkeit proportional zum Gesamtimpuls $\mathbf{P}$.

Übungen

■ Betrachten Sie im voranstehenden zweiten Beispiel den Fall, dass das Potential V nicht translationsinvariant ist, sondern auf die Teilchen äußere Kräfte derart wirken, dass die Summe der Kräfte konstant gleich $\mathbf{F}$ ist. Überprüfen Sie, dass gilt

$$\delta L = \delta \mathbf{v} \cdot \frac{d}{dt} \mathbf{\Lambda} \quad (\text{I.51})$$

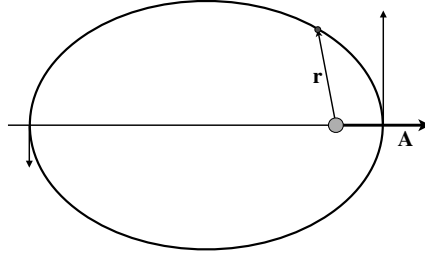


Abb. 5 Illustration des Runge-Lenz-Vektors $\mathbf{A}$, parallel zur großen Halbachse der Kepler-Ellipse. In einem Brennpunkt hellgrau der Zentralkörper, relativ dazu ist $\mathbf{r}$ der Ortsvektor des Massepunkts. An Perizentrum und Apozentrum steht seine Geschwindigkeit (Pfeile) senkrecht auf $\mathbf{r}$.

mit

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{G}(t) + \frac{1}{2} \mathbf{F} t^2 \quad (\text{I.52})$$

Folgern Sie, dass sich der Schwerpunkt $\mathbf{G}(t)$ gleichförmig beschleunigt bewegt und geben Sie die Erhaltungsgröße $\mathbf{G}_0$ an.

■ Gegeben sei eine Punktmasse, die sich in dem Zentralpotential $V = -\alpha/r^n$ (mit $n = 1, 2, \dots$) bewegt. Wir notieren $\mathbf{p} = m \dot{\mathbf{r}}$ ihren Impuls und $\mathcal{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ ihren Drehimpuls bezüglich des Ursprungs. Betrachten Sie die Transformation

$$\delta \mathbf{r} = \delta \boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{\mathcal{L}} = m \delta \boldsymbol{\epsilon} \times (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) \quad (\text{I.53})$$

mit einem infinitesimal kleinen Vektor $\delta \boldsymbol{\epsilon}$ und leiten Sie die Variation der Lagrange-Funktion ab

$$\delta L = -m \frac{n\alpha}{r^{n+2}} \left[\mathbf{r}^2 (\delta \boldsymbol{\epsilon} \cdot \dot{\mathbf{r}}) - (\delta \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{r}) (\mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{r}}) \right] \quad (\text{I.54})$$

Im Keplerproblem und im Coulomb-Potential ist der Exponent $n = 1$. Zeigen Sie, dass gilt

$$\delta L = \frac{d}{dt} \left(-m\alpha \delta \boldsymbol{\epsilon} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \quad (\text{I.55})$$

Folgern Sie, dass der sogenannte Runge-Lenz-Vektor

$$\mathbf{A} = \mathbf{p} \times \boldsymbol{\mathcal{L}} - m\alpha \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (\text{I.56})$$

eine Konstante der Bewegung ist. Seine anschauliche Bedeutung ist in Abb. 5 skizziert: In der Bahnebene bleiben die Punkte fix, an denen die Geschwindigkeit senkrecht auf $\mathbf{r}$ steht. Die Bahnkurve ist keine Rosette, sondern eine geschlossene Kurve. Diese so genannte Kepler-Ellipse hat eine große Halbachse, die parallel zu $\mathbf{A}$ liegt; ihre Exzentrizität beträgt $|\mathbf{A}|/m\alpha$.

■ In Gl. (I.30) hatten wir angenommen, dass die Transformation nur die Größen q_i und $\dot{q}_i$ verändert, aber nicht die Zeit. Wir können dies verallgemeinern, indem wir neben δq_i und $\delta \dot{q}_i$ auch eine Variation der Zeitkoordinate zulassen:

$$\delta t = \delta \varepsilon h(q_j, \dot{q}_j; t) \quad (I.57)$$

Die Beziehung (I.32) für die Größe g_i müssen wir nun anpassen. Zeigen Sie durch eine Entwicklung in erster Ordnung in $\delta \varepsilon$:

$$g_i = \frac{df_i}{dt} - \dot{q}_i \frac{dh}{dt} \quad (I.58)$$

Überprüfen Sie, dass für die Variation der Lagrange-Funktion gilt

$$\delta L = \delta \varepsilon \left\{ \sum_i \left(f_i \frac{\partial L}{\partial q_i} + g_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) + h \frac{\partial L}{\partial t} \right\} \quad (I.59)$$

Wir nehmen nun an, dass h so gewählt ist, dass dies in folgender Form geschrieben werden kann:

$$\delta L = \delta \varepsilon \left(\frac{d}{dt} \Lambda + L \frac{dh}{dt} \right) \quad (I.60)$$

Zeigen Sie, dass die Größe

$$F = \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} (f_i - h \dot{q}_i) - \Lambda + h L \quad (I.61)$$

eine Konstante der Bewegung ist. Konstruieren Sie ein Beispiel und überlegen Sie, ob die variierte Größe $L + \delta L$ noch als Lagrange-Funktion aufgefasst werden kann. Wann wäre das nicht der Fall?

B.3 Hamilton-Mechanik

Zum Abschluss der klassischen Mechanik wiederholen wir kurz ihre Hamilton'sche Formulierung, die häufig verwendet wird, um ein physikalisches System zu „quantisieren“. Dies ist bei weitem nicht die einzig mögliche Methode: Es gibt z. B. das Pfadintegral nach Feynman (Feynman und Hibbs, 2005), das auf der Wirkung und der Lagrange-Funktion aufbaut und in der Feldtheorie häufig Verwendung findet.

B.3.1 Allgemeine Formulierung

Wir hatten bereits gesehen, dass zu einer verallgemeinerten Koordinate ein Impuls definiert wird

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (I.62)$$

In der Hamilton'schen Formulierung nennt man p_i den zu q_i „kanonisch konjugierten“ Impuls. Er ersetzt als Koordinate für den Zustand des Systems die Geschwindigkeit $\dot{q}_i$.

Wir nehmen an, dass man die Geschwindigkeiten $\dot{q}_i$ zugunsten von p_i und q_i eliminieren kann, so dass der dynamische Zustand des Systems auch durch die Größen $\{q_i, p_i, i = 1, \dots, N\}$ charakterisiert wird. Sie werden in der Hamilton-Mechanik als unabhängige Koordinaten aufgefasst. Den Raum, den die Ort- und Impulskoordinaten aufspannen, nennt man den „Phasenraum“.

Die Hamilton-Funktion hatten wir in Gl. (I.41) definiert:

$$H(p_i, q_i) = \sum_i p_i \dot{q}_i(q_j, p_j) - L(q_i, \dot{q}_i(q_j, p_j)) \quad (\text{I.63})$$

Wir verwenden hier ausdrücklich die Schreibweise $\dot{q}_i(q_j, p_j)$, um klar zu machen, dass die Geschwindigkeiten $\dot{q}_i$ durch Koordinaten und Impulse ausgedrückt werden. Im Folgenden kommen wir auf das kürzere $\dot{q}_i$ zurück. Das Differential von H ist

$$dH(p_i, q_i) = \sum_i (\dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i) - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \quad (\text{I.64a})$$

Die Terme proportional zu $d\dot{q}_i$ heben sich wegen der Definition (I.62) des Impulses p_i auf. Die Euler-Lagrange-Gleichungen (I.17) zeigen, dass man $\partial L / \partial q_i$ durch $\dot{p}_i$ ersetzen darf. So ergibt sich

$$dH(p_i, q_i) = \sum_i (\dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i) \equiv \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i \right) \quad (\text{I.64b})$$

wobei der letzte Ausdruck das Differential von H in seinen natürlichen Variablen angibt.

Der Vergleich der Terme proportional zu dp_i et dq_i liefert nun die Hamilton'schen oder „kanonischen“ Bewegungsgleichungen

$$\boxed{\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1, \dots, N)} \quad (\text{I.65})$$

An Stelle von N Differentialgleichungen zweiter Ordnung in der Zeit für N Variablen (Lagrange-Mechanik) haben wir es hier mit $2N$ Gleichungen erster Ordnung für $2N$ Variablen zu tun.

B.3.2 Poisson-Klammern

Seien $A(q_i, p_i)$ und $B(q_i, p_i)$ zwei auf dem Phasenraum definierte physikalische Größen. Man nennt folgenden Ausdruck die „Poisson-Klammer“ zwischen A und B :

$$\{A, B\} := \sum_i \left[\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right] \quad (\text{I.66})$$

Für die Phasenraum-Koordinaten selbst überprüft man sofort

$$\begin{aligned} \{q_i, p_j\} &= \delta_{ij} \\ \{q_i, q_j\} &= \{p_i, p_j\} = 0 \end{aligned} \quad (\text{I.67})$$

mit dem Kronecker-Symbol ($\delta_{ij} = 1$ für $i = j$ und sonst $= 0$). Allgemein hat die Poisson-Klammer die Eigenschaften

$$\{A, B\} = -\{B, A\} \quad (\text{antisymmetrisch}) \quad (\text{I.68a})$$

$$\{A, A\} = 0 \quad (\text{I.68b})$$

$$\{A, BC\} = \{A, B\}C + B\{A, C\} \quad (\text{Produktregel}) \quad (\text{I.68c})$$

Dieselben Regeln gelten in der Quantenmechanik für Kommutatoren.

Die Zeitableitung einer beliebigen Phasenraum-Funktion $F(q_i, p_i; t)$ kann man auch durch die Poisson-Klammer ausdrücken

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left(\dot{q}_i \frac{\partial F}{\partial q_i} + \dot{p}_i \frac{\partial F}{\partial p_i} \right) = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} \quad (\text{I.69})$$

unter Verwendung der kanonischen Gleichungen (I.65). In diesem Sinn kann man sagen, dass die Hamilton-Funktion die zeitliche Entwicklung einer Funktion F von Orten und Impulsen „erzeugt“.

Aus diesem Grund liefern die Poisson-Klammern einen neuen Gesichtspunkt auf die Konstanten der Bewegung: Ist $F = F(q_i, p_i)$ nicht explizit von der Zeit abhängig und verschwindet seine Poisson-Klammer mit der Hamilton-Funktion, $\{F, H\} = 0$, so ist F eine *Erhaltungsgröße*.

Übung Beweisen Sie die Jacobi-Identität

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0 \quad (\text{I.70})$$

für beliebige Phasenraumfunktionen A, B, C . Folgern Sie daraus den

Satz von Poisson Die Poisson-Klammer $\{F, G\}$ ist ebenfalls eine Erhaltungsgröße, wenn dies für F und G gilt.

Auf der Suche nach neuen Konstanten der Bewegung mit Hilfe des Satzes von Poisson kann es vorkommen, dass die Poisson-Klammer $\{F, G\}$ einfach verschwindet, eine Konstante liefert, die nicht von den q und p abhängt, oder eine Linearkombination von F und G ist. In diesen Fällen liefert der Satz von Poisson keine neue Information.

B.3.3 Erzeugende von Transformationen

Mit Hilfe der Poisson-Klammern kann man auch infinitesimale Transformationen $\mathcal{T}$ der Bewegung eines Systems darstellen. Wir hatten diesen Begriff bereits im Satz von Noether aus §B.2.2 am Werk gesehen: Es sind Transformationen gemeint, die auf infinitesimal kleine Änderungen (Variationen) der kanonischen Koordinaten $\delta q_i = q'_i - q_i$ und δp_i führen, so dass man diese nur in den niedrigsten Termen einer Potenzreihenentwicklung mitnehmen muss. Wir haben den kleinen Parameter im Satz von Noether [s. Gl. (I.30a)] als ein

allgemeines $\delta\epsilon$ notiert. Für jede kontinuierliche Symmetrietransformation kann man allerdings konkrete infinitesimale Parameter angeben, die die Transformation beschreiben und eine physikalische Interpretation haben. In diesem Abschnitt sehen wir, wie dies in der Hamilton'schen Mechanik durch den Begriff der „erzeugenden Funktion“ formuliert wird. Sie liefert einen engen Zusammenhang zwischen den Transformationen einerseits und den entsprechenden Erhaltungsgrößen andererseits. Der Einfachheit halber betrachten wir ein Teilchen in drei Dimensionen, dessen Phasenraumkoordinaten die Orts- und Impulsvektoren $\mathbf{r}$ und $\mathbf{p}$ sind. Als Funktionen der Zeit geben sie die Bewegung des Teilchens an.

■ **Verschiebungen im Raum** Analog zu Gl. (I.2) sind sie definiert als die Abbildungen

$$\mathcal{T}: \begin{cases} \mathbf{r} \mapsto \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \delta\mathbf{b} \\ \mathbf{p} \mapsto \mathbf{p}' = \mathbf{p} \end{cases} \quad (\text{I.71})$$

mit einem infinitesimalen Vektor $\delta\mathbf{b}$. Wir hatten in Gl. (I.67) die Poisson-Klammern zwischen verallgemeinerten Koordinaten und Impulsen angegeben. Für ein Teilchen nehmen sie die Form

$$\{p_x, x\} = -1 \quad \{p_y, x\} = \{p_z, x\} = 0 \quad (\text{I.72})$$

an und dies ermöglicht die Schreibweise

$$\{\delta\mathbf{b} \cdot \mathbf{p}, x\} = -\delta b_x \quad (\text{I.73})$$

für die Verschiebung. Die Transformationen (I.71) können wir somit in der Form

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \mathbf{r} - \{\delta\mathbf{b} \cdot \mathbf{p}, \mathbf{r}\} \\ \mathbf{p}' &= \mathbf{p} - \{\delta\mathbf{b} \cdot \mathbf{p}, \mathbf{p}\} \end{aligned} \quad (\text{I.74})$$

schreiben: Es ist die Poisson-Klammer mit der Linearkombination $\delta\mathbf{b} \cdot \mathbf{p}$ der Impulsfunktionen, die Verschiebungen im Raum erzeugt. Aus diesem Grund sagt man, dass der Impuls $\mathbf{p}$ die „erzeugende Funktion“ für Translationen ist.

■ **Drehungen** Eine infinitesimale Drehung wird durch einen (unendlich kleinen) Drehwinkel $\delta\varphi$ und eine Drehachse $\mathbf{u}$ parametrisiert, wobei $\mathbf{u}$ ein dreidimensionaler Einheitsvektor ist. Beide hängen nicht von der Zeit ab, und wir können sie in dreidimensionaler Form

$$\delta\mathbf{a} = \mathbf{u} \delta\varphi \quad (\text{I.75})$$

zusammen fassen. Es werden nun sowohl Orts- als auch Impulskoordinaten transformiert, und zwar über Vektorprodukte (s. Ergänzung C_V, §1.2.3)

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \mathbf{r} + \delta\mathbf{r} + \dots = \mathbf{r} + \delta\varphi \mathbf{u} \times \mathbf{r} + \dots \\ \mathbf{p}' &= \mathbf{p} + \delta\mathbf{p} + \dots = \mathbf{p} + \delta\varphi \mathbf{u} \times \mathbf{p} + \dots \end{aligned} \quad (\text{I.76})$$

Anschauliche Bedeutung dieser Ausdrücke: Die Komponenten parallel zur Achse $\mathbf{u}$ sind invariant unter dieser Drehung. In der Ebene senkrecht zu $\mathbf{u}$ sind die Änderungen $\delta\mathbf{r}$ und

$\delta \mathbf{p}$ durch die „rechte-Hand-Regel“ gegeben: Daumen entlang $\mathbf{u}$ und Finger anwinkeln, so geben die Finger die Richtung der Änderung $\delta \mathbf{r}$ an, die ein Vektor $\mathbf{r}$ parallel zum Handteller erfährt (s. Ergänzung C_V, Abb. 2).

Mit dem bereits eingeführten Drehimpulsvektor

$$\boldsymbol{\ell} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (I.77)$$

überprüft man schnell die Ausdrücke

$$\begin{aligned} \{\delta \varphi \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\ell}, x\} &= -\delta \varphi u_y z + \delta \varphi u_z y = -\delta \varphi (\mathbf{u} \times \mathbf{r})_x \\ \{\delta \varphi \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\ell}, p_x\} &= -\delta \varphi u_y p_z + \delta \varphi u_z p_y = -\delta \varphi (\mathbf{u} \times \mathbf{p})_x \end{aligned} \quad (I.78)$$

Die infinitesimale Transformation (I.76) hat erneut die kompakte Form

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \{\delta \varphi \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\ell}, \mathbf{r}\} + \dots \quad (I.79)$$

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} - \{\delta \varphi \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\ell}, \mathbf{p}\} + \dots \quad (I.80)$$

Für Drehungen spielen somit die Komponenten des Drehimpulses die Rolle der erzeugenden Funktion, analog zum Impuls, der Verschiebungen erzeugt.

■ **Verschiebungen in der Zeit** Zwei Bahnkurven $\mathbf{r}(t)$ und $\mathbf{r}'(t)$ sind in der Zeit relativ zueinander verschoben, wenn ihr Zeitargument sich um eine Konstante δt unterscheidet. Wie in Gl. (I.38) (und in Abb. 2) haben wir in erster Ordnung in δt

$$\begin{aligned} \mathbf{r}'(t) &= \mathbf{r}(t + \delta t) = \mathbf{r}(t) + \delta t \dot{\mathbf{r}}(t) + \dots \\ \mathbf{p}'(t) &= \mathbf{p}(t + \delta t) = \mathbf{p}(t) + \delta t \dot{\mathbf{p}}(t) + \dots \end{aligned} \quad (I.81)$$

Gemäß der Formulierung (I.69) der Bewegungsgleichungen über die Poisson-Klammern haben wir nun

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \mathbf{r} - \{\delta t H, \mathbf{r}\} + \dots \\ \mathbf{p}' &= \mathbf{p} - \{\delta t H, \mathbf{p}\} + \dots \end{aligned} \quad (I.82)$$

Die Hamilton-Funktion H ist also die Erzeugende für Translationen in der Zeit, wie bereits nach Gl. (I.69) vorweggenommen.

■ **Galilei-Transformationen** Betrachten wir zwei Bezugssysteme K und K' (s. Abb. 6), die sich relativ zueinander mit der Geschwindigkeit $\delta \mathbf{v}$ bewegen. Genauer gesagt gibt $-\delta \mathbf{v}$ die Position des Ursprungs von K' im Bezugssystem K an. Wir betrachten den Fall, dass $\delta \mathbf{v}$ ein konstanter infinitesimaler Vektor ist.

Die Position des Teilchens wird im System K durch den Ortsvektor $\mathbf{r}(t)$ beschrieben. Im System K' hat dasselbe Teilchen die Koordinaten $\mathbf{r}'(t)$ (passive Perspektive, s. §A.3) mit

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + t \delta \mathbf{v} \quad (I.83)$$

Für die Impulskoordinaten gilt analog

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} + m \delta \mathbf{v} \quad (I.84)$$

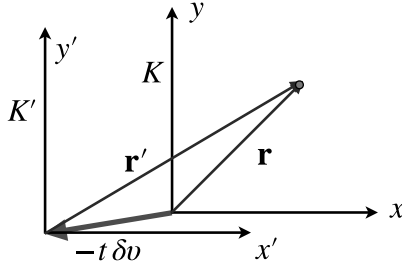


Abb. 6 Zwei Inertialsysteme K und K' mit parallelen Achsen bewegen sich relativ zueinander mit der Geschwindigkeit δv : Der Verbindungsvektor zwischen den Koordinatennullpunkten beträgt $-t \delta v$. Die Position eines Teilchens wird in K bzw. K' durch die Ortsvektoren $\mathbf{r}$ und $\mathbf{r}'$ angegeben.

Wir betrachten hier Galilei-Transformationen (nichtrelativistischer Grenzfall), so dass beide Bezugssysteme dieselbe Zeitkoordinate verwenden ($t' = t$). Mit dem in Gl. (I.49) eingeführten Vektor

$$\mathbf{G}_0(t) = -m \mathbf{r} + t \mathbf{p} \quad (\text{I.85})$$

kann man die Galilei-Transformation kompakt darstellen

$$\begin{aligned} \{x, \mathbf{G}_0(t) \cdot \delta \mathbf{v}\} &= t \delta v_x \\ \{p_x, \mathbf{G}_0(t) \cdot \delta \mathbf{v}\} &= m \delta v_x \end{aligned} \quad (\text{I.86})$$

Wir erkennen die Struktur einer infinitesimalen Transformationen wieder

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \mathbf{r} - \{\delta \mathbf{v} \cdot \mathbf{G}_0(t), \mathbf{r}\} \\ \mathbf{p}' &= \mathbf{p} - \{\delta \mathbf{v} \cdot \mathbf{G}_0(t), \mathbf{p}\} \end{aligned} \quad (\text{I.87})$$

Im Formalismus der Poisson-Klammern werden Galilei-Transformationen also von der Größe $\mathbf{G}_0$ erzeugt. Für ein System von Massepunkten wäre sie proportional zur Position des Schwerpunkts zum Zeitpunkt $t = 0$ [s. Gl. (I.50)]. Die Zeitabhängigkeit in Gl. (I.85) entsteht, weil man $\mathbf{G}_0$ durch die Phasenraum-Koordinaten $\mathbf{r}, \mathbf{p}$ zum Zeitpunkt t ausdrückt.

B.3.4 Symmetrietransformationen und Erhaltungsgrößen

Wann liefern die in §B.3.3 eingeführten Transformationen eine Symmetrie? In der Hamilton'schen Mechanik lautet die Antwort:

Eine infinitesimale Transformation des Phasenraums, die man über die Poisson-Klammern mit einer Funktion $G(q_i, p_j, t)$ ausdrücken kann,

$$q'_i = q_i - \{G, q_i\} \delta\epsilon \quad p'_j = p_j - \{G, p_j\} \delta\epsilon \quad (\text{I.88a})$$

ist eine Symmetrietransformation (genannt „kanonische Transformation“), wenn gilt:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \{G, H\} = 0 \quad (\text{I.88b})$$

Insbesondere ist die erzeugende Funktion G eine Erhaltungsgröße.

Beweis

Wir beobachten zunächst, dass die Erzeugende G in Gl. (I.88a) nur bis auf eine additive Funktion der Zeit definiert ist, wir es also mit einer Familie von äquivalenten Transformationen zu tun haben. Wir zeigen, dass die Transformation eine Symmetrie ist, wenn es in dieser Familie eine Erhaltungsgröße gibt.

Für den Beweis kommen wir auf das Schema in Abb. 1 zurück. Wir wenden die Zeitentwicklung und die Transformation $G(t)$ nacheinander an: Eine Symmetrie liegt vor, wenn es dabei nicht auf die Reihenfolge ankommt. Die Anwendung von $G(t)$ wird dabei zu infinitesimal benachbarten Zeitpunkten t bzw. $t + \delta t$ vorgenommen. Dies kann etwa wie im voranstehenden Beispiel der Wechsel des Bezugssystems sein. In dem Zeitintervall $t \dots t + \delta t$ erzeugt die Hamilton-Funktion die Zeitentwicklung gemäß Gl. (I.82). Wenden wir bei t die Symmetrie an, erhalten wir

$$\begin{aligned} q'_i(t) &= q_i(t) - \{G(t), q_i\} \delta\epsilon \\ p'_j(t) &= p_j(t) - \{G(t), p_j\} \delta\epsilon \end{aligned} \quad (\text{I.89a})$$

Die Zeitentwicklung führt dann auf

$$q'_i(t + \delta t) = q_i(t) - \{H, q_i\} \delta t - \{G(t), q_i\} \delta\epsilon + \{H, \{G(t), q_i\}\} \delta\epsilon \delta t \quad (\text{I.89b})$$

und auf einen analogen Ausdruck für $p'_j(t + \delta t)$. (Es genügt, Gl. (I.82) anzuwenden, keine weitere Taylor-Entwicklung ist nötig.) Bei der Anwendung in umgekehrter Reihenfolge erhalten wir $q''_i(t + \delta t)$ und $p''_j(t + \delta t)$ aus einer ähnlichen Rechnung. Für die Ortskoordinate gilt etwa

$$q''_i(t + \delta t) = q_i(t) - \{G(t), q_i\} \delta\epsilon - \{H, q_i\} \delta t - [\{\partial_t G, q_i\} - \{G(t), \{H, q_i\}\}] \delta\epsilon \delta t \quad (\text{I.89c})$$

mit der Abkürzung $\partial_t G = \partial G / \partial t$ für die partielle Zeitableitung. Sie ergibt sich aus der Taylor-Entwicklung von $G(t + \delta t)$, wenn die Transformation explizit von der Zeit abhängt.

Es liegt eine Symmetrie vor, wenn die Differenz der Ausdrücke (I.89b), (I.89c) für beliebige Phasenraumkoordinaten verschwindet. Dabei heben sich die Terme erster Ordnung weg, und wir erhalten die Bedingung

$$\begin{aligned} 0 &= \{H, \{G(t), q_i\}\} + \{\partial_t G, q_i\} - \{G(t), \{H, q_i\}\} \\ &= \{\partial_t G, q_i\} + \{\{G, H\}, q_i\} \quad \text{für alle } q = q_i, p_j \end{aligned} \quad (\text{I.90a})$$

Im Übergang zur zweiten Zeile haben wir die Jacobi-Identität (I.70) für die Poisson-Klammer verwendet. Wenn aber die Phasenraumfunktion $\partial_t G + \{G, H\}$ eine verschwindende Poisson-Klammer mit allen Phasenraumkoordinaten q_i, p_j hat, kann sie nicht von ihnen abhängen (alle

partiellen Ableitungen sind Null). Sie kann lediglich eine Funktion der Zeit sein:

$$\partial_t G + \{G, H\} = F(t) \quad (\text{I.90b})$$

Auf der linken Seite steht gemäß Gl. (I.69) die totale Zeitableitung dG/dt . Wenn wir von G das Zeitintegral von $F(t)$ abziehen, bleiben wir innerhalb der Familie von äquivalenten Symmetrietransformationen, gewinnen aber eine Erhaltungsgröße:

$$\frac{d}{dt} \left(G(t) - \int^t dt' F(t') \right) = 0 \quad (\text{I.90c})$$

Für die Größe in den Klammern gilt somit Gl. (I.88b), was zu beweisen war. $\square$

C Symmetrien in der Quantenmechanik

Symmetrietransformationen spielen in der Quantenphysik eine mindestens genauso wichtige Rolle wie in der klassischen Mechanik. Wir beginnen mit einem kurzen Abriss des üblichen Formalismus der Quantenmechanik. Für mehr Details seien die Leser auf die einschlägigen Lehrbücher verwiesen, etwa Messiah (1990), Schiff (1968), Ballentine (2014) oder Sakurai und Napolitano (2020). Unsere Notation folgt dem Buch von Cohen-Tannoudji et al. (2020).

C.1 Kanonische Quantisierung

Die Quantenmechanik beschreibt ein physikalisches System nicht mehr durch Koordinaten $q_i(t)$ und $p_i(t)$, sondern durch einen „Ket-Vektor“ $|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle$. Die Kets bilden einen Zustandsraum $\mathcal{H}$, der ein Vektorraum mit komplexen Koeffizienten und einem Skalarprodukt $\langle\psi|\phi\rangle$ (ein Hilbert-Raum) ist.

Für ein spinloses Teilchen gibt es zwei typische Sätze von Basisvektoren in $\mathcal{H}$: die Eigenvektoren $|\mathbf{r}\rangle$ des Ortsoperators $\mathbf{R}$ sowie diejenigen $|\mathbf{p}\rangle$ des Impulsoperators $\mathbf{P}$. Die Wirkung dieser Operatoren in $\mathcal{H}$ werden wir in Kapitel IV ausführlich diskutieren. Die Skalarprodukte mit diesen beiden (kontinuierlichen) Basisvektoren liefern zwei Wellenfunktionen

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle \quad (\text{I.91a})$$

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \langle\mathbf{p}|\psi\rangle \quad (\text{I.91b})$$

die man jeweils die „Ortsdarstellung“ $\psi(\mathbf{r})$ und die „Impulsdarstellung“ $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$ des abstrakten Zustands $|\psi\rangle$ nennt. Für Teilchen mit Spin sind weitere Informationen nötig, etwa die Quantenzahl einer Spinprojektion, was auf Wellenfunktionen mit mehreren Komponenten führt.

Die klassischen Größen $A(q_i, p_i)$ (kinetische Energie, Drehimpuls usw.) werden quantenmechanisch durch Hermite'sche lineare Abbildungen (Operatoren) $\hat{A}$ in $\mathcal{H}$ dargestellt. Wir werden den Zirkumflex-Akzent häufig weglassen und Operatoren durch große Buchstaben kennzeichnen. Ein Hermite'scher Operator* $\hat{A}$ (Einschub auf S. 27) heißt „Observable“,

wenn man jeden Ket $|\psi\rangle$ als Linearkombination von Eigenvektoren von $\hat{A}$ schreiben kann. Die Ersetzung

$$A(q_i, p_i) \Rightarrow \hat{A} \quad (\text{I.92a})$$

nennt man „Quantisierung“. Zusammen mit der Vorschrift (I.92a) hat bereits Dirac (1947) die Regel vorgeschlagen, Poisson-Klammern durch Kommutatoren zu ersetzen

$$\{A, B\} \Rightarrow -\frac{i}{\hbar}[\hat{A}, \hat{B}] \equiv -\frac{i}{\hbar}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \quad (\text{I.92b})$$

Der Faktor i macht aus dem Kommutator eine Hermite'sche Observable, der Faktor $1/\hbar$ sorgt für dieselbe physikalische Dimension wie die Poisson-Klammer. Zwischen den Cartesischen Komponenten der Orts- und Impulsoperatoren gelten etwa die fundamentalen Vertauschungsrelationen:

$$[R_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (\text{I.93})$$

mit $R_i = X, Y, Z$ für $i = x, y, z$.

Man liest häufig von Quantisierungsregeln, in denen klassische Größen A so in Operatoren $\hat{A}$ verwandelt werden, dass man $q \Rightarrow \hat{Q}$ und $p \Rightarrow \hat{P}$ ersetzt und Produkte symmetrisiert, um eine Hermite'sche Observable zu erhalten. Eine Poisson-Klammer zwischen Größen würde durch den Kommutator der entsprechenden Observablen gebildet. Dieser Ansatz ist allerdings auf der Menge aller klassischen Größen keine wohldefinierte Abbildung und führt zu Widersprüchen (Satz von Groenewold (1946), s. auch Shewell (1959)). Wenn etwa in der Lagrange-Funktion ein Wechsel der Variablen vorgenommen wird (auf Abstände und Winkel), erhält man über diesen Weg eine uneindeutige Quantisierung. In diesem Buch werden wir zeigen, wie man mit Hilfe von allgemeinen Symmetrieüberlegungen anders verfahren kann.

Die zeitliche Entwicklung des Systems wird schließlich durch die Schrödinger-Gleichung gegeben:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{I.94})$$

Hier ist der Hamilton-Operator $H(t)$ die Observable, die man durch die Quantisierung der Hamilton-Funktion erhält. Die Lösung der Differentialgleichung (I.94) kann man in Operatorform aufschreiben

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (\text{I.95})$$

Hier ist $|\psi(t)\rangle$ der Zustand des Systems zum Zeitpunkt t , während $|\psi(t_0)\rangle$ seinen Anfangszustand (bei t_0) beschreibt. Man nennt $U(t, t_0)$ den „Zeitentwicklungsoperator“: Er erfüllt die Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0) \quad (\text{I.96a})$$

mit der Anfangsbedingung

$$U(t_0, t_0) = \mathbb{1} \quad (\text{I.96b})$$

Ist H zeitunabhängig, gilt

$$U(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) H \right] \quad (\text{I.97})$$

was man leicht durch Differenzieren überprüft. Weitere Eigenschaften von U werden in den einschlägigen Lehrbüchern diskutiert.

Unitäre und Hermite'sche Operatoren*

Die Zeitentwicklung $U(t, t_0)$ ist für alle t ein unitärer Operator. Ein Operator U ist *unitär*, wenn er auf dem Zustandsraum $\mathcal{H}$ eine lineare Abbildung ist, die für beliebige Kets $|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle$ das Skalarprodukt invariant lässt:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle U\varphi | U\psi \rangle = \langle U\varphi | U|\psi \rangle \quad (\text{I.97a})$$

Dies ist die Verallgemeinerung des Begriffs einer orthogonalen Transformation (Drehung) auf einen komplexen Vektorraum. Die Wirkung von U auf den Bra $\langle \varphi |$ in Gl. (I.97a) wird durch den *Hermite'sch konjugierten* Operator $U^\dagger$ beschrieben:

$$\langle U\varphi | = \langle \varphi | U^\dagger \quad (\text{I.97b})$$

Weil $|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle$ beliebig sind, folgt aus diesen beiden Beziehungen $U^\dagger U = \mathbb{1}$, somit gilt $U^{-1} = U^\dagger$ für einen unitären Operator.

Äquivalent zu Gl. (I.97b) ist als Definition des zu A Hermite'sch konjugierten Operators $A^\dagger$:

$$\langle \varphi | A^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | A | \varphi \rangle^* \quad (\text{I.97c})$$

für beliebige Kets $|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle$, weil das Skalarprodukt die Eigenschaft $\langle \chi | \psi \rangle = \langle \psi | \chi \rangle^*$ hat. Der Operator A ist *Hermite'sch* oder *selbstadjungiert*, wenn $\langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \varphi \rangle^*$ für alle $|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt und A und $A^\dagger$ auf demselben Vektorraum definiert sind. (Die letzte Bedingung ist nötig für unbeschränkte Operatoren auf unendlich-dimensionalen Vektorräumen.) Häufig werden wir die Rechenregeln

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad \text{und} \quad A^{\dagger\dagger} = A \quad (\text{I.97d})$$

verwenden. Erwartungswerte $\langle \psi | A | \psi \rangle$ von Hermite'schen Operatoren sind reell, deswegen spielen sie eine so wichtige Rolle in der Quantenmechanik.

Ein wichtiges Ergebnis der Operatortheorie ist, dass die Lösung $U(s)$ der Differentialgleichung

$$\frac{dU}{ds} = -iGU \quad \text{explizite, formale Form:} \quad U(s) = \exp(-isG) \quad (\text{I.97e})$$

genau dann unitär ist, wenn G Hermite'sch ist. In der Tat gilt $[U(s)]^\dagger = \exp(isG^\dagger) = \exp(isG) = [U(s)]^{-1}$. Vom Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ sind diese Beziehungen bereits geläufig, wir werden sie für Symmetrietransformationen wiederfinden.

C.2 Symmetrieoperationen

Sei $\mathcal{T}$ eine Transformation, die wir auf ein physikalisches System anwenden. Vor der Transformation werde das System durch den Zustand $|\psi\rangle$ beschrieben und nach ihrer Anwendung durch $|\psi'\rangle$. Man definiert einen Operator, den wir zur Unterscheidung $\hat{T}$ oder kurz T schreiben, der auf dem Zustandsraum $\mathcal{H}$ wirkt und $|\psi\rangle$ auf $|\psi'\rangle$ abbildet.

Das Schema aus Abb. 1 für Symmetrietransformationen nimmt in der Quantenmechanik die in Abb. 7 skizzierte Form an: Wendet man die Transformation $\mathcal{T}$ zum Zeitpunkt t an, so haben wir

$$|\psi'(t)\rangle = T(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{I.98})$$

In vielen Anwendungen wird $T(t)$ eine lineare unitäre Abbildung (Operator) sein. Es liegt eine Symmetrie vor, wenn für alle Paare von Zeitpunkten t_0 und t gilt

$$U(t, t_0) T(t_0) |\psi(t_0)\rangle = T(t) |\psi(t)\rangle = T(t) U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (\text{I.99})$$

und zwar für alle $|\psi(t_0)\rangle$. Es folgt die Gleichheit der Abbildungen

$$\boxed{U(t, t_0) T(t_0) = T(t) U(t, t_0)} \quad (\text{I.100})$$

Diese Bedingung kann man auch so formulieren:

$$[U(t, t_0)]^{-1} T(t) U(t, t_0) = T(t_0) \quad (\text{I.101})$$

Auf der linken Seite steht die Transformation, mit der man im sogenannten Heisenberg-Bild zeitabhängige Operatoren definiert. Diese Gleichung besagt, dass der Operator T im Heisenberg-Bild konstant ist, also eine Konstante der Bewegung (Erhaltungsgröße) ist.

Ist T zeitunabhängig, so wird aus Gl. (I.100):

$$[T, U(t, t_0)] = 0 \quad \text{für alle } t \quad (\text{I.102})$$

Eine Symmetrietransformation vertauscht also mit dem Zeitentwicklungsoperator zu jedem Zeitpunkt. Ist außerdem H zeitunabhängig, können wir Gl. (I.97) für U verwenden, so dass T und H vertauschen,

$$\boxed{[T, H] = 0} \quad (\text{I.103})$$

Diese Bedingung ist analog zum Verschwinden der Poisson-Klammer für eine Erhaltungsgröße in der klassischen Hamilton-Mechanik (s. §B.3.2).

Bemerkung

Zwei quantenmechanische Zustände sind physikalisch äquivalent, wenn sie sich nur um einen globalen Phasenfaktor unterscheiden. Es wird deswegen vorkommen, dass man Gl. (I.100) wie folgt verallgemeinern muss:

$$U(t, t_0) T(t_0) |\psi(t_0)\rangle = e^{i\alpha(t)} T(t) U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (\text{I.104a})$$

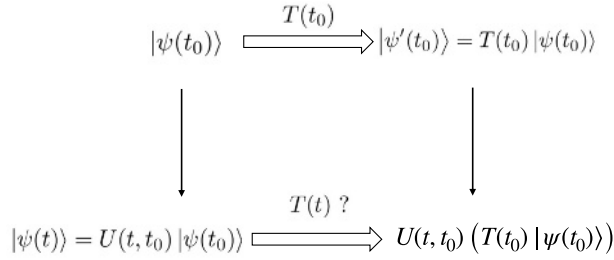


Abb. 7 Schema für Symmetrietransformationen eines quantenmechanischen Systems. Die Transformation $\mathcal{T}$ wird als Operator T dargestellt, der Zustände $|\psi\rangle$ aufeinander abbildet (horizontale Pfeile). Die senkrechten Pfeile deuten die Zeitentwicklung von t_0 bis t an, die der Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ vermittelt. Um zu überprüfen, ob eine Symmetrie vorliegt (durch das Fragezeichen angedeutet), muss der Operator $T(t)$ zu jedem Zeitpunkt einen zeit-entwickelten Zustand $|\psi(t)\rangle$ auf einen abbilden, der ebenfalls durch die Zeitentwicklung entsteht. Man gelangt in diesem Fall auf zwei Wegen von oben links nach unten rechts (kommutatives Diagramm).

für alle $|\psi(t_0)\rangle$. Dass die Phase $\alpha(t)$ nicht auch noch von dem Anfangszustand $|\psi(t_0)\rangle$ abhängt, kann man wie folgt sehen. Wir definieren

$$|\chi\rangle = T(t) U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (\text{I.104b})$$

und schreiben Gl. (I.104a) mit dem inversen Operator um:

$$U(t, t_0) T(t_0) [T(t) U(t_0, t)]^{-1} |\chi\rangle = e^{i\alpha(t)} |\chi\rangle \quad (\text{I.104c})$$

Der Operator auf der linken Seite bildet den Ket $|\chi\rangle$ bis auf einen Phasenfaktor auf sich selbst ab. Dies gilt für beliebige Zustände, weil Gl. (I.104a) für alle $|\psi(t_0)\rangle$ gefordert wird. Daraus folgt, dass der Operator proportional zur Identität sein muss.

Beweis

Sei D der Operator in Gl. (I.104c) links. Wir wenden ihn auf orthogonale Kets $|1\rangle$, $|2\rangle$ und eine Linearkombination an und erhalten:

$$D|1\rangle = m_1|1\rangle, \quad D|2\rangle = m_2|2\rangle, \quad D(|1\rangle + |2\rangle) = m'(|1\rangle + |2\rangle) = m_1|1\rangle + m_2|2\rangle$$

unter Ausnutzung der Linearität von D . Auf der rechten Seite dürfen wir die Koeffizienten vergleichen und finden: $m' = m_1$ und $m' = m_2$. Dieses Argument auf eine Basis des Hilbert-raums ausgedehnt, erhalten wir $D = m' \mathbb{1}$. $\square$

Damit wird aus Gl. (I.104c) die Operator-Beziehung

$$U(t, t_0) T(t_0) = e^{i\alpha(t)} T(t) U(t, t_0) \quad (\text{I.104d})$$

an der man abliest, dass $\alpha(t_0) = 0$ ist [s. Gl. (I.96b)]. Wir definieren nun

$$T'(t) = e^{i\alpha(t)} T(t) \quad (\text{I.105})$$

und erhalten einen Operator, für den Gl. (I.100) gilt. Auf diese Weise sind die Phasenfaktoren in Gl. (I.104a) eliminiert.

Wir haben in diesem Beispiel nur eine Symmetrietransformation betrachtet. Die Elimination von derartigen Phasenfaktoren für eine ganze Gruppe von Transformationen ist aufwendiger. Wir werden uns in diesem Buch wiederholt damit befassen, vor allem am Ende von Kapitel IV.

C.3 Allgemeine Folgerungen

Aus den Beziehungen (I.100), (I.102) oder (I.103), die für Symmetrietransformationen gelten, folgen Einschränkungen an die Operatoren H und U . Es stellt sich z. B. heraus, dass ein Term vom Typ $L \cdot R$ [mit dem Drehimpulsoperator L analog zu Gl. (I.77) definiert] im Hamilton-Operator „verboten“ ist, wenn die Raumspiegelung eine Symmetrietransformation ist (Erhaltungsgröße: Parität, Ergänzung D_V). Ähnlich verbietet die Symmetrie der Zeitumkehr eine Wechselwirkung $R \cdot P$ (Anhang A).

Wir haben bereits beobachtet, dass man aus Gl. (I.101) oder (I.103) auf die Existenz von Erhaltungsgrößen schließen kann. Wenn T mit H vertauscht, folgt z. B., dass die Erwartungswerte von T , T^2 , T^3 usw. zeitlich konstant sind. Alle Symmetrieeoperatoren T , die man finden kann, liefern Erhaltungsgrößen. Für konservative Systeme (d. h. H hängt nicht von der Zeit ab) vereinfacht dies die Suche nach *stationären Zuständen* (Eigenzuständen von H): Man konstruiert eine Basis von Kets, die sowohl Eigenvektoren von H als auch der T 's sind.

Wenn H und T vertauschen, verschwinden gewisse Matricelemente von H , etwa

$$\langle \vartheta_1 | H | \vartheta_2 \rangle = 0 \quad \text{falls } \vartheta_1 \neq \vartheta_2 \quad (\text{I.106})$$

Hier sind $|\vartheta_1\rangle$, $|\vartheta_2\rangle$ Eigenvektoren von T mit Eigenwerten ϑ_1 , ϑ_2 . Zum Beweis bilde man das Matricelement des Kommutators $HT - TH = 0$ zwischen $|\vartheta_1\rangle$ und $|\vartheta_2\rangle$ und teile durch $\vartheta_1 - \vartheta_2$. Man nennt eine Beziehung wie in Gl. (I.106) eine „Auswahlregel“: Aus ihr folgt nämlich, dass der Hamilton-Operator H keinen Übergang von $|\vartheta_1\rangle$ nach $|\vartheta_2\rangle$ vermitteln kann. Derartige Beziehungen gelten nicht nur für H , sondern für alle *invarianten Observablen*, d. h. die mit der durch T dargestellten Symmetrietransformation vertauschen.

Symmetrien erlauben es auch, Information über entartete Energieniveaus zu erhalten. Damit sind Eigenwerte gemeint, für die es mehr als einen Eigenzustand gibt. Betrachten wir etwa einen Ket $|\varphi\rangle$, Eigenzustand von H mit dem Eigenwert E . Wenn H und T vertauschen, so ist der Zustand

$$|\varphi'\rangle = T |\varphi\rangle \quad (\text{I.107})$$

ebenfalls ein Eigenzustand zu demselben Eigenwert. In der Tat finden wir (weil die reelle Zahl E mit dem Operator T vertauscht)

$$H |\varphi'\rangle = H T |\varphi\rangle = T H |\varphi\rangle = E T |\varphi\rangle = E |\varphi'\rangle \quad (\text{I.108})$$

Wenn die Zustände $|\varphi\rangle$ und $|\varphi'\rangle$ linear unabhängig sind, ist das Energieniveau E mindestens zweifach entartet.

Gibt es zwei Symmetrieoperatoren T_1 und T_2 , die mit H vertauschen, gilt dies auch für ihr Produkt. Sie bilden somit eine Gruppe (eine Symmetriegruppe). Im Allgemeinen werden diese Operatoren nicht untereinander vertauschen (nicht-Abelsche Gruppe, Kapitel II). Ihre Erzeugenden und deren Kommutatoren (Vertauschungsrelationen, Kapitel III) werden in der Folge eine zentrale Rolle spielen, weil die letzteren durch die mathematische Struktur der Gruppe von Symmetrietransformationen $\mathcal{T}$ festgelegt sind.

Ergänzung A_I

Statistische Mechanik im Phasenraum

Die klassische statistische Mechanik beschreibt ein physikalisches System als ein Ensemble im Phasenraum. Dafür gibt es zwei Darstellungen, die in dieser Ergänzung vorgestellt werden. Sie treten schon in der Strömungslehre (Hydrodynamik) auf, die in der Darstellung nach Euler oder nach Lagrange formuliert werden kann. Die erste beschreibt die Entwicklung der strömenden Flüssigkeit an einem festen Punkt im Raum (Euler): Es wird zum Beispiel die lokale Geschwindigkeit als Funktion der Zeit gesucht. Man erhält so aufeinander folgende „Schnappschüsse“ der räumlichen Verteilung der Flüssigkeit. Im Ansatz nach Lagrange folgt man im Lauf der Zeit einem Volumenelement der Flüssigkeit durch die Strömung. Man berechnet also die Bahnen (Trajektorien) dieser Elemente. Entlang dieser Bahnkurven werden Ableitungen definiert, die man als totale Ableitungen nach der Zeit im „mitbewegten System“ auffasst.

Diese Überlegungen werden wir auf einen größeren Raum erweitern, den wir bereits als „Phasenraum“ in Kapitel I, §B.3 eingeführt haben. Auf ihm beschreiben die Darstellungen von Euler und Lagrange die klassische Statistik eines Ensembles von physikalischen Systemen. Es wird klar werden, dass die beiden Beschreibungen analog zum Schrödinger- und Heisenberg-Bild der Quantenmechanik sind. Der Lagrange-Ansatz ist besser geeignet, um Mittelwerte zu zwei Zeiten (Korrelationsfunktionen) zu berechnen, wie es auch im Heisenberg-Bild der Fall ist.

In der Hamilton'schen Mechanik auf dem Phasenraum wird ein physikalisches System durch N verallgemeinerte Koordinaten q_i und N konjugierte Impulse p_i charakterisiert: Das Tupel $(q_i, p_i) \equiv (q_1 \dots q_N, p_1 \dots p_N)$ mit insgesamt $2N$ Komponenten beschreibt seinen kinematischen Zustand als einen Punkt im Phasenraum. Für ein einzelnes Teilchen (in drei Raumdimensionen) „lebt“ dieser Zustand in einem 6-dimensionalen Raum. Die kano-

nischen Gleichungen bestimmen die Bewegung dieses Punkts

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

wobei $H = H(q_i, p_i; t)$ die Hamilton-Funktion ist.

1 Euler-Darstellung

Betrachten wir ein Ensemble von Punkten im Phasenraum, die sich alle gemäß derselben Hamilton-Funktion bewegen. Man definiert für jeden Zeitpunkt t eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $\rho(q_i, p_i, t)$ auf dem Phasenraum und gibt sich ihren Anfangswert zu einem Zeitpunkt t_0 . Sie wird die Wahrscheinlichkeit

$$d\mathcal{P}(t) = \rho(q_i, p_i; t) d^N q d^N p \quad (2)$$

bestimmen, das System zur Zeit t in einem Volumenelement der Größe

$$d^N q d^N p = dq_1 \dots dq_N dp_1 \dots dp_N \equiv d\Gamma \quad (3)$$

in der Nähe des Punkts (q_i, p_i) zu finden. Die Verteilung ist normiert:

$$\int d\Gamma \rho(q_i, p_i; t) = 1 \quad (4)$$

Wir erinnern, dass die Zeitentwicklung deterministisch ist (die Hamilton-Funktion ist nicht zufällig). Die Statistik kommt mit der Verteilung der Koordinaten (q_i, p_i) zur Anfangszeit t_0 ins Spiel.

Im $2N$ -dimensionalen Phasenraum können wir ρ als die „Dichte“ einer Flüssigkeit auffassen. Dazu gehört eine Stromdichte, die ein $2N$ -dimensionaler Vektor $\mathbf{J}(q_i, p_i; t)$ mit den Komponenten

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \rho \dot{q}_i \\ \rho \dot{p}_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ -\rho \frac{\partial H}{\partial q_i} \end{pmatrix} \quad (5)$$

ist. Alle Funktionen sind bei $(q_i, p_i; t)$ auszuwerten. Die obere und untere Hälfte von $\mathbf{J}$ enthalten je N Koordinaten. Wir haben die Bewegungsgleichungen (1) verwendet.

Die Verteilung ρ entwickelt sich so, dass ihre zeitliche Änderung die Zahl der Punkte im Phasenraum angibt, die pro Zeiteinheit in ein Phasenraumvolumen eintreten oder es verlassen. Der Satz von Gauß drückt diesen Erhaltungssatz als eine $2N$ -dimensionale Divergenz aus (Kontinuitätsgleichung):

$$-\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{J} \quad (6)$$

Diese Divergenz wird mit Gl. (5) wie folgt ausgewertet

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{J} &= \sum_i \left[\frac{\partial}{\partial q_i} \left(\rho \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) - \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\rho \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \right] \\ &= \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial \rho}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \right) = -\{H, \rho\}\end{aligned}\quad (7)$$

Die gemischten Ableitungen $\partial^2 H / \partial q_i \partial p_i$ heben sich weg. Wir haben die in Gl. (I.66) eingeführte Poisson-Klammer und ihre Antisymmetrie verwendet. Aus der Kontinuitätsgleichung (6) wird somit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\} \quad (8)$$

Betrachten wir schließlich eine physikalische Größe A , die von den Koordinaten (q_i, p_i) und eventuell von der Zeit abhängt: $A = A(q_i, p_i; t)$. Hier kann es sich um die kinetische Energie aller Teilchen handeln, um ihre Wechselwirkungsenergie usw. Zur Zeit t ist der Mittelwert von A

$$\bar{A}(t) = \int d\Gamma \rho(q_i, p_i; t) A(q_i, p_i; t) \quad (9)$$

Mit Gleichung (8) ändert sich dieser Mittelwert wie folgt

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \int d\Gamma \left(\{H, \rho\} A + \rho \frac{\partial A}{\partial t} \right) \quad (10)$$

Wir nehmen die Lagrange-Darstellung ein wenig vorweg, um die totale Zeitableitung von ρ zu berechnen. Damit ist gemeint, dass man die Teilchen der Flüssigkeit entlang ihrer Trajektorien verfolgt („mitbewegtes System“) und zu jedem Zeitpunkt ihre „Dichte“ im Phasenraum misst. Diese Ableitung $d\rho/dt$ wird mit aufrechten Differentialen notiert und ist eine Kombination aus Ableitungen nach der Zeit und den Phasenraumkoordinaten [s. Gl. (I.69)]

$$\begin{aligned}\frac{d\rho}{dt} &= \sum_i \left[\dot{q}_i \frac{\partial \rho}{\partial q_i} + \dot{p}_i \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \right] + \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ &= \sum_i \left[\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial \rho}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \right] + \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\{H, \rho\} + \frac{\partial \rho}{\partial t}\end{aligned}\quad (11)$$

Es folgt mit Gl. (8):

$$\frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (12)$$

Dies ist der Satz von Liouville: Die Elemente der „Phasenraum-Flüssigkeit“ strömen derart, dass sich ihre Dichte entlang der Bahnen durch den Phasenraum nicht ändert. (Dabei ist es durchaus möglich, dass sich die Dichte, an einer festen Koordinate betrachtet, als Funktion der Zeit ändert.) Verfolgen wir eine feste Zahl von Teilchen, nehmen sie ein Volumen im Phasenraum ein, das konstant bleibt.

2 Lagrange-Darstellung

In der Euler-Darstellung werden Mittelwerte bezüglich einer Wahrscheinlichkeitsverteilung berechnet, die sich im Lauf der Zeit t ändert. Es gibt allerdings Fragestellungen, zum Beispiel zeitliche Korrelationen, für die es bequemer ist, Mittelwerte bezüglich einer einzigen Verteilung zu berechnen. Man kann dafür die Verteilung der Zustände des Systems zu einem festen Zeitpunkt nehmen, etwa zum Anfang bei $t = t_0$. Die Lagrange-Darstellung stellt sich auf diesen Standpunkt und führt eine zeitunabhängige Verteilung ρ^L auf dem Phasenraum ein. Sie ist durch

$$\rho^L(q_i^0, p_i^0) = \rho(q_i = q_i^0, p_i = p_i^0; t = t_0) \quad (13)$$

gegeben, wobei ρ die Verteilungsfunktion aus §1 ist.

Ähnlich geht man in der Quantenmechanik im Heisenberg-Bild vor, in dem der Zustandsvektor $|\psi\rangle$ konstant ist und der Hamilton-Operator die Zeitabhängigkeit der Observablen $A(t)$ erzeugt. Hier in der klassischen Statistik führen wir auch Funktionen $A^L(t; q_i^0, p_i^0)$ ein, die über die Hamilton-Funktion zeitabhängig werden. Zum Anfangszeitpunkt $t = t_0$ haben diese Funktionen dieselben Werte $A(t_0; q_i^0, p_i^0)$ wie in der Euler-Darstellung. Für $t > t_0$ sind sie so definiert, dass der Mittelwert $\bar{A}(t)$ aus den Beiträgen derjenigen Punkte im Phasenraum zusammengesetzt wird, die sich zum Zeitpunkt t_0 an den Koordinaten (q_i^0, p_i^0) befunden haben. In Formeln ausgedrückt: seien

$$\begin{pmatrix} q_j(t; q_i^0, p_i^0) \\ p_j(t; q_i^0, p_i^0) \end{pmatrix} \quad (14)$$

die Lösungen der Bewegungsgleichungen (1) im Phasenraum mit den Anfangswerten $q_j(t_0) = q_j^0, p_j(t_0) = p_j^0$. Dann wird die Funktion $A^L(t; q_i^0, p_i^0)$ durch

$$A^L(t; q_i^0, p_i^0) = A(q_j(t; q_i^0, p_i^0), p_j(t; q_i^0, p_i^0); t) \quad (15)$$

definiert. Wir führen das Volumenelement $d\Gamma^0 = d^N q^0 d^N p^0$ der Anfangskoordinaten ein. Das Mittel dieser Observablen beträgt dann

$$\bar{A}(t) = \int d\Gamma^0 \rho^L(q_i^0, p_i^0) A^L(t; q_i^0, p_i^0) \quad (16)$$

wobei ρ^L zeitunabhängig ist.

Es sind die Phasenraumfunktionen $A^L(t; q_i^0, p_i^0)$, die in der Lagrange-Formulierung die Zeitabhängigkeit von $\bar{A}(t)$ tragen. Gemäß Gl. (15), der Kettenregel und den Hamilton'schen Gleichungen (1) gilt die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} A^L(t; q_i^0, p_i^0) &= \sum_j \left[\frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right] + \frac{\partial A}{\partial t} \\ &= \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} \end{aligned} \quad (17)$$

Wir erinnern, dass auf der rechten Seite eine Funktion von (q_i^0, p_i^0) entsteht, weil die Phasenraumkoordinaten (q_j, p_j) gemäß Gl. (14) von den Anfangswerten abhängen.

Eine zeitliche Korrelationsfunktion, auch „zwei-Zeit-Mittelwert“ genannt, kann in ähnlicher Weise berechnet werden, indem das Produkt $A^L(t; q_i^0, p_i^0) B^L(t'; q_i^0, p_i^0)$ über die Verteilung der Anfangsbedingungen gemittelt wird:

$$\overline{A(t)B(t')} = \int d\Gamma^0 \rho^L(q_i^0, p_i^0) A^L(t; q_i^0, p_i^0) B^L(t'; q_i^0, p_i^0) \quad (18)$$

Bemerkung Die Gleichung (17) ist eine „gemischte Darstellung“, weil sie die Ableitung der Funktion A^L durch eine Poisson-Klammer mit der Größe A aus der Euler-Darstellung angibt. Man kann die Lagrange-Darstellung auch vollständig in den Variablen (q_i^0, p_i^0) formulieren und eine entsprechende Poisson-Klammer definieren:

$$\{A^L(t), B^L(t)\}_L = \sum_i \left[\frac{\partial A^L}{\partial q_i^0} \frac{\partial B^L}{\partial p_i^0} - \frac{\partial A^L}{\partial p_i^0} \frac{\partial B^L}{\partial q_i^0} \right] \quad (19)$$

Die Beziehung (17) nimmt folgende Form an

$$\frac{\partial}{\partial t} A^L(t; q_i^0, p_i^0) = \{A^L(t), H^L(t)\}_L + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (20a)$$

Ist insbesondere A (in der Euler-Darstellung) nicht explizit von der Zeit abhängig, so haben wir

$$\frac{\partial A^L}{\partial t} = \{A^L(t), H^L(t)\}_L \quad (20b)$$

Beweis

Wir müssen nachweisen, dass die Poisson-Klammern in Gl. (17) und (20a) gleich sind. Wir beginnen mit den Phasenraumkoordinaten und zeigen zunächst, dass ihre Poisson-Klammern im Lagrange-Bild konstant sind

$$\{q_i(t), q_j(t)\}_L = 0 \quad \{p_i(t), p_j(t)\}_L = 0 \quad \{q_i(t), p_j(t)\}_L = \delta_{ij} \quad (21)$$

Für $t = t_0$ ist dies klar, weil die Poisson-Klammern im Euler- und Lagrange-Bild zusammen fallen. Zu einem anderen Zeitpunkt t ist zu berücksichtigen, dass etwa $q_i(t)$ von den Anfangswerten (q_k^0, p_k^0) aller anderen Koordinaten (oder Teilchen) abhängt. Gehen wir von t einen infinitesimalen Zeitschritt dt weiter, dann ändern sich die Koordinaten gemäß den Hamilton'schen Gleichungen

$$dq_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} dt \quad dp_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} dt \quad (22)$$

In den Poisson-Klammern der Lagrange-Darstellung benötigen wir die Ableitung nach den Anfangswerten. Die Kettenregel liefert z. B.

$$\frac{\partial}{\partial q_k^0} dq_i = \sum_l \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p_l \partial q_l} \frac{\partial q_l}{\partial q_k^0} + \frac{\partial^2 H}{\partial p_l \partial p_l} \frac{\partial p_l}{\partial q_k^0} \right) dt \quad (23)$$

Damit kann die Änderung der Poisson-Klammer $\{q_i(t), p_j(t)\}_L$ in erster Ordnung in dt wie folgt sortiert werden:

$$\begin{aligned} \{dq_i, p_j\}_L + \{q_i, dp_j\}_L = \\ \sum_{kl} \left[\left(\frac{\partial^2 H}{\partial p_l \partial q_l} \frac{\partial q_l}{\partial q_k^0} + \frac{\partial^2 H}{\partial p_l \partial p_l} \frac{\partial p_l}{\partial q_k^0} \right) \frac{\partial p_j}{\partial p_k^0} - \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p_l \partial q_l} \frac{\partial q_l}{\partial p_k^0} + \frac{\partial^2 H}{\partial p_l \partial p_l} \frac{\partial p_l}{\partial p_k^0} \right) \frac{\partial p_j}{\partial q_k^0} \right. \\ \left. + \frac{\partial q_i}{\partial q_k^0} \left(-\frac{\partial^2 H}{\partial q_j \partial q_l} \frac{\partial q_l}{\partial p_k^0} - \frac{\partial^2 H}{\partial q_j \partial p_l} \frac{\partial p_l}{\partial p_k^0} \right) - \frac{\partial q_i}{\partial p_k^0} \left(-\frac{\partial^2 H}{\partial q_j \partial q_l} \frac{\partial q_l}{\partial q_k^0} - \frac{\partial^2 H}{\partial q_j \partial p_l} \frac{\partial p_l}{\partial q_k^0} \right) \right] dt \end{aligned} \quad (24)$$

Hier erkennt man die Lagrange-Poisson-Klammern zwischen den Koordinaten wieder

$$\begin{aligned} \{dq_i, p_j\}_L + \{q_i, dp_j\}_L \\ = \sum_l \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p_l \partial q_l} \{q_i, p_j\}_L + \frac{\partial^2 H}{\partial p_l \partial p_l} \{p_l, p_j\}_L - \{q_i, q_l\}_L \frac{\partial^2 H}{\partial q_j \partial q_l} - \{q_i, p_l\}_L \frac{\partial^2 H}{\partial q_j \partial p_l} \right) dt \\ = \left(-\frac{\partial^2 H}{\partial p_l \partial q_j} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_j \partial p_l} \right) dt = 0 \end{aligned} \quad (25)$$

Die Umformung zur letzten Zeile nimmt an, dass die Koordinaten zum Zeitpunkt t die Poisson-Klammern (21) erfüllen. Es ergibt sich Null, weil die zweiten Ableitungen von H symmetrisch sind. Setzen wir dieses Argument über viele Zeitschritte fort, dürfen wir schließen, dass die Poisson-Klammern zwischen den Phasenraumkoordinaten zu jedem Zeitpunkt durch Gl. (21) gegeben sind, also konstant sind. In der Tat liefert eine analoge Rechnung, dass die Änderungen der anderen Poisson-Klammern in Gl. (21) auch verschwinden.

Mit dieser Information über die Koordinaten berechnen wir die Poisson-Klammer $\{A^L(t), B^L(t)\}_L$ aus Gl. (19) in ganz ähnlicher Weise. Verwende die Definition der Lagrange-Variable $A^L(t)$ sowie die Kettenregel und erhalte

$$\begin{aligned} \{A^L(t), B^L(t)\}_L = \sum_{ijn} \left[\left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial q_n^0} + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial q_n^0} \right) \left(\frac{\partial B}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial p_n^0} + \frac{\partial B}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial p_n^0} \right) \right. \\ \left. - \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial p_n^0} + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial p_n^0} \right) \left(\frac{\partial B}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial q_n^0} + \frac{\partial B}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial q_n^0} \right) \right] \\ = \sum_{ij} \left[\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial q_j} \{q_i(t), q_j(t)\}_L + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_j} \{p_i(t), q_j(t)\}_L \right. \\ \left. + \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_j} \{q_i(t), p_j(t)\}_L + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial p_j} \{p_i(t), p_j(t)\}_L \right] \end{aligned} \quad (26)$$

wobei wir wieder die Terme so gruppiert haben, dass die Poisson-Klammern der Phasenraumkoordinaten dastehen. Gemäß Gl. (21) ist dies nichts anderes als

$$\{A^L(t), B^L(t)\}_L = \sum_{ij} \left[\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right] = \{A, B\} \quad (27)$$

was zu zeigen war. $\square$

Beispiel Betrachten wir kurz ein Teilchen der Masse m , das in einer Dimension einer Beschleunigung $g(t)$ unterworfen wird.

■ Im Euler-Bild sind Hamilton-Funktion und Bewegungsgleichungen:

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} - mg(t)x$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \quad \frac{dp}{dt} = mg(t)$$

Die Bahnkurve im Phasenraum ist

$$p(t) = p_0 + m \int_0^t dt' g(t') \quad x(t) = x_0 + \frac{p_0}{m}t + m \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' g(t'')$$

■ Für das Lagrange-Bild setzen wir die Euler-Lösung in die Hamilton-Funktion ein:

$$\begin{aligned} H^L(x_0, p_0; t) &= \frac{1}{2m} \left(p_0 + m \int_0^t dt' g(t') \right)^2 \\ &\quad - mg(t) \left(x_0 + \frac{p_0}{m}t + m \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' g(t'') \right) \\ &= \frac{p_0^2}{2m} - mg(t)x_0 + p_0 \left(\int_0^t dt' g(t') - t g(t) \right) + F(t) \\ \text{mit } F(t) &= \frac{m}{2} \left(\int_0^t dt' g(t') \right)^2 - m \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' g(t) g(t'') \end{aligned}$$

Impuls und Ort des Teilchens werden diesmal als Funktionen der Anfangswerte aufgefasst:

$$p^L(t; p_0) = p_0 + m \int_0^t dt' g(t')$$

$$x^L(t; x_0, p_0) = x_0 + \frac{p_0}{m}t + m \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' g(t'')$$

Man überprüft schnell, dass $\{x^L(t), p^L(t)\}_L = 1$ gilt. Die anderen Poisson-Klammern sind

$$\{x^L(t), H^L(t)\}_L = \frac{p_0}{m} + \int_0^t dt' g(t') - t g(t) - \frac{t}{m}(-mg(t)) = \frac{p(t)}{m} = \frac{\partial H(t)}{\partial p}$$

$$\{p^L(t), H^L(t)\}_L = mg(t) = -\frac{\partial H(t)}{\partial x}$$

in Übereinstimmung mit der allgemeinen Identität (27).

Ergänzung B_I

Satz von Noether in der Feldtheorie

Dem Satz von Noether sind wir in Kapitel I, §B.2.2 begegnet, und zwar für physikalische Systeme mit diskreten Freiheitsgraden, beschrieben durch die verallgemeinerten Koordinaten q_i ($i = 1, \dots, N$). Der Satz erweist seine volle Tragweite allerdings erst für Felder, also Systeme mit unendlich vielen Freiheitsgraden, und zwar gleichermaßen vom klassischen und quantisierten Standpunkt aus. Ein Feld breitet sich kontinuierlich im Raum aus, so dass die Koordinaten $q_i(t)$ durch Felder $\phi_j(\mathbf{r}, t)$ zu ersetzen sind. An jeder Position befindet sich eine dynamische Variable und man kann $\mathbf{r}$ als einen „kontinuierlichen Index“ auffassen. Der Index j in ϕ_j unterscheidet Komponenten des Felds und bleibt diskret: Für ein Vektorfeld wäre etwa $j = x, y, z$.

1 Euler-Lagrange-Formalismus für Felder

Die Lagrange-Funktion L eines Felds setzt sich aus allen seinen Freiheitsgraden an den Ortskoordinaten $\mathbf{r}$ zusammen und wird als ein Volumen-Integral geschrieben

$$L = \int d^3r \mathcal{L} \quad (1)$$

Hier nennt man $\mathcal{L}$ die „Lagrange-Dichte“: Sie ist eine Funktion der Feldkomponenten $\phi_j(\mathbf{r})$ und ihrer Ableitungen nach Zeit und Ort

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\phi_j(\mathbf{r}, t), \partial_t \phi_j(\mathbf{r}, t), \partial_i \phi_j(\mathbf{r}, t); \mathbf{r}, t) \quad (2)$$

Wir verwenden eine kompakte Notation für die Ableitungen der Feldkomponenten ϕ_j gemäß

$$\partial_t \phi_j(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \phi_j}{\partial t} \quad \partial_i \phi_j(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \phi_j}{\partial r_i} \quad (3)$$

mit $i = x, y, z$. Die Lagrange-Dichte $\mathcal{L}$ in Gl. (2) hängt von allen diesen Feldvariablen ab und möglicherweise noch explizit von den Orts- und Zeitkoordinaten $\mathbf{r}, t$. Dies beschreibt etwa ein äußeres Potential oder eine von außen einwirkende Störung.

Betrachten wir nun eine „Geschichte“ Γ des Felds: Damit ist eine Funktion $\phi_j(\mathbf{r}, t)$ gemeint, die für $t = t_a$ und t_b vorgegebenen Feldverteilungen entspricht. Zu dieser Geschichte oder kurz „Weg“ gehört eine Wirkung $S[\Gamma]$:

$$S[\Gamma] = \int_{t_a}^{t_b} dt \int d^3r \mathcal{L}(\phi_j(\mathbf{r}, t), \partial_t \phi_j(\mathbf{r}, t), \partial_i \phi_j(\mathbf{r}, t); \mathbf{r}, t) \quad (4)$$

Die ist offenbar die Verallgemeinerung der Wirkung (I.19) aus der Lagrange-Mechanik. Für die Konvergenz der räumlichen Integration nehmen wir an, dass die Felder im Unendlichen genügend schnell verschwinden.

Das Prinzip der kleinsten Wirkung besagt nun, dass unter den unendlich vielen Wegen, die die Feldverteilungen am Anfangs- und Endzeitpunkt (t_a und t_b) verbinden, derjenige physikalisch realisiert wird, der die Wirkung $S[\Gamma]$ extremal macht. Um diesen Weg zu finden, berechnen wir die Variation δS der Wirkung, wenn man die Feldverteilung infinitesimal um $\delta\phi_j(\mathbf{r}, t)$ verrückt. Dazu gehören auch Änderungen der Ableitungen, also $\delta(\partial_t \phi_j(\mathbf{r}, t))$ und $\delta(\partial_i \phi_j(\mathbf{r}, t))$, und wir finden

$$\begin{aligned} \delta S = \int_{t_a}^{t_b} dt \int d^3r \sum_j \left[\delta\phi_j(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_j} + \delta(\partial_t \phi_j(\mathbf{r}, t)) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \phi_j)} \right. \\ \left. + \sum_i \delta(\partial_i \phi_j(\mathbf{r}, t)) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \phi_j)} \right] \end{aligned} \quad (5)$$

Nun gilt

$$\begin{aligned} \delta(\partial_t \phi_j(\mathbf{r}, t)) &= \frac{\partial}{\partial t} (\delta\phi_j(\mathbf{r}, t)) \\ \delta(\partial_i \phi_j(\mathbf{r}, t)) &= \frac{\partial}{\partial r_i} (\delta\phi_j(\mathbf{r}, t)) \end{aligned} \quad (6)$$

und über eine partielle Integration können wir die Ableitungen auf die anderen Terme „abwälzen“. Die Randterme verschwinden, weil die Variation $\delta\phi_j$ die festen Randbedingungen bei t_a, t_b beachten muss und weil die Felder für $\mathbf{r} \rightarrow \infty$ nach Null gehen. Wir erhalten auf diese Weise einen Integranden, in dem nur die Variation $\delta\phi_j(\mathbf{r}, t)$ selbst übrig bleibt. Die Wirkungsvariation hat die Form

$$\delta S = \int_{t_a}^{t_b} dt \int d^3r \sum_j \delta\phi_j(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_j} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \phi_j)} - \sum_i \frac{\partial}{\partial r_i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \phi_j)} \right] \quad (7)$$

Die Wirkung ist extremal, wenn ihre Variation (in erster Ordnung) Null ist: $\delta S = 0$. Wenn dies für beliebige räumliche und zeitliche Verrückungen $\delta\phi_j(\mathbf{r}, t)$ erfüllt sein soll, muss der Integrand in Gl. (7) an jedem Punkt und für jeden Index j verschwinden. Wir erhalten die

Euler-Lagrange-Gleichungen für alle Feldkomponenten:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_j} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \phi_j)} - \sum_i \frac{\partial}{\partial r_i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \phi_j)} = 0 \quad (8)$$

Der letzte Term tritt bei diskreten Freiheitsgraden nicht auf [s. Gl. (I.17)]; er ist typisch für Felder im kontinuierlichen Raum, deren räumliche Ableitungen $\partial_i \phi_j$ ebenfalls in die Lagrange-Funktion eingehen.

Um die Ableitungen nach t oder r_i in Gl. (8) zu berechnen, drückt man etwa $\partial \mathcal{L} / \partial (\partial_i \phi_j)$ durch das Feld und seine Ableitungen auf einem gegebenen Weg aus und berücksichtigt in diesem Ausdruck alle Ableitungen nach der Zeit.

In der relativistischen Physik wird man die Zeit- und Raumkoordinaten in einen Vierervektor $(ct, \mathbf{r})$ mit den Komponenten x^μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) zusammenfassen (c ist die Lichtgeschwindigkeit). Die Gleichung (8) nimmt die kompaktere Form an:

$$\sum_\mu \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_j)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_j} \quad (9)$$

mit Ableitungen $\partial_\mu = \partial / \partial x^\mu$, explizit: $\partial_0 = \partial / (c \partial t)$, $\partial_k = \partial / \partial r_k$ ($k = 1, 2, 3$, die Vorzeichen beachten). Häufig verwenden wir im Folgenden die Summationskonvention: über doppelt auftretende Indizes (hier μ) wird summiert und das Summenzeichen weggelassen.

Bemerkung

Die Wirkung (4) ändert sich nicht, wenn man zur Lagrange-Dichte eine totale Zeitableitung einer beliebigen Funktion der Felder hinzufügt, weil nach Ausführung des Zeitintegrals nur Beiträge von den Anfangs- und Endkonfigurationen der Felder übrig bleiben. Ähnliches gilt für das Addieren von räumlichen Gradienten in Form einer Divergenz, solange es keine Beiträge vom Rand des Integrationsvolumens gibt.

Betrachten wir als Beispiel ein Feld mit einer Komponente ϕ und der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} [\dot{\phi}^2 - c^2 (\nabla \phi)^2 - \omega^2 \phi^2] = \frac{1}{2} [c^2 (\partial^\mu \phi) (\partial_\mu \phi) - \omega^2 \phi^2] \quad (10)$$

mit Konstanten c und ω . Die benötigten Ableitungen betragen

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = -\omega^2 \phi \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = \dot{\phi} \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_k \phi)} = -c^2 \partial_k \phi \quad (11)$$

Die Bewegungsgleichung gemäß Gl. (8) lautet

$$0 = (\omega^2 + \partial_t^2 - c^2 \nabla^2) \phi = (\omega^2 + c^2 \partial^\mu \partial_\mu) \phi \quad (12)$$

wobei wir c mit der Lichtgeschwindigkeit identifizieren und $(\partial^\mu) = (c^{-1} \partial_t, -\nabla)$. Dieses Beispiel diskutieren wir genauer in Ergänzung C_{VI}, §3: Es handelt sich bei Gl. (12) um die sogenannte „Klein-Gordon-Gleichung“.

2 Symmetrietransformation und erhaltener Strom

Betrachten wir nun folgende Variation der Feldkomponenten ϕ_j :

$$\delta\phi_j(\mathbf{r}, t) = \delta\epsilon f_j(\phi_l(\mathbf{r}, t), \dot{\phi}_l(\mathbf{r}, t), \partial_m\phi_l(\mathbf{r}, t); t) \quad (13a)$$

wobei die Funktion f_j von allen aufgeschriebenen Variablen und Indizes l, m abhängen kann und $\delta\epsilon$ wie in Gl. (I.30a) ein infinitesimaler Parameter ist. Für die Ableitungen des Felds ergeben sich als Variationen

$$\begin{aligned} \delta\dot{\phi}_j(\mathbf{r}, t) &= \delta\epsilon \dot{f}_j(\phi_l(\mathbf{r}, t), \dot{\phi}_l(\mathbf{r}, t), \partial_m\phi_l(\mathbf{r}, t); t) \\ \delta[\partial_k\phi_j(\mathbf{r}, t)] &= \delta\epsilon \partial_k f_j(\phi_l(\mathbf{r}, t), \dot{\phi}_l(\mathbf{r}, t), \partial_m\phi_l(\mathbf{r}, t); t) \end{aligned} \quad (13b)$$

mit Ableitungen von f , die wie in Gl. (I.32) zu berechnen sind. Die Variation der Lagrange-Dichte beträgt somit

$$\delta\mathcal{L} = \delta\epsilon \sum_j \left[f_j \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_j} + \dot{f}_j \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_j} + \sum_k (\partial_k f_j) \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_k\phi_j)} \right] \quad (13c)$$

Wir nehmen nun wie in Gl. (I.34) an, dass diese Variation als die totale Zeitableitung einer Funktion Λ geschrieben werden kann:

$$\delta\mathcal{L} = \delta\epsilon \frac{d}{dt} \Lambda(\phi_l(\mathbf{r}, t), \dot{\phi}_l(\mathbf{r}, t), \partial_m\phi_l(\mathbf{r}, t); t) \quad (14)$$

was für das Prinzip der kleinsten Wirkung keine Änderung bedeutet. (Damit liegt eine infinitesimale Symmetrietransformation vor.) Berechnen wir die Zeitableitung der Funktion $\sum_j f_j \partial\mathcal{L}/\partial\dot{\phi}_j$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[\sum_j f_j \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_j} \right] &= \sum_j \left[\dot{f}_j \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_j} + f_j \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_j} \right) \right] \\ &= \sum_j \left[\dot{f}_j \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_j} + f_j \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_j} - \sum_k \partial_k \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_k\dot{\phi}_j)} \right) \right] \\ &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\epsilon} - \sum_{j,k} \partial_k \left(f_j \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_k\dot{\phi}_j)} \right) = \frac{d}{dt} \Lambda - \sum_{j,k} \partial_k \left(f_j \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_k\dot{\phi}_j)} \right) \end{aligned} \quad (15)$$

unter Verwendung der Euler-Lagrange-Gleichung (8) in der zweiten Zeile. Die Zeitableitungen zusammengefasst, erhalten wir schließlich

$$\frac{d}{dt} \left[\sum_j f_j \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_j} - \Lambda \right] + \sum_{j,k} \partial_k \left(f_j \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_k\dot{\phi}_j)} \right) = 0 \quad (16)$$

Dies ist eine Kontinuitätsgleichung, lokal formuliert für eine gewisse Dichte $\rho(\mathbf{r}, t)$ und eine dazugehörige vektorielle Stromdichte $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$, nämlich:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_j f_j \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_j} - \Lambda \quad \text{und} \quad \mathbf{J}_k(\mathbf{r}, t) = \sum_j f_j \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_k\dot{\phi}_j)} \quad (17)$$

Hat man einmal $\rho(\mathbf{r}, t)$ als Funktion von Raum- und Zeitkoordinaten ausgedrückt, schreibt man den Erhaltungssatz (16) in der Form

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (18)$$

die man von der lokalen Erhaltung der elektrischen Ladung kennt. Er gibt an, wie die Dichte ρ in einem Volumen in dem Maße zunimmt, wie der Strom $\mathbf{J}$ durch die Oberfläche in das Volumen hineinfließt. Für Systeme mit diskreten Koordinaten aus Kapitel I lieferte das Noether-Theorem für eine gegebene Transformation nur eine Erhaltungsgröße. Hier in der Feldtheorie ergeben sich unendlich viele Relationen, so viele wie es Punkte $\mathbf{r}$ im Raum gibt.

3 Verallgemeinerte Formulierung in der Raumzeit

Während die Hypothese (14) die Zeitkoordinate bevorzugt hat, können wir sie auf eine Form verallgemeinern, die Zeit und Raum symmetrischer behandelt: Wir machen für die Variation der Lagrange-Dichte folgenden Ansatz:

$$\delta\mathcal{L} = \delta\epsilon \left(\frac{d}{dt}\Lambda + \nabla \cdot \mathbf{\Lambda} \right) = \delta\epsilon \partial_\mu \Lambda^\mu \quad (19)$$

Hier steht ein Vektorfeld $\mathbf{\Lambda}$, das wie Λ in Gl. (14) von den Feldkomponenten und ihren Ableitungen abhängt. Wir fassen es in einen Vierervektor $(c\Lambda, \mathbf{\Lambda})$ mit den Komponenten Λ^μ ($\mu = 0, \dots, 3$) zusammen. Wenn $\mathbf{\Lambda}$ am Rand des Integrationsvolumens in Gl. (1) verschwindet, sind die Lagrange-Dichten $\mathcal{L}$ und $\mathcal{L} + \delta\mathcal{L}$ wieder gleichwertig (Symmetrietransformation). Die Überlegungen aus §2 können wir fast unverändert übernehmen, das Vektorfeld korrigiert lediglich den Ausdruck für die Stromdichte

$$J_k(\mathbf{r}, t) = \sum_j f_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_k \phi_j)} - \Lambda_k, \quad k = 1, 2, 3 \quad (20)$$

Dies ist die allgemeine Form des Satzes von Noether für Lagrange-Dichten, die auch von räumlichen Ableitungen abhängen. Eine in Raum- und Zeitkoordinaten symmetrische Formulierung des Erhaltungssatzes (18) erhalten wir mit dem „Viererstrom“ $(J^\mu) = (c\rho, \mathbf{J})$:

$$\partial_\mu J^\mu = 0 \quad (21)$$

Der Satz von Noether hat zahlreiche Anwendungen für Felder, insbesondere in der Quantenfeldtheorie, wo den von Symmetrien erzeugten Erhaltungsgrößen und ihren Strömen eine zentrale Rolle zukommt. Die Leserin verweisen wir dazu auf Peskin und Schroeder (2018) und Zinn-Justin (2021). Hier wollen wir als einfaches Beispiel die Energieerhaltung diskutieren.

4 Lokale Energieerhaltung

Wenn die Lagrange-Dichte nicht explizit von der Zeit t abhängt, erzeugen wir eine Symmetrietransformation, indem wir das Feld $\phi(\mathbf{r}, t)$ um einen infinitesimalen Schritt $\delta\epsilon$ in der

Zeit verschieben. Der Einfachheit halber betrachten wir ein skalares Feld und lassen den Index j weg. Wir haben dann $\delta\phi = \delta\epsilon \dot{\phi}$ und somit $f = \dot{\phi}$ in Gl. (13a). Unter dieser Variation ändert sich $\mathcal{L}$ über seine Abhängigkeit vom Feld und dessen Ableitungen. Und weil $\mathcal{L}$ nicht explizit von der Zeit abhängt, haben wir einfach $\delta\mathcal{L} = \delta\epsilon d\mathcal{L}/dt$. Wir lesen $\Lambda = \mathcal{L}$ und $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{0}$ ab, so dass erhaltene Dichte und Stromdichte durch

$$\rho_E = \dot{\phi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} - \mathcal{L} \quad \text{und} \quad J_{E,k} = \dot{\phi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_k \phi)} \quad (22)$$

gegeben werden. Sie werden als Energiedichte und Energiestromdichte des Felds interpretiert. Das Raumintegral über ρ_E (die Gesamtenergie der Feldverteilung) spielt die Rolle der Hamilton-Funktion in der Feldtheorie, ρ_E selbst ist also eine „Hamilton-Dichte“.

Für das skalare Feld $\phi(\mathbf{r}, t)$ mit der Lagrange-Dichte (10) finden wir aus Gl. (22) als eine lokal erhaltene Größe die Energiedichte

$$\rho_E = \frac{1}{2} [\dot{\phi}^2 + \omega^2 \phi^2 + c^2 (\nabla \phi)^2] \quad \text{mit} \quad \mathbf{J}_E = -c^2 \dot{\phi} \nabla \phi \quad (23)$$

Sie erhält im ersten Term $\dot{\phi}^2$ die kinetische Energie des Felds, dann folgen als potentielle Energien die Terme mit ϕ^2 und $(\nabla \phi)^2$. Die Energiestromdichte kombiniert die zeitliche mit einer räumlichen Ableitung von ϕ .

In der Elektrodynamik im leeren Raum bestehen die Felder $\mathbf{E}$ und $\mathbf{B}$ aus insgesamt sechs Komponenten, die man relativistisch geschrieben in einen antisymmetrischen Tensor $F_{\mu\nu}$ zusammenfasst und durch ein Vierervektor-Potential ausdrückt: $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$. Die Lagrange-Dichte $\mathcal{L}(A_\mu, \partial_\nu A_\mu)$ ist proportional zu der relativistischen Invariante $F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$, explizit zu $\epsilon_0 \mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2/\mu_0$, während Energiedichte und Energiestrom proportional zu $\epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2/\mu_0$ und zum Poynting-Vektor $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ sind.

Übung Betrachten Sie eine Lagrange-Dichte, die nicht explizit von der Ortskoordinate $\mathbf{r}$ abhängt, sondern nur indirekt über ein skalares Feld ϕ und seine Ableitungen. Zeigen Sie, dass es drei lokal erhaltene Größen gibt, deren Dichten und Stromdichten durch

$$\rho_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \partial_x \phi \quad \text{und} \quad J_{xk} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_k \phi)} \partial_x \phi - \delta_{kx} \mathcal{L} \quad (24)$$

gegeben sind. (Für die anderen zwei Größen ersetze x durch y , z .) Physikalisch beschreiben sie die drei Komponenten des Feldimpulses. Die Komponenten J_{ik} der Stromdichten bilden einen 3×3 -Tensor, den man den „Spannungstensor“ nennt.