

Quantisierung mit der kanonischen Gruppe

Diplomarbeit im Fachbereich Physik – **Christian Hundt**

April 2010

Institut für Physik

Staudingerweg 7, 55128 Mainz, Germany
Johannes-Gutenberg-Universität Mainz



JOHANNES GUTENBERG
UNIVERSITÄT MAINZ

*Für meine hochgeschätzten Eltern Andrea und Günter
sowie meine geliebte Schwester Stefanie.*

Inhaltsverzeichnis

1	Quantenmechanik als etablierte Theorie	1
1.1	Ein kurzer historischer Abriss	2
1.2	Die übliche Konstruktion der Quantenmechanik	3
1.3	Probleme der gebräuchlichen Formulierung	5
1.3.1	Das Lebesgueintegral und Nullmengen	5
1.3.2	Die Rolle der Phase beim Messvorgang	6
1.3.3	Operatoren mit kontinuierlichem Spektrum	7
1.4	Die Diracabbildung zur Konstruktion von Operatoren	9
2	Mathematische Aspekte	13
2.1	Der geometrische Zugang	13
2.2	Mannigfaltigkeiten und glatte Abbildungen	14
2.3	Das Tangential- und das Kotangentialbündel	20
2.4	Gruppen und ihre Wirkungen	25
2.5	Liegruppen und Flüsse	30
2.6	Symplektische Geometrie	33
3	Quantisierung mit der kanonischen Gruppe	39
3.1	Ein grober Überblick	39
3.2	Die konkrete mathematische Umsetzung	42
3.3	Die gewöhnliche Quantenmechanik	46
4	Quantisierung des harmonischen Oszillators	51
4.1	Die konventionelle Quantisierung	52
4.2	Winkel-Wirkungsvariablen-Darstellung	54
4.3	Ein naiver Versuch der Quantisierung	57
4.4	Das Versagen des Winkels	59
4.5	Konstruktion der Observablen	60
4.6	Die Liealgebra $so^\uparrow(1, 2)$ und ihre Darstellungen	63
4.7	Die positive, diskrete Serie	66
4.8	Konstruktion alternativer Leiteroperatoren	68
5	Anwendung auf den Casimireffekt	71
5.1	Der Casimireffekt für das Klein-Gordon-Feld	71
5.1.1	Anwesenheit der Platten	72
5.1.2	Abwesenheit der Platten	75
5.1.3	Regularisierung des masselosen Falls	77
5.2	Der Casimireffekt im Hinblick auf die neue Quantisierung	79
5.3	Eine abschließende Diskussion	81

1 Quantenmechanik als etablierte Theorie

Die nichtrelativistische Quantenmechanik nimmt trotz ihres stattlichen Alters von inzwischen über 100 Jahren noch immer eine zentrale Rolle bei der Beschreibung naturwissenschaftlicher Phänomene ein. Sie gilt als gesicherte Theorie und bildet in ihrer Gesamtheit das Fundament, auf das höhere Konzepte wie Quantenfeldtheorien respektive Eichtheorien aufsetzen, welche bis heute zu den bedeutendsten Errungenschaften der theoretischen Physik zählen. Sie ermöglichte als erste Theorie die korrekte Beschreibung der Grobstruktur des Wasserstoffspektrums [1, 3], insbesondere des Grundzustands, oder des Beugungsbildes am Doppelspalt, welches klassisch nicht zu deuten schien.

Eine der beeindruckendsten Voraussagen der modernen Physik ist wohl die Abweichung des Landé-Faktors vom Elektron, deren theoretischer Wert [4] im Rahmen der Quantenelektrodynamik bei einer Genauigkeit von 10^{-9} mit dem Experiment [5] übereinstimmt:

$$\begin{aligned}\frac{g_{\text{Theorie}} - 2}{2} &= 1159,652359(282) \cdot 10^{-6} \\ \frac{g_{\text{Experiment}} - 2}{2} &= 1159,652181(7) \cdot 10^{-6} \quad .\end{aligned}\tag{1.1}$$

Mit der Einführung nichtabelscher Eichtheorien [6] und des Konzepts der spontanen Symmetriebrechung [7] wurde das Standardmodell der Elementarteilchenphysik als fundamentale Theorie der elektroschwachen und starken Wechselwirkung manifestiert, lediglich die Gravitation verweigert sich noch immer strikt einer Quantisierung im Rahmen einer störungstheoretischen Behandlung. Es birgt eine gewisse Ironie des Schicksals in sich, dass die theoretische Physik ihre Anfänge mit Isaac Newton und seiner Behandlung der Schwerkraft nahm, über Umwege die Quantisierung entdeckte, sie relativistisch gar bis zur Erklärung elektroschwacher und starker Prozesse verfeinerte, um am Ende vor dem Problem zu stehen, dass der Keim dieses Bestrebens sich nicht konsistent in eine Quantenfeldtheorie implementieren lässt.

Praktisch mag diesem Dilemma wenig Bedeutung zukommen, da die Gravitation auf Energieskalen der Elementarteilchenphysik in der Regel keine Rolle spielt, jedoch ist die Situation konzeptionell höchst unbefriedigend und sollte einen jeden Physiker schlecht schlafen lassen, denn letztendlich wird die essentielle Frage aufgeworfen: „Haben wir die Quantenmechanik trotz ihrer phänomenalen Erfolge überhaupt verstanden?“ Eine Antwort möchte ich zunächst schuldig bleiben, aber unterstreichen, dass eine genaue Studie des Fundaments, der nichtrelativistischen Quantenmechanik, trotz seines erheblichen Alters nicht vergebene Zeit ist.

Im Laufe dieser Diplomarbeit möchte ich zuerst die etablierte Quantenmechanik beleuchten und auf Feinheiten eingehen, die im Rahmen der universitären Ausbildung stets aus Zeitmangel vernachlässigt werden, obwohl sie einen wesentlichen Teil des Charakters dieser Theorie ausmachen.

Unter anderem werden wir feststellen, dass die nichtrelativistische Quantenmechanik nur auf dem flachen \mathbb{R}^n bzw. seinem Kotangentenbündel $T^*\mathbb{R}^n \cong \mathbb{R}^{2n}$ standhält. Doch wissen wir, mitnichten ist die Erde flach und auch nicht jeder Konfigurationsraum respektive der assoziierte Phasenraum, d. h. wir benötigen eine adäquate Vorschrift, wie man Observablen auf einer beliebigen symplektischen Mannigfaltigkeit quantisiert. Eine mögliche Antwort darauf versucht die gruppentheoretische Quantisierung nach Christopher Isham [8] zu geben, welche einen beträchtlichen Anteil dieser Arbeit einnehmen wird.

Mithilfe dieser Methode soll schlussendlich die Quantisierung des harmonischen Oszillators in seiner Winkel- und Wirkungsvariablendarstellung vorgenommen werden, welche sich grundlegend von der üblichen Vorgehensweise unterscheidet.

Zunächst jedoch wollen wir uns erneut in das Gedächtnis rufen, warum Quantisierung in der Geschichte der Physik überhaupt nötig wurde, wieso die klassische Mechanik ihren Dienst versagte.

1.1 Ein kurzer historischer Abriss

Mitte des 19. Jahrhunderts war das Gebäude der klassischen Mechanik in seiner wesentlichen Form durch die Arbeiten von Leonhard Euler, Joseph Louis Lagrange, William Rowan Hamilton und Carl Gustav Jacob Jacobi bereits errichtet. Der Beschreibung von Vielteilchensystemen punktförmiger, massiver Partikel stand nichts mehr im Wege, die Elektrodynamik war experimentell bereits durch Michael Faraday begründet worden und James Clerk Maxwell formulierte seine Gleichungen zur Beschreibung des elektromagnetischen Feldes. Nichts schien darauf hinzuweisen, dass diesem Weltbild kontinuierlicher Größen ein Widerspruch innewohnte.

Doch dann läutete Max Planck am 14. Dezember 1900 mit seiner Darstellung zur Energiedichte des Hohlraumstrahlers [9] das neue Jahrhundert der Quantenmechanik ein, indem er konstatierte, dass das elektromagnetische Feld in einem Kasten eben nicht durch beliebig kontinuierliche Größen beschrieben sondern als Zusammenfassung ungekoppelter, harmonischer Oszillatoren gesehen werden kann. Erst dann erhält man die korrekte Energiedichteform:

$$E_{\text{Planck}}(\omega, T) d\omega = \frac{2\hbar\omega^3}{\pi c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} d\omega \quad (1.2)$$

Das ursprüngliche Problem lag in der Tatsache begründet, dass ihr klassischer Limes $\frac{\hbar\omega}{kT} \rightarrow 0$ in erster Ordnung, das Raleigh-Jeans'sche Strahlungsgesetz [10, 11],

$$E_{\text{Rayleigh}}(\omega, T) d\omega = \frac{2\hbar\omega^3}{\pi c^3} \frac{1}{\left(1 + \frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} d\omega = \frac{2kT}{\pi c^3} \omega^2 d\omega \quad (1.3)$$

kein endliches Integral über den positiven reellen Zahlenstrahl \mathbb{R}^+ aller Frequenzen besitzt – man sprach von der *ultravioletten Katastrophe*. Dieser wurde nun durch die Forderung begegnet, dass die Frequenzen im Hohlraum nur diskrete Werte annehmen können, was der erste harte Bruch mit dem Gebot der kontinuierlichen Größen war und schlussendlich im Jahre 1905 durch Albert Einsteins Arbeit zum äußeren lichtelektrischen Effekt [12] besiegelt worden ist.

Weiter stand das Emissionsspektrum des Wasserstoffatoms, welches in seiner historischen Formulierung als klassisches Zweiteilchenproblem analog zum Keplerproblem angesehen wurde, im vehementen Widerspruch zur physikalischen Beobachtung: Zunächst ist das emittierte Spektrum für gebundene Zustände diskret, und ferner stünde die Stabilität des Wasserstoffatoms zur Debatte, da ein bewegtes Elektron aufgrund seiner elektrischen Ladung Energieverluste zu verzeichnen hätte, welche es in einem Bruchteil einer Sekunde in den Kern stürzen ließe [13].

Niels Bohr postulierte daraufhin im Jahre 1913 die Existenz von energieverlustfreien Orbits mithilfe der Forderung, dass der Drehimpuls nur ganzzahlige Vielfache des Planck'schen Wirkungsquantums h annehmen könne, die sogenannte *Auswahlbedingung*: $L = nh$ für $n \in \mathbb{N}$, welche konsequenterweise das diskrete Energiespektrum [14]

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{e^4}{\hbar^2} \mu = -\frac{1}{2n^2} \alpha^2 \mu c^2 \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad (1.4)$$

nach sich zog. Zwar trägt in dieser semiklassischen Formulierung der Grundzustand mit $L = h$ den falschen Drehimpuls, aber das Energiespektrum stimmt mit dem spektroskopischen Experiment überein.

Letztendlich wurde diese Ungereimtheit 1926 durch Wolfgang Pauli und Erwin Schrödinger mithilfe der Matrixmechanik [1] respektive der äquivalenten, durch Louis de Broglie [2] motivierten, Wellenformulierung [3] beseitigt. Die *neue* Quantenmechanik war geboren:

In dieser Mitteilung möchte ich zunächst an dem einfachsten Fall des (nichtrelativistischen und ungestörten) Wasserstoffatoms zeigen, daß die übliche Quantisierungsvorschrift sich durch

eine andere Forderung ersetzen läßt, in der kein Wort von „ganzen Zahlen“ mehr vorkommt. Vielmehr ergibt sich die Ganzzahligkeit auf dieselbe natürliche Art, wie etwa die Ganzzahligkeit der Knotenzahl einer schwingenden Saite. Die neue Auffassung ist verallgemeinerungsfähig und rührt, wie ich glaube, sehr tief an das wahre Wesen der Quantenvorschriften.

Erwin Schrödinger (1926)

Heute nimmt die Quantenmechanik trotz ihrer fremdhaften Anmutung und unanschaulicher Korrespondenz zum real erlebten Alltag eine bedeutende Rolle in unserem Leben ein: Die Halbleiterelektronik erfuhr im letzten Jahrhundert einen phänomenalen Aufschwung und computergestützte Techniken dominieren unsere Arbeitsverfahren und Kommunikationswege. Die Rezepte für eine umweltfreundliche und nachhaltige Energiepolitik in der Zukunft fußen auf Konzepten wie Leuchtdioden, Photovoltaik und supraleitende Stromübertragung, Effekte, die ohne Quantenmechanik undenkbar wären.

1.2 Die übliche Konstruktion der Quantenmechanik

Eine didaktische Einführung in die nichtrelativistische Quantenmechanik startet in der Regel mit der Anschauung Louis de Broglies [2], dass der Materie zwei Eigenheiten anhaften, der Teilchencharakter im Sinne der Korpuskulartheorie Isaac Newtons und die Welleneigenschaft, wie man sie dem elektromagnetischen Felde im Rahmen der Elektrodynamik zuschreibt. Beide Theorien werden über die Wellenlänge λ und Impuls p respektive die Energie E und die Frequenz ω mit folgenden Relationen de Broglies verknüpft:

$$\text{de Broglie-Wellenlänge: } \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad \text{de Broglie-Frequenz: } \omega = \frac{E}{\hbar} \quad . \quad (1.5)$$

Der klassisch freien Bewegung auf dem reellen Zahlenstrahl mit Impuls p und Energie E wird folglich die freie, komplexwertige Welle

$$\psi(q, t) = e^{i\left(\frac{2\pi q}{\lambda} - \omega t\right)} \equiv e^{\frac{i}{\hbar}(pq - Et)} \quad (1.6)$$

zugeordnet und die bekannte Dispersionsrelation der klassischen Mechanik $E(p) = \frac{p^2}{2m}$ für das freie Teilchen im Zusammenhang mit einer partiellen Differentialgleichung bezüglich des Orts q und der Zeit t gefordert: Man erhält schließlich die zeitabhängige Schrödingergleichung für planare Wellen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar}(pq - Et)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} e^{\frac{i}{\hbar}(pq - Et)} \quad . \quad (1.7)$$

Im Rahmen einer Eigenwertgleichung vermag man dann die Ableitung des Orts als Vorschrift zu interpretieren, wie man den Impuls p der planaren Welle bestimmt und erweitert dieses Konzept auf die gesamte Hamilton'sche Funktion der klassisch zugrundeliegenden Theorie derart, dass

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = p\psi(q, t) \quad \text{und} \quad H = \frac{p^2}{2m} \mapsto \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \quad . \quad (1.8)$$

Für eine allgemeine Hamilton'sche Funktion gilt es nun, jene komplexwertige Funktion $\psi(q, t)$ zu bestimmen, welche die zeitabhängige Schrödingergleichung erfüllt und bettet diese in den Vektorraum der quadratintegrierbaren Funktionen $L^2(\mathbb{R}, dq)$ ein, welcher auf eine natürliche Weise die Struktur eines Hilbertraums \mathcal{H} durch das übliche Skalarprodukt erhält:

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : L^2(\mathbb{R}, dq) \times L^2(\mathbb{R}, dq) \rightarrow \mathbb{C}, (\psi_1, \psi_2) \mapsto \int_{\mathbb{R}} dq \psi_1^* \psi_2 \quad . \quad (1.9)$$

Anschließend implementiert man den physikalischen Messvorgang, indem man jeder klassischen Observable O einen selbstadjungierten, linearen Operator \hat{O} zuweist, welcher sicher reelle Eigenwerte besitzt und führe letztendlich eine explizite Messvorschrift für die Observable analog zur Mittelwertbildung einer unnormierten Dichtefunktion und ihre Unschärfe mithilfe der Varianz ein:

$$\mu := \langle \hat{O} \rangle_\psi = \frac{\int dq \psi^* \hat{O} \psi}{\int dq \psi^* \psi} \quad \text{respektive} \quad \sigma^2 := (\Delta_\psi \hat{O})^2 = \langle (\hat{O} - \mu)^2 \rangle_\psi \quad . \quad (1.10)$$

Die Notwendigkeit der Normierung beim Messvorgang schuldet man der weit akzeptierten, aber nicht unumstrittenen [15], Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Amplitude durch Max Born [16], welcher dem Integranden $\rho(q, t) := \psi(q, t)^* \psi(q, t)$ die Rolle einer Wahrscheinlichkeitsdichte zuschreibt und damit den statistischen Charakter der Theorie unterstreicht.

Ich selber neige dazu, die Determiniertheit in der atomaren Welt aufzugeben. Aber das ist eine philosophische Frage, für die physikalische Argumente nicht allein maßgebend sind

Max Born (1926)

Ohne weiter in das Detail gehen zu wollen, ziehen nichtkommutierende, selbstadjungierte Operatoren aufgrund der Cauchy-Schwarz-Ungleichung die folgende Relation nach sich, welche für den Spezialfall $\hat{A} = \hat{q}$ und $\hat{B} = \hat{p}$ die Unschärferelation für Ort- und Impulsmessung forciert:

$$\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \geq \frac{1}{2} | \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle | \quad \Rightarrow \quad \Delta \hat{q} \Delta \hat{p} \geq \frac{\hbar}{2} \quad . \quad (1.11)$$

An dieser Stelle wird einer der gravierendsten Unterschiede zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik offensichtlich: Die Kenntnis einer der Kenngrößen des physikalischen Systems impliziert sofort eine Beeinflussung des Experiments, d. h. das Ablesen von Orts- bzw. Impulskoordinaten geschieht nicht getrennt vom experimentellen Apparat, mehr noch macht es einen Unterschied, in welcher Reihenfolge man die Werte der Observablen bestimmt, d. h. Messung bedeutet Interaktion.

In diesem Rahmen wird die nichtrelativistische Quantenmechanik an den Universitäten im Grundstudium gelehrt und verspricht in der Regel für einfache Problemstellungen auch befriedigende Ergebnisse. Man assoziiert das bereits erarbeitete Wissen aus der linearen Algebra, konstruiert Korrespondenzen zwischen der Technik des Diagonalisierens von Matrizen und den Eigenwerten des quantenmechanischen Systems, erörtert Basiswechsel und Vertauschungsrelationen. Vertiefend studiert man Vielteilchensysteme oder versucht die Verknüpfung zwischen der Liealgebra der klassischen Observablen bezüglich der Poissonklammer mit dem Kommutator von linearen Operatoren offenzulegen.

An dieser Stelle mag man der Anschauung verfallen, dass die nichtrelativistische Quantenmechanik als konsistente Theorie zur Beschreibung der Naturphänomene auf Skalen des Atomradius etabliert ist und verfolgt konsequenterweise die Konstruktion einer Quantentheorie, welche relativistische Effekte akzeptiert und ihr Augenmerk auf die Vernichtung und Erzeugung von Teilchen legt. Quantenfeldtheorien leisten heute als integrales Instrument zur Beschreibung von Wechselwirkungen der fundamentalen Kräfte ihren Dienst und sind in der Regel direkt aus der nichtrelativistischen Quantenmechanik konstruiert worden, indem man die Vertauschungsrelationen der Feldoperatoren aus den Kommutatoren der nichtrelativistischen Quantenmechanik ableitet. Das bedeutet aber, dass eine genauere Studie des Fundaments sich auf die untergeordneten Hierarchien auswirkt, ferner noch Inkonsistenzen vererbt werden. Das Bild eines Hauses, welches auf einem festen Fundament errichtet worden ist, soll uns als moralisches Leitmotiv bei dem kritischen Hinterfragen der nichtrelativistischen Quantenmechanik dienen.

Es wird sich herausstellen, dass die vorangegangene Konstruktion leider nicht hält und die didaktische Anschauung aus der linearen Algebra endlichdimensionaler Vektorräume ungenügend ist, sich sogar unter der Missachtung einer streng mathematischen Behandlung sehr einfach widersprüchliche Aussagen konstruieren lassen. Der nächste Abschnitt wird sich ausführlich einiger Beispiele zur Demonstration dieser Schwierigkeiten widmen.

1.3 Probleme der gebräuchlichen Formulierung

Die vorangegangene Konstruktion der nichtrelativistischen Quantenmechanik kann nicht ohne eine eingehendere Diskussion im Raum stehen bleiben, da sie in dieser naiven Formulierung widersprüchliche Aussagen zulässt.

1.3.1 Das Lebesgueintegral und Nullmengen

Die Beschreibung der Quantenmechanik mithilfe des Vektorraums der quadratintegrablen Funktionen $L^2(\mathbb{R}, dq)$ weist eine Subtilität auf, die in der Regel keine Beachtung findet. Wir werden sehen, dass der Nullvektor 0 nicht eindeutig ist. Dazu besinne man sich der Tatsache, dass das Lebesgueintegral über abzählbare Mengen stets verschwindet, da das zugehörige Maß diesen *Nullmengen* stets den Wert 0 zuweist. Exemplarisch betrachte man die charakteristische Funktion der rationalen Zahlen, welche auch *Dirichlet-Funktion* D genannt wird:

$$D : \mathbb{R} \rightarrow \{0, 1\}$$

$$x \mapsto D(x) := \begin{cases} 1 & \text{wenn } x \in \mathbb{Q} \quad , \\ 0 & \text{wenn } x \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q} \quad . \end{cases} \quad (1.12)$$

Offensichtlich fällt das Betragsquadrat der Dirichlet-Funktion mit ihr selbst zusammen und damit erhält man mit dem Skalarprodukt (1.9) den folgenden Ausdruck:

$$\int_{\mathbb{R}} dq |D(q)|^2 = \int_{\mathbb{R}} dq D(q) = 0 \cdot \int_{\mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}} dq + 1 \cdot \underbrace{\int_{\mathbb{Q}} dq}_{=0} = 0 \quad . \quad (1.13)$$

Konsequenterweise müsste nun aus der Definition des Skalarprodukts folgen, dass durch die Dirichlet-Funktion der Nullvektor gegeben ist und damit die Identität $D(x) = 0$ gälte, welche sofort auf einen Widerspruch führt. Diese Überlegung lässt sich ebenso auf jede beliebige quadratintegrablen Funktion ψ ausweiten, solange man sie nur an abzählbar (möglicherweise unendlich) vielen Stellen modifiziert. Das Integral bliebe das Gleiche. Man begegnet diesem Problem mit der denkbar intuitivsten Lösung, welche in der folgenden Definition motiviert wird.

Definition 1.3.1. (fast überall gleich) Seien f und g zwei komplexwertige Funktionen auf \mathbb{R} , und $M \subseteq \mathbb{R}$ eine Teilmenge, dann heißen die Funktionen f und g **fast überall gleich**

$$:\iff (f - g)_M = 0 \quad \text{und} \quad \mathbb{R} \setminus M \text{ ist abzählbar} \quad . \quad (1.14)$$

Führt man nun eine Äquivalenzrelation \sim_L ein, welche alle jene Funktionen zu einer Klasse zusammenfasst, welche fast überall gleich sind, so behebt man den vorangegangenen Widerspruch sofort, denn die Dirichlet-Funktion und die Nullabbildung liegen in der gleichen Äquivalenzklasse

$$D(x) \sim_L 0 \quad \Rightarrow \quad [D(x)]_{\sim_L} = [0]_{\sim_L} \quad . \quad (1.15)$$

Diese Subtilität mag pedantisch klingen, ist aber zu jeder Zeit präsent: Der Impulsoperator \hat{p} wird in Ortsdarstellung stets als Ableitung nach dem Ort implementiert, die Freiheit, die Funktion ψ an abzählbar vielen Stellen abändern zu dürfen, impliziert jedoch, dass sie nicht zwangsweise differenzierbar sein muss. Infolgedessen meint man eigentlich, dass die Funktion ψ in einer Äquivalenzklasse $[\psi]_{\sim_L}$ liegt, welche einen differenzierbaren Vertreter $[\psi]_{\sim_L} \ni \phi \in C^1$ besitzt. Im Falle des Nullvektors 0 ist die Nullabbildung eine C^∞ -Funktion, jedoch ist die Dirichlet-Funktion noch nicht einmal stetig.

Praktisch sind Äquivalenzklassen stets mühsam und eine explizite Berechnung kann eh nur mithilfe eines Vertreters geschehen, darum unterdrückt man in der Regel diesen Formalismus und behält diese Besonderheit stets im Hinterkopf. Von nun an wollen wir auch diesem Paradigma folgen und nur noch darauf explizit hinweisen, wenn es nötig ist. Der Hilbertraum \mathcal{H} ist somit vorerst durch den Quotientenraum $L^2(\mathbb{R}, dq)/\sim_L$ mit dem Skalarprodukt (1.9) auf den Vertretern gegeben.

1.3.2 Die Rolle der Phase beim Messvorgang

Die Betrachtungen aus dem letzten Abschnitt haben uns gezeigt, dass die Wellenfunktion bis auf abzählbar viele Stellen nicht eindeutig bestimmt ist. Diese Eigenschaft ist jedoch unbedeutend im Vergleich zu der Tatsache, dass noch eine schwerwiegendere Unbestimmtheit im Rahmen des Messvorgangs vorliegt: Sei ψ eine Lösung der Schrödingergleichung, dann ist ein komplexes Vielfaches $z \cdot \psi$ für $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ ebenso eine Lösung. Mehr noch haben beide Lösungen den gleichen Erwartungswert für einen Operator \hat{O} , denn

$$\langle \hat{O} \rangle_{z \cdot \psi} \stackrel{(1.10)}{=} \frac{|z|^2 \int dq \psi^* \hat{O} \psi}{|z|^2 \int dq \psi^* \psi} = \frac{\int dq \psi^* \hat{O} \psi}{\int dq \psi^* \psi} \stackrel{(1.10)}{=} \langle \hat{O} \rangle_{\psi} . \quad (1.16)$$

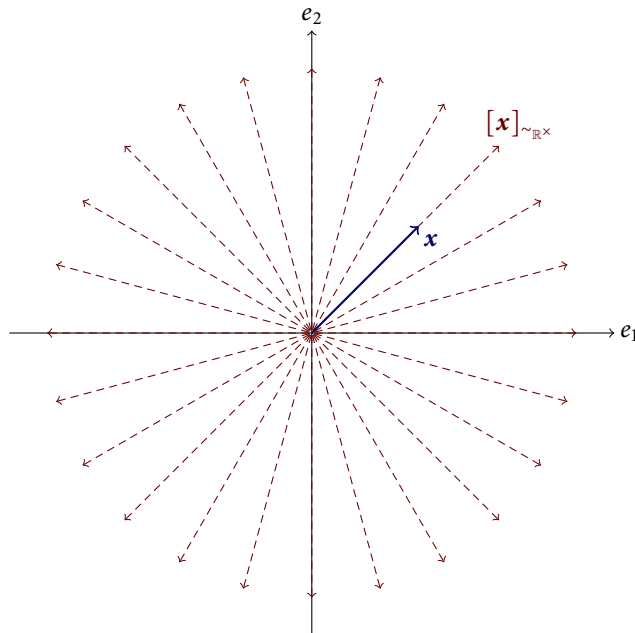
Physikalisch bedeutet das, dass beide Wellenfunktionen ein und den gleichen Messzustand realisieren. Auch hier ist es angebracht, eine Äquivalenzrelation zu definieren derart, dass komplexwertige Vielfache einer Wellenfunktion stets zum gleichen Zustand gehören:

$$\psi \sim_{\mathbb{C}^\times} \phi \quad :\Leftrightarrow \quad \exists z \in \mathbb{C} \setminus \{0\} : \psi = z\phi . \quad (1.17)$$

Der Hilbertraum der Äquivalenzklassen fast überall gleicher und quadratintegrabler Funktionen $\mathcal{H} = (L^2(\mathbb{R}, dq) / \sim_L, \langle \cdot | \cdot \rangle)^1$ muss darum erneut einer Quotientenbildung bezüglich der kanonischen Projektion

$$\pi_{\mathbb{C}^\times} : \mathcal{H} \setminus \{0\} \rightarrow \mathcal{PH} := \mathcal{H} / \sim_{\mathbb{C}^\times}, \quad \psi \mapsto \pi_{\mathbb{C}^\times}(\psi) := [\psi]_{\sim_{\mathbb{C}^\times}} \quad (1.18)$$

unterzogen werden. Den Quotientenraum \mathcal{PH} nennt man analog zu seinem endlichdimensionalen Pendant *projektiven Hilbertraum*. Die Äquivalenzklassen der physikalischen Zustände sind also disjunkte Strahlen im Hilbertraum \mathcal{H} , welche auf den Nullpunkt zustreben, ihn aber nicht berühren. Exemplarisch entnimmt man der folgenden Abbildung die Quotientenbildung für den reellwertigen, endlichdimensionalen Fall $\mathcal{P}\mathbb{R}^2 = \mathbb{R}^2 / \sim_{\mathbb{R}^\times}$. Ein Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ wird auf den Strahl $[\mathbf{x}]_{\sim_{\mathbb{R}^\times}} = \{\lambda \mathbf{x} \mid \lambda \in \mathbb{R}^\times\}$ abgebildet und die Menge der Strahlen wird projektiver Vektorraum genannt:



¹Die Äquivalenzklassen der fast überall gleichen Funktionen werden von hier an explizit unterdrückt, um die Übersicht zu wahren.

Das Skalarprodukt aus \mathcal{H} induziert im Quotientenraum ein neues Produkt \odot , so dass

$$\odot : \mathcal{PH} \times \mathcal{PH} \rightarrow [0, 1], (\Psi, \Phi) \mapsto \Psi \odot \Phi := \frac{|\langle \psi | \phi \rangle|^2}{\|\psi\|^2 \|\phi\|^2}, \quad (1.19)$$

wenn $\Psi = [\psi]_{\sim_{\mathbb{C}^\times}}$ und $\Phi = [\phi]_{\sim_{\mathbb{C}^\times}}$ die zugehörigen Äquivalenzklassen zu den Hilbertraumelementen ψ respektive ϕ sind. Das Produkt $\Psi \odot \Phi \in [0, 1]$ beschreibt die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen den Zuständen Ψ und Φ und daher bietet es sich im Rahmen des Messvorgangs an, die Elemente des projektiven Hilbertraums, d. h. Strahlen, als die *fundamentaleren* Objekte anzusehen als die Wellenfunktionen aus \mathcal{H} . Als physikalische Transformation sollen alle jene invertierbare Abbildungen $T : \mathcal{PH} \rightarrow \mathcal{PH}$ dienen, welche die Übergangswahrscheinlichkeit erhalten, d. h. $T(\Psi) \odot T(\Phi) = \Psi \odot \Phi$ für alle $\Psi, \Phi \in \mathcal{PH}$.

In diesem Rahmen tut sich jedoch eine schwerwiegende Frage auf, denn projektive Räume sind nicht linear, Vektorräume schon. Existiert somit für jede wahrscheinlichkeitserhaltende Transformation auf den Strahlen $T : \mathcal{PH} \rightarrow \mathcal{PH}$ eine lineare, gar unitäre, Transformation $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, welche wohldefiniert auf den entsprechenden Vertretern der Äquivalenzklassen wirkt? Mathematisch formuliert stellt man sich die Frage, ob das folgende Diagramm stets kommutiert derart, dass $T(\Psi) = T([\psi]_{\sim_{\mathbb{C}^\times}}) = [U(\psi)]_{\sim_{\mathbb{C}^\times}}$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$:

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{H} & \overset{U}{\dashrightarrow} & \mathcal{H} \\ \pi_{\mathbb{C}^\times} \downarrow & & \downarrow \pi_{\mathbb{C}^\times} \\ \mathcal{PH} & \xrightarrow{T} & \mathcal{PH} \end{array}$$

Eine Antwort darauf vermag das Wigner-Theorem zu geben, welches die Existenz von unitären respektive antiunitären Transformationen U auf \mathcal{H} zusichert.

Satz 1.3.2. (Wigner-Theorem). *Eine Symmetrietransformation zwischen physikalischen Zuständen kann auf der Stufe der Repräsentanten, das heißt auf dem Hilbertraum \mathcal{H} , immer als entweder unitärer oder antiunitärer Operator dargestellt werden.*

Dieser Eigenschaft verdanken wir, dass die nichtrelativistische Quantenmechanik überhaupt als lineare Theorie implementiert werden kann und wir somit in den Genuss des Superpositionsprinzips kommen, was einer erheblichen Vereinfachung des Formalismus zu Gute kommt. Ein ausführlicher Beweis des Wigner-Theorems kann im Rahmen der projektiven Geometrie geführt werden und war Bestandteil der Diplomarbeit Kai Johannes Kellers [18], welche ebenso als Publikation [19] vorliegt. Abschließend sei erwähnt, dass die Phase im Messvorgang zwar stets eliminiert wird, sie aber eine bedeutende Rolle bei der Dynamik quantenmechanischer Zustände spielt. Die zeitliche Evolution eines Zustandes kann nämlich mithilfe des Hamiltonoperators ausgedrückt werden:

$$\psi(q, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \psi(q, 0) \quad . \quad (1.20)$$

Infolgedessen muss man streng zwischen dem Messvorgang und der Dynamik quantenmechanischer Zustände unterscheiden.

1.3.3 Operatoren mit kontinuierlichem Spektrum

In diesem Abschnitt wollen wir die Rolle des Hilbertraums ein wenig genauer beleuchten und werden feststellen, dass der Vektorraum der quadratintegriblen Funktionen $L^2(\mathbb{R}, dq)$ unzureichend für die Beschreibung von Systemen mit kontinuierlichem Spektrum ist. Die Abhandlung lehnt sich stark an das Papier von François Gieres [20] an.

Es bietet sich an, das freie Teilchen in einer Dimension als Beispiel heranzuziehen: Der zugehörige Hamiltonoperator in Ortsdarstellung \hat{H} ist entsprechend ausschließlich durch die kinetische Energie gegeben:

$$\hat{H} := \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \quad \text{und Bewegungsgleichung} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \psi(q, t) \quad . \quad (1.21)$$

Die zeitabhängige Schrödingergleichung hat hier bekanntlich planare Wellen zur Lösung, jedoch sind diese gar keine quadratintegrale Funktionen, denn

$$\psi(q, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(pq-Et)} \quad \Rightarrow \quad \|\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} dq e^{-\frac{i}{\hbar}(pq-Et)} e^{\frac{i}{\hbar}(pq-Et)} = \int_{\mathbb{R}} dq \rightarrow \infty \quad . \quad (1.22)$$

Die Eigenfunktionen des Hamilton- und Impulsoperators liegen infolgedessen gar nicht im Hilbertraum! Betrachtet man hingegen die Eigenfunktionen des Ortsoperators \hat{q} , so muss für einen Eigenzustand ϕ_{q_0} zum Eigenwert q_0 folgende Eigenwertgleichung in Ortsraumdarstellung gelten:

$$\hat{q}\phi_{q_0}(q, t) = q_0\phi_{q_0}(q, t) \quad \Leftrightarrow \quad (q_0 - q)\phi_{q_0}(q, t) = 0 \quad \text{für alle } q \in \mathbb{R} \quad . \quad (1.23)$$

Die letzte Gleichung impliziert jedoch, dass die Eigenfunktion ϕ_{q_0} für alle $q \neq q_0$ bis auf den Punkt $q = q_0$ stets verschwindet. Solch eine Funktion existiert schlichtweg nicht, außer es handelte sich um einen Vertreter aus der Äquivalenzklasse des Nullvektors 0, was im Falle eines physikalischen Partikels keine sinnvolle Lösung ist, denn der Ortsoperator hätte keine Eigenwerte.

Interpretiert man die Eigenzustände des Ortsoperators hingegen distributionswertig, so ist die Dirac'sche Deltadistribution $\delta_{q_0} : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}$, $f \mapsto f(q_0)$ eine valide Lösung, denn

$$(\hat{q}\delta_{q_0})(f) = \int_{\mathbb{R}} dq q \delta(q - q_0) f(q) = q_0 f(q_0) = q_0 \int_{\mathbb{R}} dq \delta(q - q_0) f(q) = (q_0 \delta_{q_0})(f) \quad . \quad (1.24)$$

Die Deltadistribution ist offensichtlich keine Funktion sondern Teilmenge des (dualen) Vektorraums linearer und stetiger Funktionale auf dem Vektorraum schnell fallender Funktionen² \mathcal{S} , die **temperierten Distributionen** \mathcal{S}^* .

Im Gegensatz zur Bildung des Dualen in endlichdimensionalen Vektorräumen sind hier Vektorraum $V = \mathcal{S}$ und dualer Vektorraum $V^* = \mathcal{S}^*$ nicht isomorph, denn es gibt, wie wir gesehen haben, mehr Funktionale als Funktionen. Es ist aber möglich den Vektorraum \mathcal{S} per Inklusion in \mathcal{S}^* einzubetten, so dass

$$\iota : \mathcal{S} \hookrightarrow \mathcal{S}^*, \quad f \mapsto \iota_f(\cdot) := \int_{\mathbb{R}} dq f(q) (\cdot)^* \quad . \quad (1.25)$$

Analog lassen sich planaren Wellen respektive andere nicht schnell fallende Funktionen per Inklusion einbetten, man spricht von **regulären Distributionen**. Im Falle der planaren Wellen ist das zugeordnete Funktional die Fouriertransformation:

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(pq-Et)} \mapsto \int_{\mathbb{R}} dq e^{-\frac{i}{\hbar}(pq-Et)} (\cdot) \quad \Rightarrow \quad \iota_\psi(g) = \int_{\mathbb{R}} dq e^{-\frac{i}{\hbar}(pq-Et)} g(q) \propto \mathcal{F}\langle g \rangle \quad . \quad (1.26)$$

Auch hier macht die Eigenwertgleichung für den Impuls wieder Sinn, solange man die Gleichungen distributionswertig liest:

$$(\hat{p}\iota_\psi)\langle g \rangle = \int_{\mathbb{R}} dq \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q} e^{\frac{i}{\hbar}(pq-Et)} \right)^* g(q) = p \int_{\mathbb{R}} dq e^{-\frac{i}{\hbar}(pq-Et)} g(q) = (p\iota_\psi)\langle g \rangle \quad . \quad (1.27)$$

²Die schnell fallenden Funktionen wurden zu Ehren des französischen Mathematikers Laurent Schwartz benannt. Jede ihrer Ableitungen fällt schneller als alle Polynome endlichen Grades in q .

Der Vektorraum der Schwartz-Funktionen \mathcal{S} liegt bekanntlich dicht in $L^2(\mathbb{R}, dq)$ [21] und die Einbettung quadratintegrabler Funktionen ist ebenso mithilfe regulärer Distributionen möglich. Infolgedessen lassen sich die beteiligten Räume in folgender Art und Weise zueinander assoziieren:

$$\iota(\mathcal{S}) \subset \iota(L^2(\mathbb{R}, dq)) \subset \mathcal{S}^* \quad . \quad (1.28)$$

Das Tripel $(\mathcal{S}, L^2, \mathcal{S}^*)$ wird in der Literatur **Gelfand-Tripel** oder **rigged Hilbert space** genannt und ist verallgemeinerungsfähig für jede Untermenge, welche dicht in $L^2(\mathbb{R}, dq)$ liegt – die Wahl orientiert sich an der expliziten physikalischen Fragestellung. Wir haben uns hier ausdrücklich für die schnell fallenden Funktionen \mathcal{S} entschieden, weil sie eine weitere bemerkenswerte Eigenschaft besitzen. Jede Ableitung respektive Multiplikation mit dem Ortsoperator sichert zu, dass das Ergebnis wieder schnell fallend ist – die Schwartz-Funktionen entsprechen somit einem invarianten Unterraum der quadratintegrablen Funktionen, aus denen die beteiligten Operatoren nicht herausführen können, so dass

$$\hat{\mathbb{1}} : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S} \quad \text{und} \quad \hat{q} : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S} \quad \text{respektive} \quad \hat{p} : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S} \quad . \quad (1.29)$$

Diese Eigenschaft ist nicht selbstverständlich, denn wähle die Funktion $\xi = (q + i)^{-1}$ und verifiziere, dass sie quadratintegrabel ist:

$$\int_{\mathbb{R}} dq \xi^*(q)\xi(q) = \int_{\mathbb{R}} dq \frac{1}{q^2 + 1} = \arctan(q)|_{-\infty}^{+\infty} = \pi \quad \Rightarrow \quad \xi \in L^2(\mathbb{R}, dq) \quad . \quad (1.30)$$

Hingegen ist die Funktion $q\xi$ nicht quadratintegrabel, wie die folgende Rechnung demonstriert:

$$\int_{\mathbb{R}} dq \frac{q^2}{q^2 + 1} = \int_{\mathbb{R}} dq \left(1 - \frac{1}{q^2 + 1}\right) = \int_{\mathbb{R}} dq - \pi \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad q\xi \notin L^2(\mathbb{R}, dq) \quad . \quad (1.31)$$

Es ist also wichtig, große Sorgfalt bei der Wahl der physikalischen Zustände walten zu lassen. Die Aussage, dass der Raum der quadratintegrablen Funktionen die Menge der physikalischen Zustände sei, ist somit fahrlässig. In den vorangegangenen Beispielen haben wir sogar gesehen, dass physikalische Eigenzustände noch nicht einmal Teilmenge von $L^2(\mathbb{R}, dq)$ sein müssen. In dem Sinne stellt das Gelfand-Tripel eine geschickte Wahl bei der Behandlung von Systemen mit kontinuierlichem Spektrum dar und garantiert eine mathematisch präzise Beschreibung. Das Auswerten auf Testfunktionen, um endliche Integrale garantieren zu können, wird praktisch oft für den Spezialfall einer Gaußverteilung durchgeführt und ist äquivalent zum Bilden eines Wellenpaketes. Philosophisch tut sich die Frage auf, ob aufgrund der Endlichkeit des Universums überhaupt *freie* Zustände existieren können und die Behandlung dieser in folgedessen obsolet sei, jedoch benutzt man die Näherung planarer Wellen in so vielen Fällen, dass es einer konsistenten Beschreibung bedarf.

1.4 Die Diracabbildung zur Konstruktion von Operatoren

Bis jetzt haben wir noch kein Wort darüber verloren, wie man von der klassischen Theorie mit ihren Observablen, welche im Kern durch \mathcal{C}^∞ -Funktionen auf einer symplektischen Mannigfaltigkeit M (z. B. dem Kotangentenbündel des Konfigurationsraums T^*Q) gegeben sind, zur nichtrelativistischen Quantenmechanik mit selbstadjungierten Operatoren gelangt. Wir hatten uns auch stets auf die Quantisierung von Operatoren der Form \hat{q}^n bzw. \hat{p}^n für ein $n \in \mathbb{N}$ beschränkt. Was aber passiert für eine beliebige Observable $f : M \rightarrow \mathbb{R}$? Wir wollen in diesem Abschnitt den Arbeiten von S. Twareque Ali und Miroslav Engliš [22] folgen.

Einen Versuch wagt die Dirac'sche Quantisierungsabbildung $\hat{\cdot} : \mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R}) = \mathfrak{Obs}(M) \rightarrow \mathfrak{Op}(\mathcal{H})$:

(a) Die Abbildung $\hat{\cdot}$ ist linear, sprich es gilt für alle $f, g \in \mathfrak{Obs}(M)$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ folgende Relation:

$$\widehat{\alpha f + \beta g} = \alpha \hat{f} + \beta \hat{g} \quad .$$

- (b) Die Quantisierungsabbildung $\hat{\cdot}$ sichert zu, dass die Poissonklammer $[\cdot, \cdot]$ der Liealgebra von Observablen $\mathfrak{Obs}(M)$ mit dem Kommutator $[\cdot, \cdot]$ der Liealgebra von Operatoren $\mathfrak{Op}(\mathcal{H})$ bis auf die Konstante $i\hbar$ zusammenfällt, d. h.

$$[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar \widehat{[f, g]} \quad \text{für alle } f, g \in \mathfrak{Obs}(M) \quad .$$

- (c) Die Orts- und Impulsoperatoren werden in Ortsdarstellung stets wie folgt realisiert:

$$\hat{q}\psi(q) = q\psi(q) \quad \text{respektive} \quad \hat{p}\psi(q) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \psi(q) \quad .$$

- (d) Für alle Abbildungen $h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und $f \in \mathfrak{Obs}(M)$ gilt $\widehat{h(f)} = h(\hat{f})$, solange beide Seiten wohldefinierte Ausdrücke darstellen.

Die Forderung nach Linearität (a) erscheint natürlich in Hinblick darauf, dass das Bild der Quantisierungsabbildung auf einen Vektorraum wirkt und erinnert stark an die Darstellung von Gruppen auf Trägerräumen, sprich die lineare Realisierung einer Gruppenwirkung auf einem \mathbb{K} -Modul. Diese Einschränkung ist bequem, aber nicht zwingend erforderlich: Ohne weiter in das Detail gehen zu wollen, existiert z. B. eine nichtlineare Realisierung im Formalismus der *Blattner-Kostant-Sternberg-Kerne* [22]. Trotzdem wollen wir an dieser Forderung festhalten, denn sie impliziert zusammen mit (b), dass die Quantisierungsabbildung bis auf Konstanten ein Liealgebrahomomorphismus zwischen den Liealgebren $(\mathfrak{Obs}(M), [\cdot, \cdot])$ und $(\mathfrak{Op}(\mathcal{H}), [\cdot, \cdot])$ darstellt. Das ist eine sehr ästhetische und wünschenswerte Forderung, immerhin würde sie implizieren, dass die klassische Mechanik und die nichtrelativistische Quantenmechanik im Rahmen einer lokalen, infinitesimalen Betrachtung über wesensgleiche geometrische Züge verfügen. Mehr noch könnte man die Haltung einnehmen, dass diese Eigenschaft *die* ausgezeichnete Brücke zwischen beiden Theorien ist.³ Man bemerke für den Spezialfall $f = q$ und $g = p$, dass die konstante Funktion $1 \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ stets die Identität $\hat{1}$ auf dem Hilbertraum \mathcal{H} zum Bild hat.

Die Realisierung (c) der Orts- und Impulsoperatoren zieht die bekannten Kommutatoren

$$[\hat{q}, \hat{q}] = 0 \quad \text{und} \quad [\hat{p}, \hat{p}] = 0 \quad \text{respektive} \quad [\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \quad (1.32)$$

nach sich. Dabei spielt es keine Rolle, ob die beteiligten Operatoren explizit in Orts- bzw. Impulsdarstellung realisiert worden sind, denn das *Stone-von-Neumann-Theorem* [23] sichert die unitäre Äquivalenz aller irreduziblen Darstellungen zu, welche auf die Vertauschungsrelationen (1.32) führen. Infolgedessen ist jede Darstellung gleichermaßen geeignet, solange die Orts- und Impulsoperatoren irreduzibel wirken, d. h. es existiert *kein* invarianter Unterraum $U \subset \mathcal{H}$ außer $\{0\}$ derart, dass

$$\hat{q} : U \rightarrow U \quad \text{bzw.} \quad \hat{p} : U \rightarrow U \quad . \quad (1.33)$$

Mit dieser natürlichen Forderung implementiert man demnach lediglich die üblichen Vertauschungsrelationen der nichtrelativistischen Quantenmechanik auf \mathbb{R} .

Ruft man sich den Hamiltonoperator des freien Teilchens zurück in das Gedächtnis, so stellt sich unweigerlich die Frage, wie man den Ausdruck p^2 quantisieren solle und in der Regel bedient man sich Rechenregel $\widehat{p^2} = \hat{p}^2$. Die *von-Neumann-Regel* (d) versucht eine Antwort darauf zu geben, wie man für eine beliebige reellwertige Funktion vorgehen soll. Im Rahmen dieser Diplomarbeit sind wir bis jetzt lediglich auf Polynome in q oder p gestoßen und haben infolgedessen die von-Neumann-Regel ausschließlich für Funktionen der Form $h(t) = t^n$ angewandt. Nichtsdestoweniger stellt dieses Gebot die härteste Einschränkung im Katalog der Forderungen dar, soll es doch für *jede beliebige* Funktion $h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ gelten.

In ihrer Gesamtheit legen (a-d) die Dirac'sche Quantisierungsabbildung $\hat{\cdot}$ fest und man erwägt in der Regel keinen Widerspruch, immerhin scheinen diese Forderungen in ihrer *Klarheit* und *Natürlichkeit* die kanonische Wahl der Quantisierung einer klassischen Observable zu sein. Die Mehrheit der

³Wir werden später Quantisierungsmethoden anreißen, welche diese Brücke explizit und wissentlich einreißen.

auf tretenden Beispiele lässt sich auch ohne Probleme mithilfe dieser Vorschrift konsistent quantisieren, doch die bittere Erkenntnis wird sein, dass die Dirac'sche Quantisierungsabbildung in dieser allgemeinen Form *nicht* existiert! Dazu betrachte man die Funktion $f(q, p) = qp = \frac{1}{2}((q+p)^2 - q^2 - p^2)$ und exerziere stur die oben genannten Forderungen:

$$\begin{aligned} \widehat{qp} &\stackrel{(a)}{=} \frac{1}{2}(\widehat{(q+p)^2} - \widehat{q^2} - \widehat{p^2}) \stackrel{(d)}{=} \frac{1}{2}(\widehat{(q+p)^2} - \hat{q}^2 - \hat{p}^2) \\ &\stackrel{(a)}{=} \frac{1}{2}(\widehat{(\hat{q} + \hat{p})^2} - \hat{q}^2 - \hat{p}^2) = \frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}) \quad . \end{aligned} \quad (1.34)$$

Hingegen erhält man für die Funktion $g(q, p) = (qp)^2 = \frac{1}{2}((q^2 + p^2)^2 - q^4 - p^4)$ unter Zuhilfenahme der gleichen Rechenregeln den folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} \widehat{(qp)^2} &\stackrel{(a)}{=} \frac{1}{2}(\widehat{(q^2 + p^2)^2} - \widehat{q^4} - \widehat{p^4}) \stackrel{(d)}{=} \frac{1}{2}(\widehat{(q^2 + p^2)^2} - \hat{q}^4 - \hat{p}^4) \\ &\stackrel{(a)}{=} \frac{1}{2}(\widehat{(\hat{q}^2 + \hat{p}^2)^2} - \hat{q}^4 - \hat{p}^4) \stackrel{(d)}{=} \frac{1}{2}(\hat{q}^2\hat{p}^2 + \hat{p}^2\hat{q}^2) \quad . \end{aligned} \quad (1.35)$$

Mit diesen Zwischenergebnissen sollte aufgrund (d) die Identität $\widehat{(qp)^2} = \widehat{qp}^2$ gelten, jedoch erhält man mithilfe der kanonischen Vertauschungsrelationen aus (c) einen Widerspruch:

$$\begin{aligned} \widehat{qp}^2 - \widehat{(qp)^2} &= \frac{1}{4}(\hat{q}\hat{p}\hat{q}\hat{p} + \hat{q}\hat{p}\hat{p}\hat{q} + \hat{p}\hat{q}\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}\hat{p}\hat{q} - 2\hat{q}^2\hat{p}^2 - 2\hat{p}^2\hat{q}^2) \\ &= \frac{1}{4}(\hat{q}(\hat{q}\hat{p} + [\hat{p}, \hat{q}])\hat{p} + (\hat{p}\hat{q} + [\hat{q}, \hat{p}])\hat{p}\hat{q} + (\hat{q}\hat{p} + [\hat{p}, \hat{q}])\hat{q}\hat{p} \\ &\quad + \hat{p}(\hat{p}\hat{q} + [\hat{q}, \hat{p}])\hat{q} - 2\hat{q}^2\hat{p}^2 - 2\hat{p}^2\hat{q}^2) \\ &= \frac{1}{4}(-2i\hbar\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}\hat{q}\hat{p} + 2i\hbar\hat{p}\hat{q} - \hat{q}^2\hat{p}^2 - \hat{p}^2\hat{q}^2) \\ &= \frac{1}{4}(-2i\hbar\hat{q}\hat{p} + \hat{p}(\hat{p}\hat{q} + [\hat{q}, \hat{p}])\hat{q} + \hat{q}(\hat{q}\hat{p} + [\hat{p}, \hat{q}])\hat{p} + 2i\hbar\hat{p}\hat{q} - \hat{q}^2\hat{p}^2 - \hat{p}^2\hat{q}^2) \\ &= \frac{1}{4}(-3i\hbar\hat{q}\hat{p} + 3i\hbar\hat{p}\hat{q}) \\ &= \frac{3}{4}\hbar^2 \end{aligned} \quad (1.36)$$

Dieses Beispiel demonstriert eindrucksvoll, dass die Dirac'sche Quantisierungsabbildung in dieser Form nicht existiert, so natürlich die Forderungen (a-d) auch auf den ersten Blick auch zu wirken scheinen.

An dieser Stelle bieten sich einem verschiedene Auswege aus dem Dilemma: Wie wir gesehen haben, unterscheidet sich die Differenz beider quantisierten Ausdrücke lediglich um einen Term zweiter Ordnung in \hbar . Folgerichtig könnte man die Beziehung zwischen Kommutator und Poissonklammer derart modifizieren, dass höhere Terme von \hbar auftreten können wie z. B.

$$[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar\widehat{[f, g]} + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad \text{für alle } f, g \in \mathfrak{Obs}(M) \quad . \quad (1.37)$$

Diesen Weg versucht die *Deformationsquantisierung* [24] zu gehen und gibt damit die Forderung nach größtmöglicher geometrischer Äquivalenz zwischen klassischen und quantisierten Systemen auf. Weiter haben wir festgestellt, dass Observablen der Form q^n und p^n sich unproblematisch quantisieren lassen, währenddessen die Observable qp sofort auf einen Widerspruch führt. Darum ist die Frage legitim, ob sich jede klassische Observable überhaupt quantisieren lässt. Infolgedessen könnte man die Menge der Observablen $\mathfrak{Obs}(M)$ einschränken, so dass nicht mehr jede C^∞ -Funktion einen selbstadjungierten Operator als Pendant hat.

Beide Ansätze wirken auf den ersten Blick nicht befriedigend, auf der einen Seite wird offen mit dem Liealgebrahomomorphismus zwischen den Liealgebren gebrochen und auf der anderen Seite gesteht

man sich das Unvermögen ein, jede beliebige klassische Observable quantisieren zu können. An dieser Stelle gibt es keine mathematische Präferenz, den einen oder anderen Weg zu beschreiten, jedoch wollen wir die physikalische Anschauungen zu Rate ziehen. Philosophisch betrachtet gestaltet sich das Problem der Quantisierung deswegen so schwierig, weil man versucht mithilfe bereits gesicherten Wissens, der klassischen Mechanik, in neues Territorium vorzustoßen. Dabei lässt man oft außer Acht, dass verschiedene quantisierte Systeme existieren könnten, die den gleichen klassischen Limes besitzen. Im Rahmen einer physikalischen Betrachtung sind damit alle Modelle gleichwertig, solange das Experiment nicht eine Quantisierungsmethode auszeichnet. Die Wahl der Methode unterliegt somit einem Abwägungsprozess, welcher die Einschränkungen an die Dirac'sche Quantisierungsabbildung hierarchisch zu ordnen versucht.

Im Laufe dieser Diplomarbeit werden wir die Wahl treffen, das Bestehen des Liealgebrahomomorphismus zu fordern und die Menge der quantisierbaren Observablen einzuschränken. Diese Entscheidung ist konzeptionell und orientiert sich zunächst *nicht* am Experiment, sondern bedient sich einem einfachen Argument: Ist man zu der Überzeugung gekommen, dass Symmetrien und Gruppenwirkungen einen fundamentalen Zugang zum Verständnis physikalischer Phänomene ermöglichen, so ist der einzig entschlossene Weg, auch unter Betrachtung des phänomenalen Erfolges des Konzepts von Liegruppen in der Elementarteilchenphysik, die lokale Struktur von Liegruppen und damit Liealgebren unter allen Umständen erhalten zu wollen. Zusammenfassend lässt sich konstatieren, dass dieser Entscheidung der Glaube zugrundeliegt, dass unsere Welt von geometrischen Leitlinien geprägt wird.

An dieser Stelle wollen wir unsere Reise durch die Gefilde der nichtrelativistischen Quantenmechanik zunächst unterbrechen, die kleinen und größeren Erschwernisse bei der Formulierung einer konsistenten Quantenmechanik stets reflektierend und mit der Überzeugung im Sinne, dass es legitim ist, diese etablierte Theorie kritisch zu hinterfragen. Ein frommer Wunsch ist es, eine widerspruchsfreie Formulierung der nichtrelativistischen Quantenmechanik auf einem beliebigen, eventuell auch gekrümmten, Phasenraum zu realisieren und den hohen Ansprüchen geometrischer Anschauung stets gerecht zu werden. Aus diesem Grund wird das nächste Kapitel sich detailliert mit geometrischen Konzepten der Mathematik beschäftigen, um am Ende die Aspekte der symplektischen Geometrie, das Sprungbrett in die Welt quantisierter Systeme, präzise fassen zu können.

2 Mathematische Aspekte

Die Physik braucht als präzise Wissenschaft zur Beschreibung physikalischer Phänomene eine exakte Sprache, die Mathematik. Auch wir werden uns für einen mathematischen Rahmen entscheiden müssen, um die geometrischen Strukturen der Theorie offenlegen zu können. Der Übergang von klassischer Mechanik zur Quantenmechanik geschah historisch mithilfe des Hamiltonformalismus, welchen wir in einer geometrischen, modernen Form wiederholen wollen, doch vorher brauchen wir ein paar differentialgeometrische Grundlagen.

2.1 Der geometrische Zugang

In der modernen Physik und Mathematik haben sich eine Menge Formalismen etabliert, welche die *Symmetrien* eines Systems in den Vordergrund stellen. Dieses Bestreben stellt weniger den Grundsatz der Ästhetik in den Vordergrund, sondern versucht Aussagen über ein komplexes System unter Ausnutzung von Invarianzen zu treffen, weil in der Regel eine analytische Lösung unbekannt oder mathematisch unzugänglich ist. Ein besonders anschauliches Beispiel dafür ist z. B. die geschlossene, aber nicht exakte, Differentialform $\omega \in \Omega^1(\mathbb{R}^2)$, welche in Polarkoordinaten $F : (0, 2\pi) \rightarrow S^1 \subset \mathbb{R}^2$, $\varphi \mapsto (x, y) := (\cos \varphi, \sin \varphi)$ die bemerkenswert einfache Form $F^* \omega = d\varphi$ annimmt:

$$\omega = \frac{-y dx + x dy}{x^2 + y^2} \quad \text{bzw.} \quad F^* \omega = \frac{(-)^2 \sin^2 \varphi d\varphi + \cos^2 \varphi d\varphi}{\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi} = d\varphi \quad . \quad (2.1)$$

Die Integration in den neuen Koordinaten $\int_{(0, 2\pi)} d\varphi = 2\pi$ gestaltet sich natürlich um ein Vielfaches einfacher als in den kartesischen. Die sphärische Symmetrie des Problems kam uns zur Hilfe. Eng verknüpft mit diesem Sachverhalt ist die Gruppe der Drehungen in der Ebene $SO(2, \mathbb{R})$, eine kontinuierliche Gruppe, welche zugleich eine eindimensionale Mannigfaltigkeit ist.

In der Teilchenphysik und nichtrelativistischen Quantenmechanik spielen diese *Liegruppen* eine enorme Rolle. Sie legen die fundamentalen Wechselwirkungen fest und machen Aussagen über das Auftreten von Teilchen und Entartungsgrade gewisser Quantenzahlen. Daher lohnt es sich, sie zu studieren.

Ein ebenso wichtiger Grundsatz der Physik ist es, die Problemstellungen koordinatenfrei zu beschreiben, denn Physik darf sich nicht grundlegend ändern, nur weil man sie von einem anderen Standpunkt aus betrachtet. In der speziellen Relativitätstheorie trifft man darum oft den Tensorkalkül an, welcher sich optisch in erster Linie von der klassischen Mechanik darin unterscheidet, dass man die Indizes nicht nur unten sondern auch oben an den Objekten verteilt z. B. die Matrixeinträge einer Lorentztransformation Λ^{μ}_{ν} . Das wechselseitige Auftreten des gleichen Index in einem Produkt sichert dann die Invarianz unter gewissen Transformationen zu und wird darum streng mit dieser Thematik in Verbindung gebracht. Dabei unterscheidet sich die klassische Mechanik an diesem Punkt im wesentlichen *nicht* von der speziellen Relativitätstheorie, es ist lediglich ein historisches Relikt. Mehr noch ist die Frage berechtigt, warum man eigentlich die Matrixeinträge der Transformation Λ explizit hinschreibt, immerhin bedeutet das, dass man sich bereits für ein spezielles Koordinatensystem entschieden hat und damit per Konstruktion eine der fundamentalen Ansprüche der Theorie verletzt. Die differentialgeometrische Beschreibung ist darum der einzig konsequente Weg, wenn es um das Auffinden grundlegender Strukturen in einer Theorie geht, sie eröffnet eine abstrakte Beschreibung von Punktmenge, ohne den Begriff der Differenzierbarkeit zu verlieren, und implementiert auf eine geschickte Art und Weise die Wirkung von Gruppen auf ihnen. In dem Sinne frönen wir der weisen Erkenntnis des Astronomen Johannes Kepler und konstatieren: *Ubi materia, ibi geometria.*

2.2 Mannigfaltigkeiten und glatte Abbildungen

In diesem Abschnitt wollen wir uns thematisch stark an das hervorragende Buch über differenzierbare Mannigfaltigkeiten von John M. Lee [25] anlehnen und die Begriffe Mannigfaltigkeit und differenzierbare Abbildungen herausarbeiten. Die mathematische Einführung in Stefan Waldmanns Fachbuch über Deformationsquantisierung [24] bietet ebenso einen exzellenten Überblick. Gleichzeitig bezwecke ich damit, die Notation zu fixieren.

Gewöhnlich erfordert der Begriff der Differenzierbarkeit eine Vorstellung vom Begriff der offenen Umgebung, welcher präzise im Konzept der Topologie gefasst ist:

Definition 2.2.1. (Topologie) Seien M eine Menge, \mathcal{I} eine Indexmenge und $\mathcal{T} = \{U_i \subset M \mid i \in \mathcal{I}\}$ eine Familie von Teilmengen aus M , dann heißt das Paar (M, \mathcal{T}) (auch kurz: M) topologischer Raum genau dann, wenn

- (i) $\emptyset, M \in \mathcal{T}$
- (ii) $\bigcup_{j \in \mathcal{J}} U_j \in \mathcal{T} \quad \forall \mathcal{J} \subset \mathcal{I}$ (beliebige Vereinigungen)
- (iii) $\bigcap_{j \in \mathcal{J}} U_j \in \mathcal{T} \quad \forall \mathcal{J} \subset \mathcal{I} \text{ und } \#\mathcal{J} < \infty$ (endliche Schnitte)

Die Familie \mathcal{T} von Teilmengen wird **Topologie** oder **Familie der offenen Mengen** genannt.

Obwohl es vielfältige Möglichkeiten gibt, eine Topologie zu definieren, wollen wir nur schnell die gebräuchlichsten erwähnen:

- Die kleinstmögliche und damit gröbste Topologie wäre die **triviale** Wahl $\mathcal{T}_{\text{trivial}} = \{M, \emptyset\}$, in der nur die Menge selbst und die leere Menge offen sind. Abgeschlossen sind per Definition die mengentheoretischen Komplemente der offenen Mengen in M – in diesem speziellen Fall die Topologie selbst.
- Die umfassendste und damit feinste Wahl heißt **diskrete Topologie** $\mathcal{T}_{\text{diskret}} = \mathcal{P}(M)$. Sie entspricht der Potenzmenge von M und damit ist jede Teilmenge von M offen. Entsprechend ist auch jede Teilmenge als Komplement einer Teilmenge in M abgeschlossen.
- Verfügt man über eine Metrik, so ist es möglich, offene Kugeln $B_\varepsilon(x_0) = \{x \mid d(x_0, x) < \varepsilon\}$ für ein $\varepsilon > 0$ derart zu definieren, dass die **metrische Topologie** der üblichen physikalischen Anschauung $\mathcal{T}_{\text{metrisch}} = \{U \subseteq M \mid \forall x_0 \in U \exists \varepsilon > 0 B_\varepsilon(x_0) \subseteq U\}$ genügt.

Für uns soll, wenn nicht anders erwähnt, immer die metrische Topologie maßgebend sein, da der Physiker in der Regel über ein Skalarprodukt verfügt, welches eine Metrik via $d(x, y)^2 = \langle x - y \mid x - y \rangle$ induziert. Mit dem Wissen über offene Umgebungen und Nachbarschaft kann man nun zur Definition der Stetigkeit übergehen.

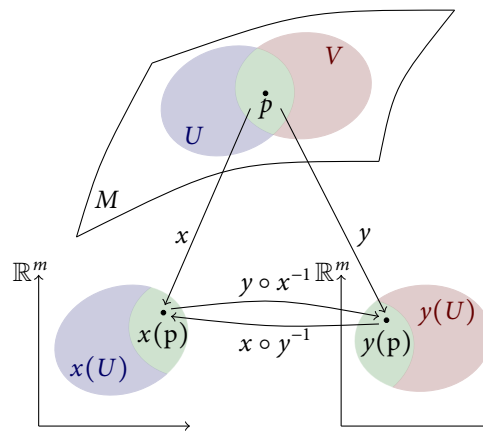
Definition 2.2.2. (Stetigkeit) Eine Abbildung zwischen zwei topologischen Räumen $f : M \rightarrow N$ heißt **stetige Abbildung**, wenn stets das Urbild einer jeden offenen Menge offen ist.

Man bemerke: Hat der Urbildraum die diskrete Topologie, so ist jede Abbildung stetig. Eine invertierbare, stetige Abbildung, deren Inverses ebenso stetig ist, wird **Homöomorphismus** genannt und bildet also immer offene Mengen auf offene Mengen ab. Ginge man von einem komplizierten geometrischen Objekt M aus, welches in seiner Komplexität schwer zu erfassen sei, so könnte man auf die Idee kommen, es auf ein einfacheres Gebilde abzubilden, solange man die lokale Eigenschaft der Offenheit beibehalte. Genau diese Überlegung führt direkt auf die Definition der topologischen Mannigfaltigkeit.

Definition 2.2.3. (topologische Mannigfaltigkeit) Einen Hausdorffraum mit abzählbarer topologischer Basis und lokal euklidischer Struktur nennt man **topologische Mannigfaltigkeit**.

Hier heißt hausdorffsch, dass wir zu allen unterscheidbaren Punkten $p, p' \in M$ stets zwei Umgebungen finden, so dass $p \in U, p' \in U'$ und $U \cap U' = \emptyset$, d. h. zwei paarweise unterscheidbare Punkte besitzen stets disjunkte, offene Umgebungen. Die nächste Forderung nach der Abzählbarkeit der topologischen Basis, welche auch **das zweite Abzählbarkeitsaxiom** genannt wird, impliziert, dass man die Topologie des Raumes M aus einer abzählbaren Anzahl offener Umgebungen erzeugen kann. Diese Eigenschaft benutzt man immer dann, wenn man die Mannigfaltigkeit in Partitionen aufteilen möchte wie z. B. bei der Zerlegung der Eins. Die letzte und wichtigste Forderung an eine topologische Mannigfaltigkeit ist das Merkmal, dass jeder Punkt eine Umgebung besitzt, welche lokal wie der \mathbb{R}^m aussieht. Mathematisch fordert man für alle $p \in U \subseteq M$ einen Homöomorphismus $x : U \rightarrow x(U) \subseteq \mathbb{R}^m$. Als Beispiel für eine lokal euklidische Struktur soll uns die Erde als idealisierte Sphäre dienen, welche aus der Nähe flach wirkt, so dass man für ausreichend kleine Regionen diese als Ebene annähern kann.¹

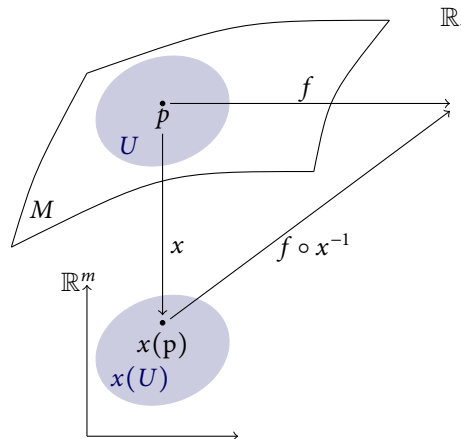
In der folgenden Abbildung soll das Konzept der lokal euklidischen Struktur ein wenig mehr beleuchtet werden:



Angenommen man findet für zwei offene Umgebungen U und V als Teilmenge einer topologischen Mannigfaltigkeit M die zugehörigen Homöomorphismen in den \mathbb{R}^m , so dass M lokal flach aussieht, dann nennt man die Tupel (x, U) bzw. (y, V) in Anlehnung an einen Weltatlas, welcher flache Bilder der gekrümmten Erde beinhaltet, **Karten**. Die Bilder $x(p)$ respektive $y(p)$ eines Elementes $p \in M$ werden **Koordinaten** des Punktes p genannt. Liegt p in einem nichtleeren Schnitt aus U und V , so beschreiben $x(p)$ bzw. $y(p)$ das gleiche geometrische Objekt, nämlich den Punkt p , jedoch in verschiedenen Koordinatensystemen. Die **Übergangsabbildungen** $y \circ x^{-1}$ respektive $x \circ y^{-1}$ sind ebenso Homöomorphismen, da Kompositionen stetiger Abbildungen stets wieder stetig sind. Auf diesem Level haben wir demnach eine Möglichkeit gefunden, komplizierte geometrische Objekte lokal derart zu verformen, dass sie in einer Karte durch Vektoren im \mathbb{R}^m beschrieben werden können. Jedoch fehlt uns jegliche Intuition, wie man auf einer topologischen Mannigfaltigkeit differenzieren sollte – mehr noch, wie man unabhängig von der gewählten Karte einen Differentialkalkül zu entwickeln vermag.

Der denkbar einfachste Weg, eine Aussage bezüglich der Differenzierbarkeit einer beliebigen Abbildung $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ zu treffen, eröffnet sich einem, indem man die Differenzierbarkeit ihrer Koordinatendarstellung $f \circ x^{-1} : x(U) \rightarrow \mathbb{R}$ in einer Karte (x, U) prüft. Der Definitionsbereich der Koordinatendarstellung $x(U)$ ist eine Teilmenge des \mathbb{R}^m und somit können wir die gewohnten Rechenregeln aus der klassischen Vektoranalysis anwenden und den Begriff der Differenzierbarkeit intuitiv vererben.

¹Ferner brauchte die Menschheit eine enorme Zeitspanne, um zu realisieren, dass die Erde eben keine flache Scheibe ist, welches als Indiz für die Rechtfertigung dieser Anschauung herhalten soll.



Diese Definition der Differenzierbarkeit ist vorerst abhängig von der gewählten Karte und stellt uns gegebenenfalls vor das Problem, dass eine Abbildung in einer Karte (x, U) differenzierbar ist, während sie diese Eigenschaft in einer anderen Karte (y, V) nicht innehat. Dieser Unebenheit kann man mithilfe der einfachen Beobachtung begegnen, dass die Koordinatendarstellung der Funktion f in der Karte (y, V) sich über die Übergangsabbildung auf der Schnittmenge $U \cap V$ in der ursprünglichen Karte (x, U) darstellen lässt:

$$f \circ y^{-1}|_{y(U \cap V)} = (f \circ x^{-1})|_{x(U \cap V)} \circ (x \circ y^{-1})|_{y(U \cap V)} \quad . \quad (2.2)$$

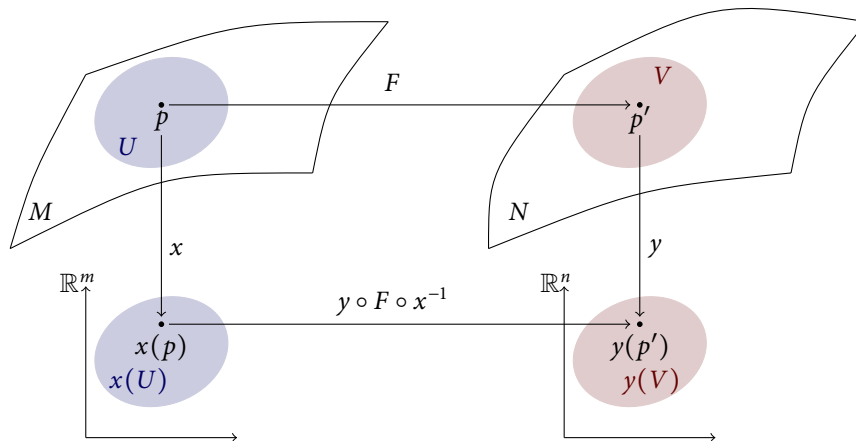
Offensichtlich ist die Koordinatendarstellung der gleichen Funktion in der anderen Karte (x, U) genau dann ebenso differenzierbar, wenn die Übergangsabbildung $x \circ y^{-1}$ ein Diffeomorphismus ist. Auf diese Art und Weise ist es demnach möglich, mithilfe der Übergangsabbildungen zwischen den Karten eine **differenzierbare Struktur** zu definieren. Sind die offenen Umgebungen zweier Karten disjunkt oder die Übergangsabbildungen auf ihren nichtleeren Schnitt ein Diffeomorphismus, so sagt man, seien die Karten zueinander **kompatibel**. Die Gesamtheit *aller* zueinander kompatibler Karten wird **maximaler Atlas** \mathcal{A} genannt und legt die Form des Differenzierens eindeutig fest.

Die Korrespondenz zwischen der betreffenden Namensgebung und einem Weltatlas als Sammlung von Landkarten ist nicht zufällig: Stellt man sich die Erde als idealisierte Sphäre vor und erlangt durch Projektionen, welche die Rolle der Kartenabbildungen übernehmen, zweidimensionale Bilder in der Ebene von einer bestimmten Region, die mit der entsprechenden offenen Umgebung identifiziert wird, so betrachten wir zwei Karten genau dann als kompatibel, wenn man sie entsprechend sauber aneinanderheften kann oder sie Bereiche ohne Überlapp wiedergeben. Es tritt auch zu Tage, dass es nicht immer möglich ist, die gesamte Mannigfaltigkeit ausschließlich durch eine Karte abzubilden. Der Versuch, die gesamte Erdoberfläche auf eine Ebene zu projizieren, scheitert meistens daran, dass die Projektionsabbildung für einen Punkt nicht definiert ist. Diese Beobachtung macht auch topologisch Sinn, denn die Existenz eines globalen Homöomorphismus von einer Kugel auf die Ebene würde implizieren, dass die kompakte Sphäre und die nichtkompakte Ebene topologisch äquivalent sind.

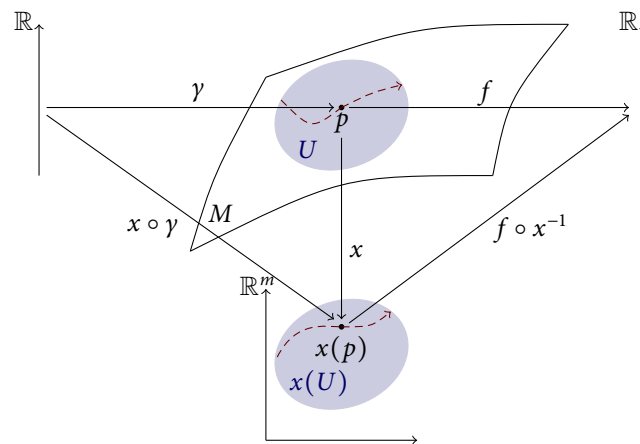
Definition 2.2.4. (Differenzierbarkeit) Seien M und N zwei Mannigfaltigkeiten der Dimension m respektive n mit den Karten (x, U) bzw. (y, V) , dann bezeichnet man eine Abbildung $F : M \rightarrow N$ genau dann als **differenzierbar**, wenn ihre Koordinatendarstellung $y \circ F \circ x^{-1} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ differenzierbar im Sinne der klassischen Vektoranalysis ist.

Für den Spezialfall $N = \mathbb{R}^m$ mit der globalen Karte $(y = \text{id}, V = \mathbb{R}^m)$ folgt sofort, dass jede Karte (\tilde{x}, \tilde{U}) von M wegen der Differenzierbarkeit der Übergangsabbildungen differenzierbar ist. Dazu setze man die Abbildung F mit der Kartenabbildung \tilde{x} gleich und bemerke, dass die Übergangsabbildung die Koordinatendarstellung der Kartenabbildung selbst ist, denn $\psi = \text{id} \circ \tilde{x} \circ x^{-1}$. Damit ist \tilde{x} differenzierbar im Sinne der Definition 2.2.4 vermöge der Differenzierbarkeit von ψ .

In der folgenden Abbildung ist der gegebene Sachverhalt zur genaueren Studie graphisch illustriert:



Von hier an haben wir Klarheit, wenn es um die Differenzierbarkeit von Abbildungen auf Mannigfaltigkeiten geht, jedoch fehlen uns noch die üblichen Konzepte aus der Vektoranalysis wie Kurven, Tangentialvektoren oder Richtungsableitungen. Eine differenzierbare Kurve γ auf einer Mannigfaltigkeit M lässt sich als Abbildung auf einem reellwertigen Intervall nach M angeben mit der Eigenschaft, dass ihre Koordinatendarstellung $x \circ \gamma$ glatt^2 ist. Äquivalent kann man diese Eigenschaft unabhängig von der Wahl einer Karte dadurch charakterisieren, dass die Komposition $f \circ \gamma$ für alle glatten Funktionen $f: M \rightarrow \mathbb{R}$ eine differenzierbare Abbildung beschreibt. Diese Unabhängigkeit vom Koordinatensystem ist eine der Schlüsseleigenschaften dieses Formalismus und begünstigt vehement die physikalische Anschauung, Naturphänomene unabhängig vom Standpunkt beschreiben zu wollen.



Offensichtlich ist der genaue Wert der Komposition $(f \circ \gamma)(t) = (f \circ x^{-1}) \circ (x \circ \gamma)(t)$ für ein $t \in \mathbb{R}$ in jeder Karte der gleiche. Mehr noch scheint es nicht von Belang zu sein, ob man Rechnungen explizit in Karten ausführt und sich dazu exzessiv der Koordinatendarstellungen der beteiligten Abbildungen bedient oder nicht. Der eigentliche Nachteil einer Rechnung in Karten ist der Eigenschaft geschuldet, dass sie nur im Definitionsbereich der entsprechenden offenen Umgebung gilt und eigentlich die Unabhängigkeit vom gewählten Koordinatensystem jeweils explizit nachgerechnet werden müsste, weshalb wir so oft wie möglich frei von Koordinaten, sprich frei von Karten, rechnen.

Angenommen man betrachte die glatte Funktion f an der Stelle p und wäre an der Veränderung ihres Funktionswertes interessiert, wenn man das Argument in geringfügiger Art und Weise in eine bestimmte Richtung verschiebt, so implementiert man das Konzept der **Richtungsableitung**. Sei nun γ eine Kurve in M durch den Punkt p mit der Eigenschaft $\gamma(0) = p$, dann repräsentiert die Ableitung der

²Von hier an, solange nicht anders erwähnt, sei mit *glatt* respektive *differenzierbar* stets eine C^∞ -Abbildung gemeint.

Komposition $f \circ \gamma$ an der Stelle 0 die **Orbitalableitung** der Funktion f an der Stelle p in Richtung der Kurve γ . Dieser Ausdruck hat in einer beliebigen Karte die folgende Form:

$$\frac{d}{dt}\Big|_0 f \circ \gamma(t) = \frac{d}{dt}\Big|_0 (f \circ x^{-1}) \circ (x \circ \gamma)(t) = \sum_{i=1}^m \frac{\partial}{\partial x^i}\Big|_{x(p)} (f \circ x^{-1}) \underbrace{\frac{d}{dt}\Big|_0 (x \circ \gamma)^i(t)}_{:=v^i} \quad (2.3)$$

Der linke Faktor in der Summe ist lediglich der euklidische Gradient der Koordinatendarstellung von f und der rechte Faktor entspricht der Ableitung der Kurve γ in einer Karte, sprich beide Objekte werden durch m reelle Zahlen charakterisiert – das totale Analogon zur Richtungsableitung der gewöhnlichen Vektoranalysis $\langle \nabla(f \circ x^{-1}) | \mathbf{v} \rangle$. Entsprechend legt die Kurve γ auch die Koeffizienten v^i und damit den Vektor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^m$ in einer bestimmten Karte (x, U) fest, so dass es vollkommen legitim ist, die Kurve γ in diesen Rahmen mit dem Vektor \mathbf{v} zu assoziieren. Berücksichtigt man noch die Unbestimmtheit, dass verschiedene Kurven auf das gleiche Ergebnis führen können, so identifiziert man einen Tangentialvektor V_p an der Stelle $p \in M$ mit der Äquivalenzklasse aller differenzierbaren Kurven, welche in einer Umgebung um p übereinstimmen³

$$V_p f := [\gamma]_p f \equiv \frac{d}{dt}\Big|_0 f \circ \gamma(t) = \sum_{i=0}^m v^i \frac{\partial}{\partial x^i}\Big|_{x(p)} (f \circ x^{-1}) \quad (2.4)$$

Mehr noch ist der Isomorphismus zwischen den Vektoren $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^m$ und der Vorschrift zur Richtungsableitung, den sogenannten **Tangentialvektoren am Punkt p** , offensichtlich gegeben durch:

$$I_p : \mathbb{R}^m \rightarrow T_{x(p)}\mathbb{R}^m, \mathbf{v} \mapsto \sum_{i=0}^m v^i \frac{\partial}{\partial x^i}\Big|_{x(p)} =: \sum_{i=0}^m v^i \partial_i^p \quad (2.5)$$

Infolgedessen spannt die Menge aller **Basisfelder** $I_p(e_i) \equiv \partial_i^p$ jeweils einen Vektorraum der Dimension m an jedem Punkt der Mannigfaltigkeit M auf. Möchte man sich der Kartenabbildungen x entledigen, so kann man die Menge aller differenzierbaren Kurven durch den Punkt p zu einem Vektorraum, namentlich $T_p M$, erheben, indem man die Addition der zugrundeliegenden abelschen Gruppe und Multiplikation mit einem Körperelement in einer natürlichen Form definiert:

$$([\gamma]_p + [\tilde{\gamma}]_p)f = \frac{d}{dt}\Big|_0 (f \circ \gamma + f \circ \tilde{\gamma})(t) \quad \text{bzw.} \quad (\lambda[\gamma]_p)f = \frac{d}{dt}\Big|_0 (f \circ \gamma)(\lambda t) \quad \forall \lambda \in \mathbb{R} \quad (2.6)$$

Weiter rechnet man sehr einfach nach, dass ein Tangentialvektor zusätzlich die Leibnizregel erfüllt und damit als **Derivation am Punkt p** bezeichnet werden kann, denn für alle $f, g \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ gilt:

$$\begin{aligned} [\gamma]_p(fg) &= \frac{d}{dt}\Big|_0 (f \circ \gamma)(t) \cdot (g \circ \gamma)(0) + (f \circ \gamma)(0) \cdot \frac{d}{dt}\Big|_0 (g \circ \gamma)(t) \\ &= ([\gamma]_p f) \cdot g(p) + f(p) \cdot ([\gamma]_p g) \quad (2.7) \end{aligned}$$

Zusammenfassend wollen wir von nun an einen Tangentialvektor entweder als **Äquivalenzklasse von Kurven durch den Punkt p** oder als **Element des Vektorraums der Derivationen am Punkt p** bezeichnen. Es gibt noch eine dritte Möglichkeit der Definition, welche das Transformationsverhalten der Koeffizienten v^i unter einem Koordinatenwechsel zu Rate zieht. Alle drei Möglichkeiten der Definition eines Tangentialvektors sind für endlichdimensionale Mannigfaltigkeiten äquivalent, welches im Lehrbuch über Vektoranalysis von Klaus Jänich [26] ausführlich demonstriert wird.

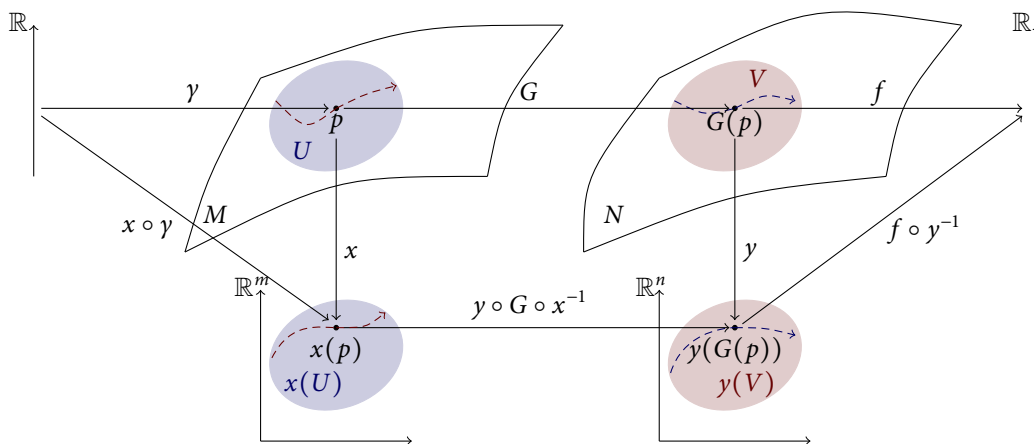
Nichtsdestoweniger kommen wir nicht daran vorbei, die Wirkung einer allgemeinen, glatten Punkttransformation $G : M \rightarrow N$ zwischen differenzierbaren Mannigfaltigkeiten der Dimension m respektive n auf Tangentialvektoren zu untersuchen: Sei dazu $f : N \rightarrow \mathbb{R}$ eine differenzierbare Funktion auf N und $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow M$ eine differenzierbare Kurve auf M mit der Eigenschaft $\gamma(0) = p$, dann ist der intuitivste Weg, eine Kurve durch N mithilfe der Komposition $\tilde{\gamma} := G \circ \gamma$ zu definieren.

³Ferner würde es ausreichen, wenn man sich lediglich auf Funktionen beschränkte, welche auf offenen Umgebungen um p definiert sind, die sogenannten **Funktionskeime**. Wir wollen an dieser Stelle jedoch auf ihre Einführung verzichten.

Definition 2.2.5. (Pushforward) Der **Pushforward** eines Tangentialvektor, d. h. einer Äquivalenzklasse von Kurven, mithilfe einer glatten Funktion $G : M \rightarrow N$ erfolgt durch das Abbilden der Repräsentanten, so dass für alle $\gamma \in [\gamma]_p$ und $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ die folgende Relation gilt:

$$(G_*[\gamma]_p)f := [G \circ \gamma]_{G(p)}f = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 f \circ (G \circ \gamma)(t) = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 (f \circ G) \circ \gamma(t) = [\gamma]_p(f \circ G) \quad . \quad (2.8)$$

Die Abbildung $G_* : T_pM \rightarrow T_{G(p)}N$ wird **Differential**, **Tangentialabbildung** respektive **Pushforward** mithilfe der Funktion G genannt⁴ und bildet die zugehörigen Tangentialvektorräume ineinander ab, d. h. sie weist einer Derivation am Punkt $p \in M$ einen Tangentialvektor am Punkt $G(p) \in N$ zu, indem sie die Äquivalenzklasse der differenzierbaren Kurven durch Komposition mit der Abbildung G nach N schiebt.



Der Pushforward eines Tangentialvektors am Punkt p lässt sich mithilfe von Karten auch explizit als Koordinatenausdruck angeben:

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_0 f \circ G \circ \gamma(t) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial y^j} \Big|_{y(G(p))} (f \circ y^{-1}) \underbrace{\frac{\partial}{\partial x^i} \Big|_{x(p)} (y \circ G \circ x^{-1})^j}_{:=J^j_i} \underbrace{\left. \frac{d}{dt} \right|_0 (x \circ \gamma)^i(t)}_{:=v^i} \quad . \quad (2.9)$$

Dieser schlichten Anwendung der Kettenregel liest man direkt das Transformationsverhalten der Koeffizienten v^i unter Koordinatenwechsel ab. Die neuen Koeffizienten des vorwärts geschobenen Tangentialvektors $[G \circ \gamma]_{G(p)}$ am Punkt $G(p)$ errechnen sich aus den Koeffizienten der ursprünglichen Tangentialderivation, welche zuvor mit der Jacobimatrix der Koordinatendarstellung von G am Punkt p multipliziert worden sind, sprich:

$$G_* : T_pM \rightarrow T_{G(p)}N, \quad \sum_{i=1}^m v^i \partial_i^p \mapsto \sum_{j=1}^n w^j \partial_j^{G(p)} := \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (J^j_i v^i) \partial_j^{G(p)} \quad . \quad (2.10)$$

Von hier an wollen wir den Tangentialraum in Karten $T_{x(p)}\mathbb{R}^m$ stets mit dem abstrakten Tangentialraum T_pM identifizieren, weil wir aufgrund der Eigenschaft, dass die Karten stets Diffeomorphismen sind, immer für alle $p \in M$ eine Isomorphie durch den Pushforward

$$x_* : T_pM \rightarrow T_{x(p)}\mathbb{R}^m \quad (2.11)$$

herstellen können. Beachtet man, dass der Tangentialraum $T_{x(p)}\mathbb{R}^m$ stets isomorph zu einem \mathbb{R}^m ist, so begründet sich die Aussage, dass der Tangentialraum einer Mannigfaltigkeit an einem Punkt p lokal

⁴In der Literatur wird die Tangentialabbildung auch oft mit T_pG oder dG bezeichnet.

wie die zugrundeliegende Mannigfaltigkeit aussieht. Insbesondere fallen somit die Dimensionen beider Räume zusammen. Wenn es nicht weiter von Belang ist, wollen wir aufgrund der Unabhängigkeit des Formalismus vom gewählten Koordinatensystem ebenso die Kartenabbildungen in Zukunft unterdrücken und uns auf den abstrakten Vektorraum $T_p M$ beschränken, so dass

$$[\gamma]_p f = V_p f \equiv \sum_{i=1}^m v^i \partial_i^p f \quad \text{mit} \quad V_p \in T_p M \quad . \quad (2.12)$$

Die Tangentialabbildung ist offensichtlich ein Homomorphismus, d. h. es gilt für zwei geeignete Funktionen g und \tilde{g} die Beziehung $(G \circ \tilde{G})_* = G_* \tilde{G}_*$, denn

$$\left((G \circ \tilde{G})_* [\gamma]_p \right) f = \left((G \circ \tilde{G}) \circ \gamma \right)_{G \circ \tilde{G}(p)} f = \left(G_* [\tilde{G} \circ \gamma]_{\tilde{G}(p)} \right) f = \left(G_* \tilde{G}_* [\gamma]_p \right) f \quad , \quad (2.13)$$

welche in der gewöhnlichen Vektoranalysis als **Kettenregel** bezeichnet wird.

2.3 Das Tangential- und das Kotangentialbündel

Die Haltung, die Tangential(vektor)räume für verschiedene Punkte $p \in M$ getrennt behandeln zu wollen, mündet in der Definition des Tangentialbündels als disjunkte Vereinigung der Tangentialräume:

Definition 2.3.1. (Tangentialbündel) Die disjunkte Vereinigung aller Tangentialräume $T_p M$ der zugrundeliegenden glatten Mannigfaltigkeit M

$$TM := \coprod_{p \in M} T_p M := \bigcup_{p \in M} (\{p\} \times T_p M) \quad (2.14)$$

wird **Tangentialbündel** oder **Geschwindigkeitsphasenraum** genannt.

Das Tangentialbündel ist selbst auf eine natürlich Art und Weise eine glatte Mannigfaltigkeit der Dimension $2m$. Betrachtet man die Mannigfaltigkeit M lokal in einer Karte (x, U) , so ist die Koordinatendarstellung des Punktes $p \in U$ durch sein Bild unter der Kartenabbildung x gegeben. Ferner kann man, wie wir gesehen haben, Äquivalenzklassen von Kurven direkt mit den Koeffizienten v^i der Tangentialvektoren in Beziehung setzen. Infolgedessen ist der natürlichste Weg, eine Karte von TM zu konstruieren, indem man ein abstraktes Element $(p, V_p) \in TM$ in den \mathbb{R}^{2m} wie folgt abbildet:

$$\chi: W \subseteq TM \rightarrow \chi(W) \subseteq \mathbb{R}^{2m}, \quad (p, V_p) \mapsto \chi(p, V_p) := (x^1(p), \dots, x^m(p), v^1, \dots, v^m) \quad . \quad (2.15)$$

Genauer noch fordert man, dass die offene Teilmenge $W \in TM$ mit dem Urbild der kanonischen Projektion auf den ersten Tupeleintrag

$$\pi: TM \rightarrow M, \quad (p, V_p) \mapsto \pi((p, V_p)) = p \quad (2.16)$$

bezüglich der offenen Umgebung U von p zusammenfällt, sprich $W = \pi^{-1}(U)$. Man bemerke zudem, dass die Projektion π unabhängig von der Karte durch die vorangegangene Gleichung definiert wird und damit einen globalen Charakter innehat.

Ferner betrachte man nun eine zweite Karte (y, V) von M derart, dass p in der Schnittmenge der assoziierten offenen Umgebungen $U \cap V$ liegt und ψ die induzierte Kartenabbildung des Bündels bezüglich der neuen Karte ist. Die Übergangsabbildung zwischen beiden Karten des Tangentialbündels ist bereits bekannt: Die Koordinaten x^i transformieren entsprechend der Übergangsabbildung $y \circ x^{-1}$ der ursprünglichen Mannigfaltigkeit M und die Koeffizienten der Tangentialvektoren weisen das bekannte Verhalten bezüglich der Multiplikation mit der Jacobimatrix auf:⁵

$$\begin{aligned} \psi \circ \chi^{-1}: \quad \chi(\pi^{-1}(U) \cap \pi^{-1}(V)) &\rightarrow \psi(\pi^{-1}(U) \cap \pi^{-1}(V)) \\ (x^1(p), \dots, x^m(p), v^1, \dots, v^m) &\mapsto (y^1(p), \dots, y^m(p), J^1_j v^j, \dots, J^m_j v^j) \quad . \end{aligned} \quad (2.17)$$

⁵Von nun an wollen wir aus Gründen der Übersicht das wechselseitige Auftreten eines Index in einem Produkt als Anweisung lesen, über diesen zu summieren – die sogenannte **Einstein'sche Summenkonvention**.

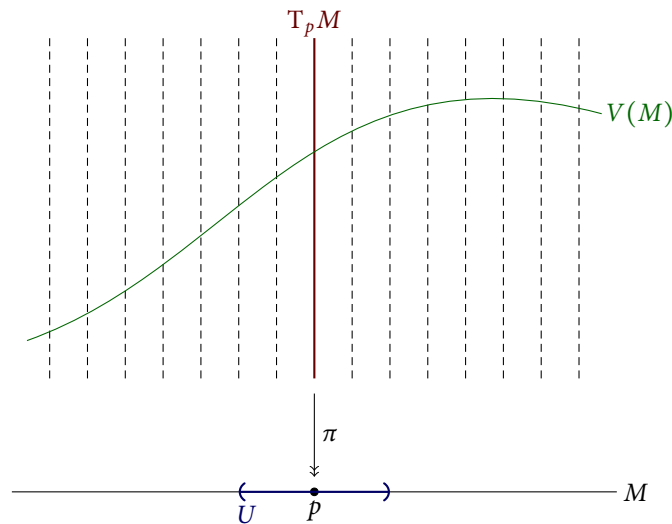
Aufgrund der Invertierbarkeit der Jacobimatrix⁶ J und der Linearität in den zweiten m Einträgen erfüllt die Übergangsabbildung $\psi \circ \chi^{-1}$ die geforderten Kriterien – das Tangentialbündel TM ist eine $2m$ -dimensionale, glatte Mannigfaltigkeit.

Will man eine differenzierbare Abbildung V angeben, welche jedem Fußpunkt $p \in M$ einen Tangentialvektor V_p aus der **Faser** zuordnet, so ist das aufgrund der Surjektivität der kanonischen Projektion π stets möglich. Eine differenzierbare Rechtsinverse der Projektion, welche der Gleichung $\pi \circ V = \text{id}_M$ genügt, wird **Vektorfeld** oder **glatter Schnitt in das Tangentialbündel** genannt:

$$V : M \rightarrow TM, p \mapsto V(p) := (p, V_p) \equiv V_p \quad . \quad (2.18)$$

Anschaulich finden Vektorfelder ihre Korrespondenz in der Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung. Eine explizite Differentialgleichung der Form $\dot{x} = f(x, t)$ stellt die Beziehung zwischen einem Ort $x(p)$ und seiner Geschwindigkeit $\dot{x}(p, t) \equiv v$ her. Die entstehenden Geschwindigkeitsfelder in den Phasendiagrammen sind nichts anderes als die zugehörigen Vektorfelder.

In der folgenden Abbildung ist der Aufbau eines Tangentialbündels schematisch dargestellt, mit der Intention, das Wort *Bündel* als Zusammenfassung der Fasern T_pM zu illustrieren. Man stelle sich dazu naiv einen Besen vor, dessen Fasern die Tangential(vektor)räume T_pM zu allen Punkten p einer sogenannten **Basismannigfaltigkeit** M darstellen, welche zu einer Quaste zusammengefasst worden sind:



Das gesamte Tangentialbündel TM wird auch **Totalraum** des entsprechenden **Vektorbündels** genannt und das Vektorfeld V kann tatsächlich als Schnitt in diesen visualisiert werden: Man schneidet möglichst differenzierbar in das Bündel und identifiziert die Schnittkontur mit dem Vektorfeld – ein Punkt auf der Schnittkontur ist dann entsprechend ein Tangentialvektor. Glatte Vektorfelder auf M werden oft mit dem Symbol $\mathfrak{X}(M)$ bzw. explizit als glatter Schnitt in das Tangentialbündel $\Gamma^\infty(M, TM)$ bezeichnet.

Die Wirkung eines Vektorfeldes V auf eine glatte Funktion $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ erfolgt Punkt für Punkt derart, dass die resultierende Funktion $g := Vf$ als die punktweise Zuordnung $g : M \rightarrow \mathbb{R}, p \mapsto V_p f$ zu verstehen ist. Mithilfe dieser Vorschrift ist es nun auch möglich, den **Kommutator** zweier Vektorfelder V und W zu definieren.

Definition 2.3.2. (Kommutator zweier Vektorfelder) Für je zwei Vektorfelder $V, W \in \mathfrak{X}(M)$ wird die Differenz der wechselseitigen Hintereinanderausführung **Kommutator** genannt:

$$[\cdot, \cdot] : \mathfrak{X}(M) \times \mathfrak{X}(M) \rightarrow \mathfrak{X}(M), [V, W]f \mapsto V(Wf) - W(Vf) \quad \forall f \in C^\infty(M, \mathbb{R}) \quad . \quad (2.19)$$

⁶Die Übergangsabbildung $\psi \circ \chi^{-1}$ ist ein Diffeomorphismus und damit auch ihr Differential.

Der Kommutator $[V, W]$ ist tatsächlich ein Vektorfeld im Gegensatz zu seinen Teilschritten V und W , da er punktweise die Leibnizregel erfüllt, also eine glatte Zuweisung von Tangentialderivationen ist. Außerdem rechnet man leicht nach, dass je drei beliebige Vektorfelder $X, Y, Z \in \mathfrak{X}(M)$ die **Jacobiidentität** erfüllen und damit den Vektorraum der Vektorfelder zu einer Liealgebra erheben:

$$[X, [Y, Z]]f + [Y, [Z, X]]f + [Z, [X, Y]]f = 0 \quad \forall f \in C^\infty(M, \mathbb{R}) \quad . \quad (2.20)$$

Die Definition des Pushforwards eines Vektorfeldes V von einer Mannigfaltigkeit M mithilfe einer Funktion $G : M \rightarrow N$ auf eine andere Mannigfaltigkeit N bietet sich analog zur punktweisen Vorgehensweise der Tangentialderivationen an, jedoch muss man Vorsicht walten lassen: Ist die Abbildung G nicht injektiv, so wäre es nicht ohne Probleme möglich, den richtigen Punkt $p = G^{-1}(\{p'\})$ für ein $p' \in N$ und dessen zugehörigen Tangentialvektor V_p aufzufinden, welcher durch das Differential G_* abgebildet werden sollte. Ferner muss G surjektiv sein, um überhaupt auf ganz N ein Vektorfeld definieren zu können. Infolgedessen kann der Pushforward eines Vektorfeldes ausschließlich mit Diffeomorphismen durchgeführt werden:

$$G_* : \mathfrak{X}(M) \rightarrow \mathfrak{X}(N), V \mapsto G_* V \quad \text{mit} \quad V : p \mapsto V_p \quad \text{und} \quad G_* V : G(p) \mapsto G_* V_p \quad . \quad (2.21)$$

An dieser Stelle haben wir den Tangentialvektoren genügend Zeit gewidmet und wollen **Kotangentialvektoren** als duale Objekte zu den Tangentialderivationen einführen. Aus der Theorie der linearen Algebra ist das Konzept des *dualen Vektorraums* als Menge der Homomorphismen auf einem Vektorraum bekannt. Entsprechend ist es auch hier möglich, den Tangentialvektorräumen $T_p M$ fiberweise ihr Duales $T_p^* M$ für alle $p \in M$ zuzuweisen. Ein Kotangentialvektor $\omega_p \in T_p^* M$ bildet infolgedessen Tangentialderivations am Punkt p auf ein Körperelement⁷ ab:

$$\omega_p : T_p M \rightarrow \mathbb{R}, V_p \mapsto \omega_p \langle V_p \rangle \quad . \quad (2.22)$$

Die duale Basis e^{*i} in einer Karte (x, U) wollen wir mit dem totalen Differential der Koordinatenfunktion am Punkt p identifizieren, sprich $d_p x^i$, so dass die Wirkung eines allgemeinen Kotangentialvektors $\omega_p := \omega_i d_p x^i$ auf eine Tangentialderivations $V_p := v^j \partial_j^p$ lediglich durch die Koeffizienten ω_i und v^i bestimmt wird, denn

$$\omega_p \langle V_p \rangle = \omega_i d_p x^i \langle v^j \partial_j^p \rangle = \omega_i v^j d_p x^i \langle \partial_j^p \rangle = \omega_i v^j \delta_j^i = \omega_i v^i \quad . \quad (2.23)$$

Das Resultat der *Kontraktion* eines Kotangentialvektors mit einem Tangentialvektor erinnert stark an ein Skalarprodukt, welches zwei Vektoren auf ein Körperelement abbildet. In der Literatur wird darum die **natürliche Paarung** von Kovektoren und Vektoren oft als Skalarprodukt bezeichnet – wir hingegen wollen diesem Ausdruck ein eigenes Symbol zuweisen:

$$\langle \cdot, \cdot \rangle_p : T_p^* M \times T_p M \rightarrow \mathbb{R}, (\omega_p, V_p) \mapsto \langle \omega_p, V_p \rangle_p := \omega_p \langle V_p \rangle \quad . \quad (2.24)$$

Analog zur Konstruktion des Tangentialbündels lässt sich das **Kotangentialbündel** $T^* M$ als disjunkte Vereinigung der Kotangential(vektor)räume $T_p^* M$ über alle $p \in M$ definieren und glatte Schnitte in dieses als **Kovektorfelder**, die sogenannten **Einsformen(felder)** ω , angeben:

$$\omega : M \rightarrow T^* M, p \mapsto (p, \omega_p) \equiv \omega_p \quad . \quad (2.25)$$

Das Kotangentialbündel, welches in der physikalischen Diktion oft als **Phasenraum** bezeichnet wird, ist ebenso eine $2m$ -dimensionale, glatte Mannigfaltigkeit. Der Beweis erfolgt analog bis auf das Detail, dass das Transformationsverhalten der Koeffizienten ω_i unter Koordinatenwechsel geringfügig abweicht. Genauer betrachtet, definiert man den sogenannten **Pullback** eines Kotangentialvektors $\omega_{G(p)}$ mithilfe der Funktion $G : M \rightarrow N$ und der natürlichen Paarung mit einem beliebigen Tangentialvektor V_p als:

$$G^* : T_{G(p)}^* N \rightarrow T_p^* M, \omega_{G(p)} \mapsto G^* \omega_{G(p)} \quad , \text{ d. h. } \quad \langle G^* \omega_{G(p)}, V_p \rangle_p = \langle \omega_{G(p)}, G_* V_p \rangle_{G(p)} \quad . \quad (2.26)$$

⁷Der Körper ist bei uns explizit durch die reellen Zahlen gegeben, weil dem vorangegangenen Betrachtungen reelle Strukturen zugrundeliegen.

In einer Karte von N lässt sich demnach die Wirkung eines Koordinatenwechsels explizit nachrechnen:

$$(G^* \omega)_i v^i = \langle\langle G^* \omega_{G(p)}, V_p \rangle\rangle_p = \langle\langle \omega_{G(p)}, G_* V_p \rangle\rangle_{G(p)} = \omega_i J^i_j v^j \Rightarrow \omega_i \mapsto (J^T)_j^i \omega_i \quad . \quad (2.27)$$

Die Koeffizienten von Kovektoren werden infolgedessen mit der Transponierten der Jacobimatrix J aus der Vorschrift des Pushforwards von Tangentialvektoren multipliziert. Dieses abweichende Verhalten im Transformationsverhalten führt in der speziellen Relativitätstheorie oft zu der Begriffsbildung **kontra-** bzw. **kovarianter Vektoren** – diese tragen dann ihre Indizes entweder oben oder unten ebenso wie die Koeffizienten von Kotangentialvektoren respektive Tangentialderivationen. Ferner ist es in endlichdimensionalen Vektorräumen stets möglich, über eine nichtausgeartete Bilinearform B_p einen Isomorphismus zwischen dem Vektorraum und seinem Dualen herzustellen, d. h. man vermag jedem Vektor einen Kovektor eindeutig mithilfe der Abbildung \flat zuzuordnen:

$$\flat : T_p M \rightarrow T_p^* M, V_p \mapsto V_p^\flat := B_p(V_p, \cdot) \quad \text{denn} \quad B_p(V_p, \cdot) : T_p M \rightarrow \mathbb{R} \quad . \quad (2.28)$$

Das Inverse dieser Abbildung $\sharp := \flat^{-1}$ erlaubt es dann, jedem Kotangentialvektor eine Tangentialderivation zuzuordnen und in Anlehnung an den Gebrauch der verwendeten Symbole im Notensatz werden \flat und \sharp auch **musikalische Isomorphismen** genannt. Wählt man die Bilinearform B_p in Koordinaten z. B. wie folgt:

$$B_p : T_p M \times T_p M \rightarrow \mathbb{R}, (V_p, W_p) \mapsto B_p(V_p, W_p) := g_{ij} d_p x^i \otimes d_p x^j \langle v^k \partial_k^p, w^l \partial_l^p \rangle \quad , \quad (2.29)$$

wobei g_{ij} eine symmetrische, invertierbare Matrix ist, dann realisiert man eine Pseudometrik, wie man sie z. B. in der speziellen Relativitätstheorie für den Spezialfall $g = \text{diag}(+1, -1, -1, -1)$ antrifft, denn:

$$B_p(V_p, W_p) = g_{ij} d_p x^i \otimes d_p x^j \langle v^k \partial_k^p, w^l \partial_l^p \rangle = v^k g_{ij} w^l \delta_k^i \delta_l^j = v^i g_{ij} w^j \quad . \quad (2.30)$$

Kontra- und kovariante Vektoren gehen dann entsprechend der musikalischen Isomorphismen bezüglich der Pseudometrik g ineinander über. Die gleiche Vorgehensweise findet man in der klassischen Mechanik mit der trivialen Wahl $g = \text{diag}(+1, +1, +1)$ wieder, weswegen diese Subtilität der Unterscheidung kontra- respektive kovarianter Vektoren nicht weiter auffällt. In der Regel definiert man in der Physik die **Strukturgruppe** der entsprechenden Theorie als jene Untergruppe⁸ $G \leq GL(m)$ der invertierbaren Matrizen, welche für beliebige Vektoren V_p bzw. W_p die entsprechende Bilinearform unter dem Pullback einer Funktion $\Lambda \in G$ invariant lassen, so dass $\Lambda^* B_{\Lambda(p)} = B_p$. Für die Pseudometrik der speziellen Relativitätstheorie erhält man z. B. explizit in Karten:

$$(\Lambda^* B_{\Lambda(p)})(V_p, W_p) = B_{\Lambda(p)}(\Lambda_* V_p, \Lambda_* W_p) = v^i J^j_k g_{kl} J^l_j w^j \stackrel{!}{=} v^i g_{ij} w^j = B_p(V_p, W_p) \quad . \quad (2.31)$$

Mit dem Wissen, dass eine lineare Abbildung Λ mit seiner Jacobimatrix zusammenfällt, sprich $J = \Lambda_* \equiv \Lambda$, liest man die definierende Relation der Lorentzgruppe direkt aus der Forderung nach der Invarianz der Bilinearform unter dem Pullback eines Strukturuppenelementes ab:⁹

$$SO(1, 3) := \{ \Lambda \in GL(4, \mathbb{R}) \mid \Lambda^T g \Lambda = g \} \quad . \quad (2.32)$$

Mithilfe des Tensorprodukts von Vektorräumen kann nicht nur die Metrik konstruiert werden, welche zwei Tangentialvektoren einen Skalar zuweist, sondern auch allgemeinere Abbildungen, welche z. B. r Kovektoren und s Tangentialderivationen auf eine reelle Zahl werfen, die sogenannten **Tensoren**:

$$T_s^r : \underbrace{T_p^* M \times \dots \times T_p^* M}_{r\text{-mal}} \times \underbrace{T_p M \times \dots \times T_p M}_{s\text{-mal}} \rightarrow \mathbb{R} \\ (\omega_p^{(1)}, \dots, \omega_p^{(r)}, V_p^{(1)}, \dots, V_p^{(s)}) \mapsto t_{i_1 \dots i_s}^{j_1 \dots j_r} \partial_{j_1 \dots j_r}^p \otimes d_p x^{i_1 \dots i_s} \langle \omega_p^{(1)}, \dots, \omega_p^{(r)}, V_p^{(1)}, \dots, V_p^{(s)} \rangle, \quad (2.33)$$

⁸Diese Konstruktion ist lokal in einer Umgebung $U \ni p$ – allgemein sucht man eine Untergruppe der Automorphismen auf M .

⁹Analog erhält man die eigentliche orthogonale Gruppe $SO(3)$ für die triviale Wahl $g = \text{diag}(+1, +1, +1)$.

wenn $\partial_{j_1 \dots j_r}^p := \partial_{j_1}^p \otimes \dots \otimes \partial_{j_r}^p$ bzw. $d_p x^{i_1 \dots i_s} := d_p x^{i_1} \otimes \dots \otimes d_p x^{i_s}$ gelesen wird. Die Wirkung eines Basisvektors ∂_j^p auf einen Kovektor ω_p soll entsprechend dual ausgelegt werden, so dass der Koeffizient herausprojiziert wird, sprich $\partial_j^p \langle \omega_p \rangle = \omega_p \langle \partial_j^p \rangle \equiv \omega_j$. Unter einem Koordinatenwechsel verhält sich der Koeffizient des Tensors $t_{i_1 \dots i_s}^{j_1 \dots j_r}$ entsprechend der vorangegangenen Betrachtungen zum Tangential- bzw. Kotangentialbündel r -fach kontravariant und s -fach kovariant. Ein Tangentialvektor ist infolgedessen ein Tensor der Stufe ($r = 1, s = 0$) und ein Kovektor ein Tensor der Stufe ($r = 0, s = 1$). Weiter verifiziert man, dass die Metrik die Stufe ($r = 0, s = 2$) und eine gewöhnliche lineare Abbildung die Stufe ($r = 1, s = 1$) innehat.

Beschränkt man sich auf Tensoren mit ausschließlich kovarianten Anteil und total antisymmetrischen Koeffizienten $t_{i_1 \dots i_s}$ in den Indizes i_1 bis i_s , so erhält man die sogenannten **Formen vom Grad s** , welche mit dem Symbol $\Lambda^s T_p^* M$ abgekürzt werden. Die totale Antisymmetrie des Koeffizienten kann man auch der Basis mithilfe des Dachproduktes zuschreiben derart, dass man über alle Permutationen der Basis inklusive des zugehörigen Signums summiert:¹⁰

$$d_p x^{i_1} \wedge \dots \wedge d_p x^{i_s} := \sum_{\sigma \in S} \text{sign } \sigma d_p x^{i_{\sigma(1)}} \otimes \dots \otimes d_p x^{i_{\sigma(s)}} \quad . \quad (2.34)$$

Zusammenfassend ist eine s -Form ein Tensor der Stufe $(0, s)$, welcher s Tangentialvektoren am Punkt p auf ein Skalar abbildet und sich total antisymmetrisch bei paarweiser Vertauschung dieser verhält. Auch hier ist es möglich, einen Schnitt $\omega : M \rightarrow \Lambda^s T_p^* M$, $p \mapsto (p, \omega_p) \equiv \omega_p$ zu konstruieren, also eine punktweise Zuordnung, die sogenannten **Differentialformen(felder)**, zu definieren. Ein Differentialformenfeld ist demnach nichts anderes als ein glatter Schnitt in ein Tensorbündel, deren Fasern durch total antisymmetrische Tensoren der Stufe s realisiert werden. Von nun an wollen wir den Raum der Differentialformen(felder) mit $\Omega^s(M) := \Gamma^\infty(M, \Lambda^s T^* M)$ bezeichnen. Der Pullback eines solchen Feldes wird analog über die natürliche Paarung mithilfe des Pushforwards auf die zu wirkenden Vektorfelder definiert:

$$(G^* \omega_{G(p)}) \langle V_p^{(1)}, \dots, V_p^{(s)} \rangle = \omega_{G(p)} \langle G_* V_p^{(1)}, \dots, G_* V_p^{(s)} \rangle \quad \text{für alle } p \in M \text{ und } V_p^{(l)} \in T_p M \quad . \quad (2.35)$$

Der Pullback eines Formenfeldes ist im Gegensatz zum Pushforward von Vektorfeldern *unabhängig* davon, ob G ein Diffeomorphismus ist, immer wohldefiniert.

Ferner existieren auf den Differentialformen(feldern) zwei natürliche Arten der Ableitung:¹¹ Auf der einen Seite verfügen wir über das *äußere Differential* d , welches auf eine allgemeine Differentialform ω für beliebige Vektorfelder $V^{(l)} \in \mathfrak{X}(M)$ mit $l \in \{0, \dots, s\}$ wie folgt wirkt:

Definition 2.3.3. (Cartanableitung) Die Wirkung des **äußeren Differentials** d ist in einer koordinatenfreien Form durch den folgenden Ausdruck festgelegt:

$$\begin{aligned} (d\omega) \langle V^{(0)}, \dots, V^{(s)} \rangle &:= \sum_{i=0}^s (-1)^i V^{(i)} \omega \langle V^{(0)}, \dots, \check{V}^{(i)}, \dots, V^{(s)} \rangle \\ &+ \sum_{0 \leq i < j \leq s} (-1)^{i+j} \omega \langle [V^{(i)}, V^{(j)}], V^{(0)}, \dots, \check{V}^{(i)}, \dots, \check{V}^{(j)}, \dots, V^{(s)} \rangle \quad . \quad (2.36) \end{aligned}$$

Dabei bedeutet $\check{V}^{(i)}$, dass das i -te Vektorfeld ausgelassen werden soll. In Koordinaten gestaltet sich der Ausdruck ein wenig übersichtlicher: Dort wirkt das äußere Differential wie das Dachprodukt aus dem totalen Differential der Koeffizientenfunktion $\omega_{i_1 \dots i_s}$ und der Basisfunktion $dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_s}$

$$d\omega = d(\omega_{i_1 \dots i_s} dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_s}) = d\omega_{i_1 \dots i_s} \wedge dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_s} = \frac{\partial}{\partial x^j} \omega_{i_1 \dots i_s} dx^j \wedge dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_s} \quad (2.37)$$

¹⁰Ohne Einbeziehung des Signums erreicht man eine totale Symmetrisierung, welche oft mit dem umgedrehten Dach \vee angedeutet wird.

¹¹Einer dritten, der Lieableitung, werden wir uns in den folgenden Kapiteln ausführlich widmen.

und ferner vertauscht es stets mit dem Pullback, die sogenannte *Natürlichkeit der äußeren Ableitung* $d(g^* \omega) = g^*(d\omega)$. Die **Cartanableitung** d ist zudem eine Antiderivation, d. h. sie erfüllt für je zwei Differentialformen ω bzw. σ stets die **graduierte Leibnizregel**:

$$d(\omega \wedge \sigma) = d\omega \wedge \sigma + (-1)^s \omega \wedge d\sigma \quad \text{für } \omega \in \Omega^s(M) \text{ bzw. } \sigma \in \Omega^{s'}(M) . \quad (2.38)$$

Das zweifache Anwenden von d auf eine Differentialform hat immer ein verschwindendes Resultat, was man am einfachsten in einer Karte mithilfe des *Satzes von Schwarz* verifiziert:

$$d^2 \omega = d\left(\frac{\partial}{\partial x^j} \omega_{i_1 \dots i_s} dx^j \wedge dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_s}\right) = \frac{\partial}{\partial x^k} \frac{\partial}{\partial x^j} \omega_{i_1 \dots i_s} dx^k \wedge dx^j \wedge dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_s} . \quad (2.39)$$

Die Koeffizientenfunktion $\partial_k \partial_j \omega_{i_1 \dots i_s}$ ist total symmetrisch bezüglich des Vertauschens der Indizes j und k und die Basisfunktion total antisymmetrisch, d. h. die Kontraktion wird stets verschwinden. Topologisch steht hinter der Forderung $d^2 = 0$ die Anschauung, dass das äußere Differential das Duale zu einem *Randoperator* ∂ ist und der Rand einer Mannigfaltigkeit selbst keinen Rand besitzt. Dieses Verhalten schlägt sich im **Satz von Stokes** nieder:

$$\int_{\partial M} f = \int_M df \quad \text{und darum} \quad 0 \stackrel{!}{=} \int_{\partial \partial M} f = \int_M d^2 f . \quad (2.40)$$

Für eine genaue Studie dieses Sachverhaltes bietet sich das Gebiet der de-Rham-Kohomologie [25] an, auf welches wir nicht näher eingehen können.

Auf der anderen Seite verfügen wir über die *innere Ableitung* ι_V , welche im Gegensatz zur äußeren Ableitung den Formengrad nicht anhebt sondern senkt. Formal setzt man einfach ein Vektorfeld in den ersten Eintrag einer Differentialform ein und erhält folglich eine $(s - 1)$ -Form:

Definition 2.3.4. (innere Ableitung) Die **innere Ableitung** ι_V ist durch den folgenden Ausdruck koordinatenfrei gegeben:

$$\iota_V : \Omega^s(M) \rightarrow \Omega^{s-1}(M), \omega(\underbrace{\cdot, \dots, \cdot}_{s\text{-Stück}}) \mapsto (\iota_V \omega)(\underbrace{\cdot, \dots, \cdot}_{(s-1)\text{-Stück}}) := \omega(V, \underbrace{\cdot, \dots, \cdot}_{s\text{-Stück}}) . \quad (2.41)$$

Auch die innere Ableitung ist eine gradierte Derivation und verursacht entsprechend des Grades der Differentialform, an welcher sie vorbeigezogen worden ist, gegebenenfalls ein Vorzeichen.

Abschließend seien noch einige Bemerkungen über Differentialformen erlaubt: Die 0-Formen werden mit den glatten Funktionen $C^\infty(M, \mathbb{R})$ identifiziert, so dass dort die Cartanableitung mit dem totalen Differential zusammenfällt. Der Formengrad kann aufgrund der Antisymmetrie der Basisfunktionen nur Werte im Bereich von 0 bis m annehmen, wenn m die Dimension der zugrundeliegenden Mannigfaltigkeit ist, d. h. das Anwenden der inneren Ableitung auf eine Funktion bzw. der äußeren Ableitung auf eine m -Form verschwindet immer.

An dieser Stelle haben wir einen rudimentären Differentialkalkül auf glatten Mannigfaltigkeiten und den zugehörigen Vektorbündeln entwickelt und wollen mit dessen Hilfe Liegruppen, Flüsse durch den Phasenraum und Gruppenwirkungen studieren.

2.4 Gruppen und ihre Wirkungen

Die Gruppe ist nicht nur aus einem mathematischen Standpunkt, als in sich unter unäre (Inversenbildung) und binäre (Gruppenmultiplikation) Operationen abgeschlossene Menge, ein wertvolles Konstrukt, sondern stellt auch ein integrales Instrument bei der Bewältigung physikalischer Problemstellungen dar. Gruppen und ihre Darstellungstheorie dominieren physikalische Theorien – man führe exemplarisch die systematische Behandlung von Symmetrien mithilfe des *Noethertheorems* an oder beschäftige sich mit der Klassifizierung irreduzibler Darstellungen jener, deren Auswirkungen sich bis zum

Spektrum physikalisch auftretender Partikel durchschlägt, gipfelnd in der Beschreibung der fundamentalen Wechselwirkungen durch Eichbosonen mithilfe von lokalen Eichtheorien. Einführend wollen wir darum zunächst die Definition einer Gruppe wiederholen:

Definition 2.4.1. (Gruppe) Eine Menge G mit einer zweistelligen Abbildung $\cdot : G \times G \rightarrow G$, welche jedem geordnetem Paar (g_1, g_2) eindeutig ein Element in G zuweist, heißt **Gruppe** genau dann, wenn

- (i) (Assoziativität) $\forall g_1, g_2, g_3 \in G : (g_1 \cdot g_2) \cdot g_3 = g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3)$
- (ii) (Neutrales Element) $\exists e \in G \forall g \in G : e \cdot g = g \cdot e = g$
- (iii) (Inverses Element) $\forall g \in G \exists g^{-1} : g^{-1} \cdot g = g \cdot g^{-1} = e$

In Hinsicht auf kontinuierliche Gruppen müssen wir das Konzept der *Stetigkeit* auf die Ebene der Gruppen heben und definieren:

Definition 2.4.2. (Topologische Gruppe) Eine Gruppe G , welche zugleich topologischer Raum ist, heißt genau dann **topologische Gruppe**, wenn die Inversenbildung und die Gruppenverknüpfung stetige Abbildungen sind, sprich $G \times G \rightarrow G$, $(g_1, g_2) \mapsto g_1^{-1} \cdot g_2$ stetig ist.

Verfügt man nun über eine topologische Gruppe G und eine topologische Mannigfaltigkeit M , so liegt es nahe, beide miteinander in Beziehung setzen zu wollen. Da in der Regel keine *natürliche* Wirkung der Gruppe auf Elemente $p \in M$ existiert, bedarf es einer expliziten Vorschrift, welche die Struktur der Gruppe akzeptiert, eine sogenannte Gruppenwirkung:

Definition 2.4.3. (Gruppenwirkung, G -Raum) Seien G eine topologische Gruppe und M ein topologischer Raum, dann definiert eine stetige Abbildung $\Phi : G \times M \rightarrow M$, $(g, p) \mapsto \Phi(g, p)$ eine **Gruppenwirkung von links bzw. rechts**, wenn folgendes gilt:

- (i) $\Phi^{l/r}(e, p) = p \quad \forall p \in M$
- (ii) $\Phi^l(g_2, \Phi^l(g_1, p)) = \Phi^l(g_2 \cdot g_1, p)$ bzw. $\Phi^r(g_2, \Phi^r(g_1, p)) = \Phi^r(g_1 \cdot g_2, p) \quad \forall g_1, g_2 \in G$ und $p \in M$

Ein topologischer Raum mit einer stetigen Gruppenwirkung einer topologischen Gruppe wird **G -Raum** genannt. In der Literatur wird oft die Gruppenwirkung unterdrückt und man schreibt lediglich $g \cdot p$ bzw. gp .

Die erste Forderung erscheint natürlich, denn das Anwenden des neutralen Elementes der Gruppe auf einem beliebigen Punkt $p \in M$ sollte wie die Identität auf M wirken. Der zweiten definierenden Eigenschaft einer Gruppenwirkung entnimmt man bis auf die Reihenfolge bei der Anwendung die Homomorphismeigenschaft, d. h. man fordert, dass die Gruppenmultiplikation kompatibel mit der Komposition von Gruppenwirkungen ist und somit folgendes Diagramm für alle $p \in M$ und alle $g \in G$ kommutiert:

$$\begin{array}{ccc} G & \xrightarrow{g} & G \\ \Phi_p \downarrow & & \downarrow \Phi_p \\ M & \xrightarrow{\Phi_g} & M \end{array}$$

Somit transportiert man die Struktur der Gruppe G in geeigneter Weise auf die topologische Mannigfaltigkeit M . Ferner induziert eine Gruppenwirkung $\Phi : G \times M \rightarrow M$ als zweistellige Abbildung stets vier weitere Abbildungen:

$$\begin{aligned} \Phi_g & : M \rightarrow M, & p & \mapsto \Phi_g(p) := \Phi(g, p) \quad , \\ \Phi_p & : G \rightarrow M, & g & \mapsto \Phi_p(g) := \Phi(g, p) \quad , \\ \hat{\Phi} & : G \rightarrow \mathcal{F}(M, M), & g & \mapsto \Phi_g \quad , \\ \check{\Phi} & : M \rightarrow \mathcal{F}(G, M), & p & \mapsto \Phi_p \quad . \end{aligned} \tag{2.42}$$

Die ersten beiden sind die Gruppenwirkungen für stets ein festes Gruppenelement oder Punkt aus dem topologischen Raum. Die Zuordnung $\hat{\Phi}$ eines Gruppenelements g zu seiner einstelligen Abbildung Φ_g wird **Realisierung der Gruppe** auf dem Trägerraum M genannt. Ist Φ_g linear und wirkt auf einen Vektorraum, so heißt diese Abbildung **Darstellung der Gruppe** auf M . Weiter bemerke man, dass die Abbildung Φ_g aufgrund der Homomorphismenteigenschaft und der Kommutativität des Inversen stets invertierbar ist, denn für eine Linkswirkung¹² verifiziert man einfach:

$$\mathbb{1}_M = \Phi_e = \Phi_{g^{-1} \cdot g} = \Phi_{g^{-1}} \circ \Phi_g = \Phi_g \circ \Phi_{g^{-1}} \quad \Rightarrow \quad (\Phi_g)^{-1} = \Phi_{g^{-1}} \quad \forall g \in G \quad . \quad (2.43)$$

Exemplarisch führen wir für eine Linkswirkung einer Gruppe G auf einem topologischen Raum die **konjugierende Abbildung** oder **innere Wirkung** $I : G \times G \rightarrow G$, $(g, \tilde{g}) \mapsto g \cdot \tilde{g} \cdot g^{-1}$ auf sich selbst an, denn

$$I_{g_2} \circ I_{g_1}(\tilde{g}) = I_{g_2}(g_1 \cdot \tilde{g} \cdot g_1^{-1}) = g_2 \cdot (g_1 \cdot \tilde{g} \cdot g_1^{-1}) \cdot g_2^{-1} = (g_2 \cdot g_1) \cdot \tilde{g} \cdot (g_2 \cdot g_1)^{-1} = I_{g_1 \cdot g_2}(\tilde{g}) \quad . \quad (2.44)$$

Weiterhin kann man stets mithilfe der Inversenbildung $(\cdot)^{-1} : G \rightarrow G$, $g \mapsto g^{-1}$ eine Linkswirkung zu einer Rechtswirkung umschreiben und umgekehrt:

$$\Phi(g_2^{-1}, \Phi(g_1^{-1}, p)) = \Phi(g_2^{-1} \cdot g_1^{-1}, p) = \Phi((g_1 \cdot g_2)^{-1}, p) \quad . \quad (2.45)$$

Ferner ist es möglich, weitere Eigenschaften von Gruppenwirkungen zu definieren:

Definition 2.4.4. (transitiv, frei, effektiv, regulär) Sei Φ eine G -Wirkung auf M .

- (i) Man sagt, die Gruppenwirkung wirke **transitiv** auf M , wenn es genau einen Orbit gibt. Anders kann man auch sagen, man findet für zwei Elemente $p, \tilde{p} \in M$ stets ein Φ_g , so dass $\tilde{p} = \Phi_g(p)$.
- (ii) Die Gruppenwirkung heißt **frei/ohne Fixpunkte/semiregulär**, wenn Φ_g keine Fixpunkte hat, d. h. aus $\Phi_g(p) = p$ für ein $p \in M$ folgt schon $g = e$.
- (iii) Man nennt eine Wirkung **effektiv** oder **treu**, wenn aus $\Phi_g(p) = p$ für alle $p \in M$ folgt, dass $g = e$ ist, d. h. $\Phi_g = \text{id}_M \Leftrightarrow g = e$.
- (iv) Eine Wirkung heißt **einfach transitiv** oder **regulär**, wenn sie frei und transitiv ist.

Die Menge aller Punkte $\Phi(g, p) \in M$, welche für variables $g \in G$ erreicht werden können, tragen in Analogie zur Umlaufbahn eines Körpers um einen Zentralkörper den Namen *Orbit*¹³:

Definition 2.4.5. (Bahn, G -Orbit) Für einen G -Raum heißt die Menge

$$Gp = \{\Phi_g(p) \mid g \in G\} \quad (2.46)$$

die **Bahn** oder der **Orbit** von $p \in M$.

Die Eigenschaft zweier Punkte $p, \tilde{p} \in M$ im gleichen Orbit zu liegen, definiert eine Äquivalenzrelation

$$p \sim_G \tilde{p} \quad :\Leftrightarrow \quad \exists g \in G : \tilde{p} = \Phi_g(p) \quad , \quad (2.47)$$

denn **Reflexivität** wird durch die Wahl $g = e$, **Symmetrie** durch das Inverse und **Transitivität** durch die Abgeschlossenheit der Gruppe garantiert. Somit kann man einen topologischen Raum M durch Orbitbildung in disjunkte Partitionen zerlegen, den sogenannten **Quotientenraum** $M/G := M/\sim_G$, welchen wir mit der **Quotiententopologie** ausstatten wollen. Genauer ist die Quotiententopologie die **Finaltopologie** bezüglich der kanonischen Projektion $\pi : M \rightarrow M/G$, $p \mapsto [p] := Gp$ auf die Äquivalenzklassen:

¹²Die Rechnung für eine Rechtswirkung folgt analog.

¹³Im kreisförmigen Fall wäre die Gruppenwirkung eine einparametrische Untergruppe der Drehmatrizen $D \subset SO(3)$ auf dem \mathbb{R}^3 und die Gruppenwirkung die gewöhnliche Matrixmultiplikation, so dass $\Phi : D \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, $x \mapsto \Phi(\varphi, x) := R(\varphi) \cdot x$.

Definition 2.4.6. (Finaltopologie) Sei N eine Menge und $F_i : M_i \rightarrow N$ eine Familie von Abbildungen, dann heißt die feinste Topologie \mathcal{T} auf N , welche die Abbildungen F_i für alle $i \in \mathcal{I}$ stetig lässt, **finale** oder **gestiftete Topologie**.

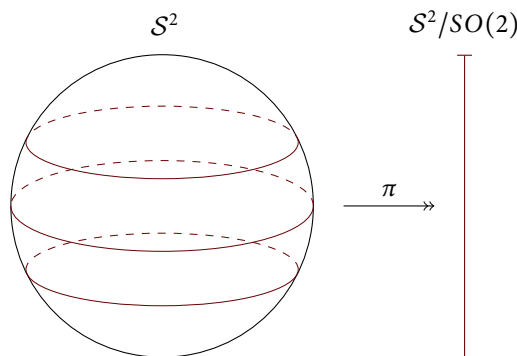
Als anschauliches Beispiel für einen solchen **Orbitraum** wollen wir den Quotientenraum der Einheits-sphäre S^2 eingebettet in den \mathbb{R}^3 nach der Gruppe der Drehungen um die e_3 -Achse, sprich $S^2/SO(2)$, betrachten: Dazu wähle man die Einbettung der Sphäre in den \mathbb{R}^3 explizit als Nullstellengebilde einer impliziten Funktion, sprich als Untermannigfaltigkeit $S^2 := \{(p^1, p^2, p^3) \mid (p^1)^2 + (p^2)^2 + (p^3)^2 - 1 = 0\}$. Die Gruppenwirkung der $SO(2)$ soll durch 3×3 -Matrizen in einer natürlichen Form auf dem \mathbb{R}^3 realisiert werden:

$$\Phi : SO(2) \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3, (\varphi, \mathbf{p}) \mapsto \Phi(\varphi, \mathbf{p}) := (p^1 \cos \varphi - p^2 \sin \varphi, p^1 \sin \varphi + p^2 \cos \varphi, p^3) \quad (2.48)$$

Der Orbitraum Gp wird infolgedessen durch die Menge der Breitengrade beschrieben:

$$Gp = \{\Phi_g(p) \mid g \in G\} \equiv \{(p^1 \cos \varphi - p^2 \sin \varphi, p^1 \sin \varphi + p^2 \cos \varphi, p^3) \mid \varphi \in [0, 2\pi)\} \quad (2.49)$$

Offensichtlich ist die p^3 -Koordinate invariant unter der Gruppenwirkung, so dass es legitim ist, die Breitengrade lediglich durch ihre Lage auf der e_3 -Achse zu klassifizieren. Auf diese Art und Weise stellt man sehr einfach eine Isomorphie zwischen dem Quotientenraum $S^2/SO(2)$ und dem Intervall $[-1, 1]$ her. Die folgende Abbildung illustriert die Orbitbildung mithilfe der Projektion $\pi : (p^1, p^2, p^3) \mapsto p^3$:



Offensichtlich sind die Breitengrade paarweise disjunkt und zerlegen die Einheits-sphäre in Partitionen. Das ist eine direkte Folge der Eigenschaft, dass die Zugehörigkeit zu einem Orbit eine Äquivalenzrelation definiert. Legt man den Fokus auf den Nord- bzw. Südpol $P^\pm := (0, 0, \pm 1)$, so verifiziert man sofort, dass diese Fixpunkte sind, denn $GP^\pm = \{P^\pm\}$. Infolgedessen lässt die gesamte Gruppe die Pole invariant – allgemein kann man diese Idee in der Definition der *Standgruppe*¹⁴ festhalten:

Definition 2.4.7. (Stabilisator) Sei M ein G -Raum, dann heißt die Menge:

$$G_p = \{g \in G \mid \Phi_g(p) = p\} \quad \text{für } p \in M \quad (2.50)$$

Stabilisator, Standgruppe bzw. **Isotropiegruppe** des Punktes $p \in M$. Man sieht hier deutlich, dass der Stabilisator realisierungsabhängig ist.

Für eine beliebige Abbildung $F : M \rightarrow N$ zwischen zwei Mannigfaltigkeiten wollen wir die Eigenschaft der Äquivarianz definieren:

Definition 2.4.8. (Äquivariante Abbildung) Seien M und N zwei G -Räume mit Gruppenwirkungen Φ respektive Ψ , dann heißt eine Abbildung $F : M \rightarrow N$ **äquivariant**, wenn sie die Gruppenwirkung respektiert, sprich:

$$F(\Phi_g(p)) = \Psi_g(F(p)) \quad \forall p \in M \text{ und } g \in G \quad (2.51)$$

Diese Bedingung ist äquivalent zu der Aussage, dass folgendes Diagramm für alle $g \in G$ kommutiert:

¹⁴Man rechnet sehr einfach nach, dass es sich tatsächlich um eine *Gruppe* handelt.

$$\begin{array}{ccc}
 M & \xrightarrow{F} & N \\
 \Phi_g \downarrow & & \downarrow \Psi_g \\
 M & \xrightarrow{F} & N
 \end{array}$$

Äquivariante Abbildungen induzieren eine wohldefinierte Abbildung zwischen den Orbiträumen, denn:

$$F(Gp) = \{F(\Phi_g(p)) \mid g \in G\} = \{\Psi_g(F(p)) \mid g \in G\} = GF(p) \quad . \quad (2.52)$$

Die Standgruppe G_p und der Orbit Gp können über den *Bahnensatz*, welcher im Kern der Homomorphiesatz für Abbildungen ist, miteinander in Beziehung gesetzt werden:

Satz 2.4.9. (*Bahnensatz, Orbit-Stabilisator-Theorem*) Seien G eine topologische Gruppe, M ein topologischer Raum und Φ_p eine Gruppenwirkung an einem Punkt $p \in M$, dann existiert ein mengentheoretischer Isomorphismus

$$\overline{\Phi}_p : G/G_p \rightarrow Gp, [g] := gG_p \mapsto \Phi_p(g) \quad . \quad (2.53)$$

Beweis. Der Homomorphiesatz sagt aus, dass man das Bild im F einer Abbildung $F : X \rightarrow Y$ mit dem Kobild $\text{coim } F := X/\ker F$ durch eine Isomorphie verknüpfen kann. In unserem speziellen (mengentheoretischen) Fall ist der Kern der Abbildung F diejenige Untermenge des kartesischen Produkts, deren Tupelinträge das gleiche Bild besitzen:

$$\ker F := \{(x, \tilde{x}) \in X \times X \mid F(x) = F(\tilde{x})\} \quad . \quad (2.54)$$

Die Eigenschaft zweier Argumente $x, \tilde{x} \in X$ das gleiche Bild zu haben, induziert eine Äquivalenzrelation:

$$x \sim \tilde{x} \quad :\Leftrightarrow \quad (x, \tilde{x}) \in \ker F \quad \Leftrightarrow \quad F(x) = F(\tilde{x}) \quad . \quad (2.55)$$

Die Quotientenbildung $X/\ker F$ ist entsprechend als Projektion auf die Äquivalenzklassen $[x] \in X/\sim$ zu lesen. Der beschriebene Sachverhalt spiegelt sich im folgenden kommutativen Diagramm wider.

$$\begin{array}{ccc}
 X & \xrightarrow{F} & \text{im } F \\
 \pi \downarrow & \searrow \overline{F} & \nearrow \\
 X/\sim & &
 \end{array}$$

Konstruiert man die Abbildung $\overline{F} : X/\sim \rightarrow \text{im } F, [x] \mapsto \overline{F}([x]) := F(x)$ derart, dass das Bild einer Äquivalenzklasse durch den Funktionswert der originären Funktion mithilfe eines Vertreters gewonnen wird, so erhält man eine *wohldefinierte Bijektion*:

- (Wohldefiniertheit) Seien x und \tilde{x} zwei Vertreter aus $[x]$, so ist der Funktionswert offensichtlich unabhängig von der Wahl des Vertreters stets eindeutig, denn es gilt laut Voraussetzung die folgende Relation $\overline{F}([x]) = F(x) \equiv F(\tilde{x}) = \overline{F}([\tilde{x}])$.
- (Surjektivität) Das Bild der Abbildung \overline{F} fällt aufgrund der Surjektivität der kanonischen Projektion $\pi : X \rightarrow X/\sim, x \mapsto [x]$ mit dem Bild von F überein, denn

$$\text{im } \overline{F} = \{\overline{F}([x]) \mid [x] \in X/\sim\} \equiv \{F(x) \mid x \in X\} = \text{im } F \quad . \quad (2.56)$$

- (Injektivität) Für je zwei Elemente $[x], [\tilde{x}]$ aus dem Quotientenraum X/\sim , welche den gleichen Funktionswert unter \overline{F} haben, gilt $[x] = [\tilde{x}]$, denn

$$\overline{F}([x]) = \overline{F}([\tilde{x}]) \quad \Rightarrow \quad F(x) = F(\tilde{x}) \quad \Rightarrow \quad x \sim \tilde{x} \quad \Rightarrow \quad [x] = [\tilde{x}] \quad . \quad (2.57)$$

Abschließend setzt man $X = G$ und $F = \Phi_p$ und verifiziert, dass die Äquivalenzrelation der Nebenklassenbildung mithilfe des Komplexprodukts mit jener des Kerns zusammenfällt:

$$\begin{aligned}
g_1 \sim g_2 &\Leftrightarrow \Phi_p(g_1) = \Phi_p(g_2) \\
&\Leftrightarrow \Phi_{g_1}(p) = \Phi_{g_2}(p) \\
&\Leftrightarrow \Phi_{g_2^{-1} \cdot g_1}(p) = p \\
&\Leftrightarrow g_2^{-1} \cdot g_1 \in G_p \\
&\Leftrightarrow \exists g \in G_p : g_1 = g_2 \cdot g \Leftrightarrow g_1 G_p = g_2 G_p \quad . \quad (2.58)
\end{aligned}$$

Daraus folgert man, dass $G/\ker \Phi_p = G/G_p$ und somit das Bild der Abbildung im $\Phi_p = Gp$ mit dem Kobild $\text{coim } \Phi_p = G/G_p$ mengentheoretisch isomorph ist. Die Abbildung $\bar{\Phi}_p$ ist außerdem eine äquivalente Abbildung, denn seien $\bar{g} : G/G_p \rightarrow G/G_p$, $[h] \mapsto \bar{g}([h]) := [g \cdot h]$ und $\Phi_g : Gp \rightarrow Gp$, $p \mapsto \Phi_g(p)$ die Gruppenwirkungen auf dem Urbild- und Zielraum, dann gilt $\bar{\Phi}_p(\bar{g}([h])) = \Phi_g \circ \bar{\Phi}_p([h])$:

$$\begin{aligned}
\bar{\Phi}_p(\bar{g}([h])) &= \bar{\Phi}_p([g \cdot h]) = \Phi_p(g \cdot h) = \Phi(g \cdot h, p) \quad \text{bzw.} \\
\Phi_g \circ \bar{\Phi}_p([h]) &= \Phi_g \circ \Phi_p(h) = \Phi_{g \cdot h}(p) = \Phi(g \cdot h, p) \quad . \quad (2.59)
\end{aligned}$$

Damit sind G/G_p und Gp sogar als G -Räume isomorph. \square

Infolgedessen erhält man als Spezialfall für reguläre Gruppenwirkungen sofort ein Korollar:

Korollar 2.4.10. (Reguläre Gruppenwirkungen) Seien G eine topologische Gruppe, M ein topologischer Raum und Φ eine reguläre Gruppenwirkung, dann ist die Gruppe G isomorph zu dem Raum M .

Beweis. Da Φ_p transitiv ist, sprich im $\Phi_p = M$ und der Stabilisator aufgrund der freien Wirkung lediglich durch die triviale Gruppe $G_p = \{e\}$ gegeben ist, folgt sofort:

$$G/\{e\} \cong G \cong M \cong \text{im } \Phi_p \quad . \quad (2.60)$$

\square

In diesem Abschnitt haben wir vorrangig stetige Abbildungen auf Mannigfaltigkeiten untersucht, doch treffen wir in der Physik oft die Situation an, in der die Gruppenwirkung differenzierbar oder die Gruppe selbst eine differenzierbare Mannigfaltigkeit ist. Dieser Konstellation widmen wir uns nun.

2.5 Liegruppen und Flüsse

Erinnert man sich an die Definition einer topologischen Gruppe, so ist es konsequent, anstelle der Stetigkeit der Gruppenmultiplikation und Inversenbildung die Differenzierbarkeit jener Abbildungen zu fordern:

Definition 2.5.1. (Liegruppe) Eine Gruppe G , welche zugleich glatte Mannigfaltigkeit ist, heißt genau dann **Liegruppe**, wenn die Inversenbildung und die Gruppenverknüpfung differenzierbare Abbildungen sind, sprich $G \times G \rightarrow G$, $(g_1, g_2) \mapsto g_1^{-1} \cdot g_2$ glatt ist.

Der Tangentialraum am neutralen Element $T_e G$ ist nicht nur ein Vektorraum sondern sogar eine Liealgebra. Führt man die **Linkstranslation** $L_{\tilde{g}} : G \rightarrow G$, $g \mapsto \tilde{g} \cdot g$ ein, so lässt sich die Menge der **linksinvarianten Vektorfelder** $\mathcal{L}G$ konstruieren, sprich alle glatten Schnitte in das Tangentialbündel, welche invariant unter dem Pushforward der Linkstranslation sind:

$$\mathcal{L}G := \{V \in \mathfrak{X}(G) \mid L_{\tilde{g}*} V_g = V_{\tilde{g} \cdot g} \text{ für alle } \tilde{g}, g \in G\} \quad . \quad (2.61)$$

Ferner lässt sich zeigen,¹⁵ dass die Abbildung $\varepsilon : \mathcal{L}G \rightarrow T_e G, V \mapsto \varepsilon(V) := V_e$ eine Isomorphie zwischen den Liealgebren $\mathcal{L}G$ und $T_e G$ herstellt, d. h. die Liealgebra der linksinvarianten Vektorfelder hat die gleiche Dimension wie die Liegruppe selbst. In der physikalische Diktion hat sich der Begriff der Menge von *Erzeugenden* oder *infinitesimalen Transformationen* für die linksinvarianten Vektorfelder eingebürgert.

An dieser Stelle wollen wir demonstrieren, wie man ausgehend von einer Liegruppe G die Lieklammer der Liealgebra $\mathcal{L}G$ bestimmt. Dazu benutzt man die innere Wirkung $I : G \times G \rightarrow G, (g, \tilde{g}) \mapsto g \cdot \tilde{g} \cdot g^{-1}$ einer Gruppe auf sich selbst und berechnet ihre Tangentialabbildung $\text{Ad}_g := (T_e I_g)$. Wähle dazu eine Kurve β durch das neutrale Element e mit $\beta(0) = e$ und $\dot{\beta}(0) = B$ und berechne die Richtungsableitung zu $t = 0$:

$$\text{Ad}_g(B) = (T_e I_g)(B) = (T_e I_g)([\beta]) = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 I_g(\beta(t)) = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 g \cdot \beta(t) \cdot g^{-1} \quad . \quad (2.62)$$

Weiter kann man nun die Lieklammer $[\cdot, \cdot]_{\mathcal{L}} := \text{ad}(\cdot)(\cdot) := (T_e \text{Ad})(\cdot)(\cdot)$ als Tangentialabbildung bezüglich der ersten Stelle definieren, so dass für eine Kurve α mit $\alpha(0) = e$ und $\dot{\alpha}(0) = A$ gilt:

$$[A, B]_{\mathcal{L}} = \text{ad}(A)(B) = (T_e \text{Ad})([\alpha])([\beta]) = \left. \frac{d}{ds} \right|_0 \left. \frac{d}{dt} \right|_0 \alpha(s) \cdot \beta(t) \cdot \alpha(-s) \quad . \quad (2.63)$$

Offensichtlich verschwindet stets die Lieklammer, wenn G eine abelsche Gruppe ist, denn der Ausdruck $\alpha(s) \cdot \alpha(-s) = e$ ist unabhängig vom Parameter s . Ein anschauliches physikalisches Beispiel für diesen Spezialfall sind z. B. Translationen auf dem flachen \mathbb{R}^n .

Angenommen man verfüge über eine differenzierbare Gruppenwirkung der reellen Zahlen mit Addition $(\mathbb{R}, +)$ auf einer glatten Mannigfaltigkeit M , sprich $\Phi : \mathbb{R} \times M \rightarrow M, (t, p) \mapsto \Phi(t, p)$, so ist es möglich, für alle Punkte $p \in M$ eine Kurve $\gamma_p(t) := \Phi(t, p)$ auf M mit der Eigenschaft $\gamma_p(0) = p$ zu definieren. Infolgedessen können wir mithilfe des **Flusses** Φ jedem $p \in M$ eine Tangentialderivation $V_p \in T_p M$ zuordnen. Ferner beschreibt die Zuordnung $V : M \rightarrow TM, p \mapsto V(p) := (p, V_p)$ sogar ein glattes Vektorfeld, solange Φ eine glatte Abbildung in der zweiten Stelle ist. Glatte Vektorfelder und Flüsse sind entsprechend über das totale Zeitdifferential an der Stelle $t = 0$ miteinander verknüpft:

$$(Vf)(p) = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 f \circ \Phi(t, p) = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 (\Phi_t^* f)(p) \quad \text{für alle } p \in M \quad . \quad (2.64)$$

Das *Integrieren eines Vektorfeldes* V fällt demnach mit dem Auffinden eines Flusses Φ zusammen. Ist dieser für alle $t \in \mathbb{R}$ definiert, so nennt man das zugehörige Vektorfeld **vollständig**. Allgemein kann man diese *Richtungsableitung* von Funktionen f , welche als Differentialformen vom Grad 0 angesehen werden können, auf Formenfelder beliebigen Grades $\omega \in \Omega^k(M)$ mithilfe des Pullback ausweiten, die sogenannte **Lieableitung**:

$$(\mathcal{L}_V \omega)(W^{(1)}, \dots, W^{(k)}) := \left. \frac{d}{dt} \right|_0 (\Phi_t^* \omega)(W^{(1)}, \dots, W^{(k)}) \quad . \quad (2.65)$$

Über eine vollständige Induktion bezüglich des Formengrades vermag man zeigen, dass die Lieableitung von Differentialformen mit der folgenden Definition zusammenfällt:

Definition 2.5.2. (Cartans Zauberformel) Sei $\omega \in \Omega^k(M)$ ein Differentialformenfeld der Stufe k auf einer glatten Mannigfaltigkeit M , so ist seine **Lieableitung** entlang des Vektorfeldes $V \in \mathfrak{X}(M)$ durch die folgende Kombination aus innerer und äußerer Ableitung gegeben:

$$\mathcal{L}_V \omega = (d + \iota_V)^2 \omega = (d \circ \iota_V + \iota_V \circ d) \omega \quad . \quad (2.66)$$

¹⁵Eine explizite Konstruktion der Isomorphie findet man in [25].

Offensichtlich lässt die Lieableitung den Formengrad invariant, d. h. $\mathcal{L}_V : \Omega^k(M) \rightarrow \Omega^k(M)$. Außerdem vertauscht die Lieableitung mit dem äußeren Differential, denn

$$[\mathcal{L}_V, d] = \mathcal{L}_V \circ d - d \circ \mathcal{L}_V = d \circ \iota_V \circ d - d \circ \iota_V \circ d = 0 \quad . \quad (2.67)$$

Ferner gilt die Identität $[\mathcal{L}_V, \iota_W] = \iota_{[V, W]}$ und damit verschwindet insbesondere der Kommutator der Lieableitung entlang V mit der inneren Ableitung ι_V , so dass $[\mathcal{L}_V, \iota_V] = 0$.

Analog lässt sich die Lieableitung eines Vektorfeldes $W \in \mathfrak{X}(M)$ entlang von $V \in \mathfrak{X}(M)$ angeben:

Definition 2.5.3. (Lieableitung eines Vektorfeldes) Seien $W \in \mathfrak{X}(M)$ ein glattes Vektorfeld und $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ eine differenzierbare Funktion, so ist die **Lieableitung** entlang des Vektorfeldes $V \in \mathfrak{X}(M)$ mit zugehörigem Fluss Φ durch den folgenden Ausdruck gegeben:

$$(\mathcal{L}_V W)f := \left(\frac{d}{dt} \Big|_0 \Phi_t^* W \right) f := \frac{d}{dt} \Big|_0 \Phi_t^* \circ (W \circ (\Phi_{-t}^* \circ f)) \quad . \quad (2.68)$$

Die Lieableitung eines Vektorfeldes $W \in \mathfrak{X}(M)$ entlang $V \in \mathfrak{X}(M)$ fällt mit dem Kommutator beider Vektorfelder zusammen, denn sei Ψ_s der zu W zugehörige Fluss, dann gilt:

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}_V W)f &= \frac{d}{dt} \Big|_0 \Phi_t^* \circ (W \circ (\Phi_{-t}^* \circ f)) \\ &= \frac{d}{dt} \Big|_0 \frac{d}{ds} \Big|_0 f \circ \Phi_{-t} \circ \Psi_s \circ \Phi_t \\ &= \frac{d}{ds} \Big|_0 \left((-Vf) \circ \Psi_s \circ \Phi_0 + V(f \circ \Psi_{-0} \circ \Psi_s) \right) \\ &= V(Wf) - W(Vf) \quad . \end{aligned} \quad (2.69)$$

Dementsprechend bildet die Lieableitung Vektorfelder auf Vektorfelder ab. Die Lieableitung ist eine Derivation in dem Sinne, dass sie die Leibnizregel bezüglich des Dachproduktes und der natürlichen Paarung erfüllt, d. h. $\mathcal{L}_V(\omega \wedge \sigma) = \mathcal{L}_V \omega \wedge \sigma + \omega \wedge \mathcal{L}_V \sigma$ mit $\omega, \sigma \in \Omega(M)$ bzw.

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_V(\omega \langle W^{(1)}, \dots, W^{(k)} \rangle) &= (\mathcal{L}_V \omega) \langle W^{(1)}, \dots, W^{(k)} \rangle + \omega \langle \mathcal{L}_V W^{(1)}, \dots, W^{(k)} \rangle + \dots \\ &\quad + \omega \langle W^{(1)}, \dots, \mathcal{L}_V W^{(k)} \rangle \quad \text{für } \omega \in \Omega^k(M), W^{(l)} \in \mathfrak{X}(M) \quad . \end{aligned} \quad (2.70)$$

Ferner ist die Lieableitung ein Liealgebromorphismus, denn sie erhält die Liealgebrastruktur von Vektorfeldern.

$$[\mathcal{L}_V, \mathcal{L}_W] = \mathcal{L}_{[V, W]} \quad . \quad (2.71)$$

Man rufe sich zum Vergleich die Ähnlichkeit mit der *Dirac'schen Quantisierungsabbildung* aus dem einführnden Kapitel in das Gedächtnis. Diese Eigenschaft verkörpert nichts anderes als die bereits bekannte *Jacobiidentität für Vektorfelder*, denn wendet man die letzte Gleichung auf ein beliebiges Vektorfeld $U \in \mathfrak{X}(M)$ an, so erhält man sofort

$$\begin{aligned} 0 &= ([\mathcal{L}_V, \mathcal{L}_W] - \mathcal{L}_{[V, W]})U = \mathcal{L}_V[W, U] - \mathcal{L}_W[V, U] - \mathcal{L}_{[V, W]}U \\ &= [V, [W, U]] - [W, [V, U]] - [[V, W], U] \\ &= [V, [W, U]] + [W, [U, V]] + [U, [V, W]] \quad . \end{aligned} \quad (2.72)$$

Die Lieableitung fällt, wie wir bereits sahen, für Funktionen mit der Richtungsableitung zusammen und hat auch für die restlichen behandelten geometrischen Objekte eine analoge Interpretation. Angenommen man verfüge über ein geometrisches Objekt Λ , welches im allgemeinsten Fall durch ein Tensorfeld

repräsentiert werden soll, dann ziehe man dieses entlang des Flusses zurück und bestimme die Änderung dieses Vorgangs an der Stelle $t = 0$, sprich:

$$\mathcal{L}_V \Lambda = \frac{d}{dt} \Big|_0 \Phi_t^* \Lambda \quad . \quad (2.73)$$

Bildlich gesprochen macht man einen Schnappschuss vom geometrischen Objekt, wie es sich *mit dem Fluss* bewegt, und versucht die Veränderung im nächsten Moment zu evaluieren. Dieser Anschauung verdankt sie den humoristisch angehauchten Namen **Fischerableitung**. Als physikalisches Beispiel nehme man eine zeitunabhängige Hamilton'sche Funktion $H : T^*Q \rightarrow \mathbb{R}$ und den Fluss der physikalischen Bahnen durch den Phasenraum $\Phi : \mathbb{R} \times T^*Q \rightarrow T^*Q$ und bestimme ihre Veränderung entlang der zeitlichen Evolution, sprich

$$\mathcal{L}_V H = \frac{d}{dt} \Big|_0 \Phi_t^* H = \frac{d}{dt} \Big|_0 H \circ \Phi_t = VH \quad . \quad (2.74)$$

Naiv würde man erwarten, dass $\mathcal{L}_V H$ stets verschwindet, solange das Vektorfeld $V \in \mathfrak{X}(T^*Q)$ zu einem Fluss gehört, der physikalische Bahnen repräsentiert. Dass dem auch so ist, kann im Rahmen der symplektischen Geometrie gezeigt werden, dem mathematischen Apparat, welcher der Hamilton'schen Mechanik zugrundeliegt.

2.6 Symplektische Geometrie

Im Rahmen der universitären Ausbildung trifft man symplektische Strukturen zuerst in der Beschreibung klassischer Systeme an. Man erörtert kanonische Transformationen auf dem Phasenraum und untersucht die Erhaltung des Phasenraumvolumens mithilfe des Satzes von Liouville. Wir wollen hier einen möglichst allgemeinen Weg beschreiten und die klassische Mechanik im Rahmen des Hamiltonformalismus auf symplektischen Mannigfaltigkeiten wiederholen.

Definition 2.6.1. (Symplektische Mannigfaltigkeit) Seien M eine glatte Mannigfaltigkeit gerader Dimension $m = 2n$ und $\omega \in \Omega^2(M)$ eine Zweiform, so heißt das Tupel (M, ω) **symplektische Mannigfaltigkeit** genau dann, wenn

$$d\omega = 0 \quad \text{und} \quad \omega\langle V, W \rangle = 0 \text{ für alle } W \in \mathfrak{X}(M) \Rightarrow V = 0 \quad . \quad (2.75)$$

Das Verschwinden von ω nach Anwenden der Cartanableitung d ist gleichbedeutend damit, dass es sich um eine geschlossene Differentialform handelt und die letzte Forderung impliziert, dass ω punktweise eine nichtausgeartete Bilinearform ist.

Sei (x, U) eine Karte einer symplektischen Mannigfaltigkeit, so sichert das **Theorem von Darboux** zu, dass man stets Koordinaten $(q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n) \in x(U)$ finden kann, so dass ω die bemerkenswert einfache Form

$$\omega = \sum_{i=1}^n dq^i \wedge dp_i \quad (2.76)$$

annimmt. Von nun an seien diese Koordinaten die kanonische Wahl für die weiteren Betrachtungen. Mithilfe der Zweiform ω lassen sich jetzt analog zu den vorangegangenen Betrachtungen erneut die *musikalischen Isomorphismen* \flat und \sharp einführen:

$$\flat : \mathfrak{X}(M) \rightarrow \Omega^1(M), \quad V \mapsto V^\flat := \omega\langle V, \cdot \rangle \quad \text{und} \quad \sharp := \flat^{-1} \quad . \quad (2.77)$$

Sei $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ eine glatte Funktion, so heißt das Vektorfeld $X_f := df^\sharp$ **hamiltonsches Vektorfeld** und hat die Koordinatendarstellung:

$$X_f := \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial}{\partial q^j} - \frac{\partial f}{\partial q^j} \frac{\partial}{\partial p_j} \right) \quad \text{denn} \quad \omega\langle X_f, \cdot \rangle = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial p_j} \delta_j^i dp_i + \frac{\partial f}{\partial q^j} \delta_i^j dq^i \right) \equiv df \quad . \quad (2.78)$$

Für je zwei hamiltonsche Vektorfelder wird die Kontraktion mit der kanonischen Zweiform ω Poissonklammer genannt.

Definition 2.6.2. (Poissonklammer) Seien f und g zwei glatte Funktionen auf M mit den hamiltonschen Vektorfeldern X_f respektive X_g , dann wird die Zuordnung

$$[\cdot, \cdot] : \mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R}) \times \mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R}), (f, g) \mapsto [f, g] := \omega\langle X_f, X_g \rangle \quad (2.79)$$

Poissonklammer genannt. Diese Definition fällt tatsächlich mit der Poissonklammer aus der klassischen Mechanik zusammen, denn

$$\omega\langle X_f, X_g \rangle = X_f^\flat\langle X_g \rangle = df\langle X_g \rangle = X_g f = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial g}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial q^i} - \frac{\partial g}{\partial q^i} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right) . \quad (2.80)$$

An dieser Stelle wollen wir kurz innehalten und dem eingeführten Formalismus ein wenig Leben einhauchen: Wählt man als physikalisches Beispiel eine zeitabhängige Hamilton'sche Funktion $H : \mathbb{R} \times M \rightarrow \mathbb{R}$, so liest man dem zugehörigen hamiltonschen Vektorfeld $X_H = dH^\sharp$ die kanonischen Gleichungen durch einen Koeffizientenvergleich ab:

$$X_H = \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q^i} - \frac{\partial H}{\partial q^i} \frac{\partial}{\partial p_i} \Rightarrow \dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{und} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i} . \quad (2.81)$$

Das bedeutet, dass die zeitliche Evolution des physikalischen Systems durch die zugehörige Hamilton'sche Funktion bestimmt wird. Ferner ist es möglich, jeder Observablen auf dem Phasenraum, welche stets durch eine glatte Funktion $\mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R})$ repräsentiert wird, ein hamiltonsches Vektorfeld zuzuweisen und damit das Konzept der kanonischen Gleichungen zu verallgemeinern.

Die kanonische Zweiform ω stattet unsere symplektische Mannigfaltigkeit M immer mit einer Volumenform $\Theta \in \Omega^{2n}(M)$ aus, mithilfe der Vorschrift

$$\Theta := \frac{(-1)^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor}}{n!} \bigwedge_{k=1}^n \sum_{i=1}^n dq^i \wedge dp_i = dq^1 \wedge \cdots \wedge dq^n \wedge dp_1 \wedge \cdots \wedge dp_n , \quad (2.82)$$

wobei $\lfloor \cdot \rfloor$ das Abrunden auf eine ganze Zahl beschreibt. Somit ist jede symplektische Mannigfaltigkeit M (lokal) orientierbar und hat das wohldefinierte Volumen $\text{Vol}(U \subseteq M) = \int_U \Theta$. In der Physik versucht man oft die Menge der zulässigen Transformationen auf der zugrundeliegenden Mannigfaltigkeit durch jene Untergruppe der Automorphismen auf M festzulegen, die ein gewisses Objekt invariant lassen. Man erinnere sich dazu an die Lorentzgruppe als Untergruppe der invertierbaren Matrizen auf dem \mathbb{R}^4 , welche den metrischen Tensor unverändert lassen. Analog scheint es schlüssig, die Menge jener Transformationen bestimmen zu wollen, welche die kanonische Zweiform und damit die Volumenform erhalten.

Definition 2.6.3. (Symplektomorphismen) Seien (M, ω) und $(N, \tilde{\omega})$ zwei symplektische Mannigfaltigkeiten, dann heißt eine Abbildung $F : U \subseteq M \rightarrow V \subseteq N$ **lokaler Symplektomorphismus** oder **lokale kanonische Transformation** genau dann, wenn

$$F^* \tilde{\omega} = \omega . \quad (2.83)$$

Für den Spezialfall $U = M$ und $V = N$ spricht man von einem **globalen Symplektomorphismus**. Ferner wird für $M = N$ die Untergruppe der Automorphismen auf M definiert, welche das Phasenraumvolumen invariant lassen, sprich die symplektische Gruppe $Sp(M)$:

$$Sp(M) := \{F : M \rightarrow M \mid F^* \omega = \omega\} . \quad (2.84)$$

Betrachtet man ein Vektorfeld $V \in \mathfrak{X}(M)$ mit zugehörigem lokalem Fluss $\Phi : I \subseteq \mathbb{R} \times M \rightarrow M$, dessen partielle Abbildung $\Phi_t : M \rightarrow M$ lokaler Symplektomorphismus ist, dann überträgt sich diese Eigenschaft auf das Verschwinden der Lieableitung angewandt auf die kanonische Zweiform, denn

$$\mathcal{L}_V \omega = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 \Phi_t^* \omega = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 \omega = 0 \quad . \quad (2.85)$$

Jene Vektorfelder, welche aus lokal symplektischen Flüssen stammen, entlang dieser demnach die kanonische Zweiform konstant ist, werden **symplektische** oder **lokal hamiltonsche Vektorfelder** genannt.¹⁶ (Global) hamiltonsche Vektorfelder sind stets symplektisch oder lokal hamiltonsch, denn:

$$(\mathcal{L}_{X_f} \omega)(\cdot, \cdot) = ((d \circ \iota_{X_f} + \iota_{X_f} \circ d) \omega)(\cdot, \cdot) = d\omega(X_f, \cdot) = d \circ df = 0 \quad . \quad (2.86)$$

Die Umkehrung ist nicht ohne weiteres möglich, denn es existieren durchaus symplektische Vektorfelder, die sich nicht als symplektischer Gradient einer glatten Funktion $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ schreiben lassen. Jedoch hat man das Kriterium zur Hand, dass der Kommutator zweier symplektischer Vektorfelder V, W hamiltonsch ist, denn

$$\begin{aligned} \iota_{[V, W]} \omega &= (\mathcal{L}_V \circ \iota_W - \iota_W \circ \mathcal{L}_V) \omega \\ &= (d \circ \iota_V + \iota_V \circ d) \circ \iota_W \omega \\ &= d(\omega(W, V)) + \iota_V \circ (\mathcal{L}_W - \iota_W \circ d) \omega \\ &= -d(\omega(V, W)) \quad . \end{aligned} \quad (2.87)$$

Die konkrete Fragestellung der Existenz von Stammformen ist Teilgebiet der de-Rham-Kohomologie und soll hier nicht weiter behandelt werden. Wir wollen uns vorerst darauf beschränken, dass jede geschlossene Einsform genau dann exakt ist, wenn die erste de-Rham-Kohomologiegruppe $H_{\text{dR}}^1(M) = Z^1(M)/B^1(M)$ der zugrundeliegenden Mannigfaltigkeit trivial ist.

Weiter verifiziert man die Identität $X_{[f, g]} = -[X_f, X_g]$ und ziehe den Schluss, dass das Bilden eines hamiltonschen Vektorfeldes $X_{(\cdot)} : C^\infty(M, \mathbb{R}) \rightarrow \mathfrak{X}_{\text{Ham}}(M)$, $f \mapsto X_f := df^\sharp$ bis auf das Vorzeichen ein Liealgebrahomomorphismus ist.

$$\begin{aligned} X_{[f, g]} &= d(\partial_{q^i} f \partial_{p_i} g - \partial_{q^i} g \partial_{p_i} f)^\sharp \\ &= (\partial_{q^j} (\partial_{q^i} f \partial_{p_i} g) dq^j + \partial_{p_j} (\partial_{q^i} f \partial_{p_i} g) dp_j - \partial_{q^j} (\partial_{q^i} g \partial_{p_i} f) dq^j - \partial_{p_j} (\partial_{q^i} g \partial_{p_i} f) dp_j)^\sharp \\ &= (\partial_{p_j} (\partial_{q^i} f \partial_{p_i} g) - \partial_{p_j} (\partial_{q^i} g \partial_{p_i} f)) \partial_{q^j} + (\partial_{q^j} (\partial_{q^i} g \partial_{p_i} f) - \partial_{q^j} (\partial_{q^i} f \partial_{p_i} g)) \partial_{p_j} \\ &= -(\partial_{p_i} f \partial_{q^i} - \partial_{q^i} f \partial_{p_i}) (\partial_{p_j} g \partial_{q^j} - \partial_{q^j} g \partial_{p_j}) + (\partial_{p_i} g \partial_{q^i} - \partial_{q^i} g \partial_{p_i}) (\partial_{p_j} f \partial_{q^j} - \partial_{q^j} f \partial_{p_j}) \\ &= -[X_f, X_g] \end{aligned} \quad (2.88)$$

Leider handelt es sich *nicht* um einen Liealgebraisomorphismus, weil der Kern der Abbildung $X_{(\cdot)}$ durch die konstanten Funktionen gegeben ist und damit eine Freiheit bei der Wahl der Konstanten bleibt. Konsequenterweise beseitigt man das Vorzeichen, indem man auf das negative hamiltonsche Vektorfeld abbildet, so dass man eine Zuordnung zwischen der Liealgebra der glatten Funktionen mit der Poissonklammer und den hamiltonschen Vektorfeldern mit dem Kommutator erhält:

$$j : (C^\infty(M, \mathbb{R}), [\cdot, \cdot]) \rightarrow (\mathfrak{X}_{\text{Ham}}(M), [\cdot, \cdot]), f \mapsto j(f) := -X_f \quad . \quad (2.89)$$

Mithilfe der Lieableitung entlang hamiltonscher Vektorfelder kann man nun sehr einfach eine der *fundamentalsten* Aussagen der klassischen Mechanik nachvollziehen: Angenommen die zeitabhängige hamiltonsche Funktion $H : \mathbb{R} \times M \rightarrow \mathbb{R}$ sei invariant unter der Einparametergruppenwirkung $\Phi_t : M \rightarrow M$, welche mit dem Fluss eines hamiltonschen Vektorfeldes zu einer Observablen $f : \mathbb{R} \times M \rightarrow \mathbb{R}$

¹⁶Das bedeutet, dass die symplektischen Vektorfelder die *Killingvektorfelder* der symplektischen Geometrie sind.

zusammenfällt. Die Lieableitung der Hamilton'sche Funktion entlang des hamiltonschen Vektorfeldes $X_f = df^\sharp$ ist dann offensichtlich durch die Poissonklammer von H und f gegeben:

$$0 = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 \Phi_t^* H = \mathcal{L}_{X_f} H = [H, f] \quad . \quad (2.90)$$

Auf der anderen Seite gilt aufgrund der kanonischen Gleichungen die folgende Identität:

$$[H, f] = X_f H = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q^i} - \frac{\partial f}{\partial q^i} \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) = \sum_{i=1}^n \left(-\frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i - \frac{\partial f}{\partial q^i} \dot{q}^i \right) = - \left(\frac{d}{dt} f - \frac{\partial}{\partial t} f \right) \quad . \quad (2.91)$$

Hängt die Observable f nicht explizit von der Zeit ab, folgt sofort, dass ihr totales Differential nach der Zeit, sprich entlang physikalischer Bahnen, verschwindet. Diese Aussage wird im **Noethertheorem der Hamilton'schen Mechanik**¹⁷ festgehalten:

Satz 2.6.4. (Noethertheorem) Seien $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ eine nicht explizit zeitabhängige Observable auf dem Phasenraum und $H : \mathbb{R} \times M \rightarrow \mathbb{R}$ die Hamilton'sche Funktion eines physikalischen Systems, welche unter der Einparametergruppenwirkung des zugehörigen hamiltonschen Vektorfeldes X_f invariant ist, so gilt die folgende Identität:

$$0 = -\mathcal{L}_{X_f} H = [f, H] = \frac{d}{dt} f \quad . \quad (2.92)$$

Geht man zuerst von der Gruppenwirkung aus, so beschränkt sich das Bestimmen der Observablen f auf das Auffinden der Stammfunktion des symplektischen Gradienten X_f^\flat . Man bedenke, dass das Noethertheorem im Rahmen der symplektischen Geometrie weitaus aussagekräftiger als in der Lagrange'schen Mechanik ist, aufgrund der Tatsache, dass hier die Symmetrien des *Phasenraums* M und nicht ausschließlich die kleinere Menge der Symmetrien des *Konfigurationsraums* \mathcal{Q} ausschlaggebend sind. Es kann demnach durchaus Erhaltungsgrößen geben, die *keine* entsprechende Symmetrie im Konfigurationsraum aufweisen. Der Laplace-Lenz-Runge-Vektor im Zentralpotential des Zweikörperproblems sei als Beispiel für solch eine Konstellation angeführt.

Ferner ist es bemerkenswert, dass bis hier der Konfigurationsraum \mathcal{Q} als Raum der Orte noch keine Rolle gespielt hat, d. h. dass die klassische Mechanik sogar auf Mannigfaltigkeiten formuliert werden kann, die sich *nicht* als Kotangentenbündel $T^* \mathcal{Q}$ eines zugrundeliegenden Konfigurationsraums schreiben lassen. Der Vollständigkeit halber wollen wir jedoch zeigen, wie man das Kotangentenbündel tautologisch zu einer symplektischen Mannigfaltigkeit erheben kann:

Definition 2.6.5. Seien $T^* \mathcal{Q}$ das Kotangentenbündel von \mathcal{Q} und $\pi : T^* \mathcal{Q} \rightarrow \mathcal{Q}$, $(q, p_q) \mapsto q$ die kanonische Projektion auf den Fußpunkt, dann heißt jene Einsform $\tau \in \Omega^1(T^* \mathcal{Q})$ **tautologische** oder **Liouville'sche Einsform**, welche folgender Bedingung genügt:

$$\langle\langle \tau_{(q, p_q)}, V_{(q, p_q)} \rangle\rangle_{(q, p_q)} = \langle\langle p_q, \pi_* V_{(q, p_q)} \rangle\rangle_q \quad \text{für alle } (q, p_q) \in T^* \mathcal{Q} \text{ und } V \in \mathfrak{X}(T^* \mathcal{Q}) \quad . \quad (2.93)$$

In einer Koordinatendarstellung hat die Liouville'sche Einsform die Gestalt $\tau = p_i dq^i$ und erhebt das Kotangentenbündel infolgedessen mit einer kanonischen Zweiform via $\omega := -d\tau$ zu einer symplektischen Mannigfaltigkeit. Eine alternative Definition kann mithilfe eines Schnittes $\sigma \in \Omega^1(\mathcal{Q})$ getroffen werden: Die kanonische Einsform ist dann dadurch bestimmt, dass sie die Identität $\sigma^* \tau = \sigma$ erfüllt:

$$\langle\langle \sigma^* \tau_{(q, \sigma_q)}, W_q \rangle\rangle_q = \langle\langle \tau_{(q, \sigma_q)}, \sigma_* W_q \rangle\rangle_{(q, \sigma_q)} = \langle\langle \sigma_q, \pi_* \sigma_* W_q \rangle\rangle_q = \langle\langle \sigma_q, \text{id}_{\mathcal{Q}*} W_q \rangle\rangle_q = \langle\langle \sigma_q, W_q \rangle\rangle_q \quad . \quad (2.94)$$

An dieser Stelle haben wir das Rüstzeug für eine moderne Beschreibung der klassischen Mechanik beisammen und wollen nun zum Quantisierungsprogramm von Christopher Isham aufbrechen. Wir konnten an vielen Stellen bereits erahnen und werden sehen, dass die Hamilton'sche Mechanik der ideale Ausgangspunkt für die Erörterung der Quantisierung ist und es ist nicht dem Zufall überlassen, dass der

¹⁷In der nichtrelativistischen Quantenmechanik findet man eine analoge Betrachtung im Rahmen der *Bewegungsgleichungen von Heisenberg* wieder.

historische Weg ebenso diese Fährte beschriftet. Die starke Ähnlichkeit der Heisenberg'schen Bewegungsgleichungen mit der klassischen Beschreibung durch Poissonklammern, das Noethertheorem, welches sein Pendant mit selbstadjungierten Operatoren in der Quantenmechanik wiederfindet oder das Ehrenfesttheorem, das eine Verbindung zwischen klassischer und quantisierter Physik herstellt, sollen uns einige Anhaltspunkte für diese Anschauung liefern.

3 Quantisierung mit der kanonischen Gruppe

WIE wir gesehen haben, trägt die nichtrelativistische Quantenmechanik starke Züge der symplektischen Geometrie. Darum scheint es folgerichtig, den Sprung von der klassischen Mechanik hin zu einer quantisierten Theorie innerhalb dieses Rahmens zu vollziehen. Die Quantisierung mit der kanonischen Gruppe, wie von Christopher Isham in [8] präsentiert, schlägt genau in diese Kerbe, indem sie versucht, eine Quantisierungsvorschrift für klassische Systeme durch Gruppenwirkungen auf einer symplektischen Mannigfaltigkeit zu finden. Dabei liegt dem Verfahren die Idee zu Grunde, dass die kanonische Gruppe aus der Geometrie des Phasenraums gewonnen werden kann und somit auf eine natürliche Art und Weise die Menge der quantisierbaren Observablen festlegt wird. In dieser Hinsicht verfügen wir über eine transparente Vorgehensweise, welche aus einem physikalischen Gesichtspunkt leicht motiviert werden kann und die geometrischen Züge der Natur unterstreicht.

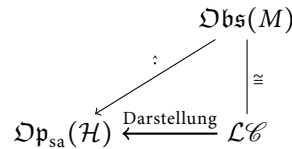
In diesem Kapitel wollen wir zunächst die zugrundeliegende Idee illustrieren. Danach werden wir die genaue Umsetzung im Detail diskutieren und die mathematische Formulierung des Quantisierungsverfahrens explizit fassen. Abschließend erörtern wir die konventionelle Quantenmechanik als Spezialfall für den Phasenraum $M = T^*\mathbb{R}$.

3.1 Ein grober Überblick

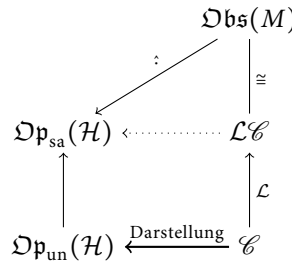
Wir wissen bereits, dass sich die Menge der klassischen Observablen durch eine Liealgebra von glatten Funktionen $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ auf dem Phasenraum mit der Poissonklammer $[\cdot, \cdot]$ beschreiben lässt. Im Abschnitt 1.4 über die Quantisierungsabbildung von Dirac haben wir festgestellt, dass *keine* wohldefinierte Abbildung $\hat{\cdot} : C^\infty(M, \mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{D}\mathfrak{p}_{\text{sa}}(\mathcal{H})$ existiert, welche einer Observablen f einen selbstadjungierten Operator \hat{f} zuordnet. Es wurden auch verschiedene Auswege diskutiert, welche die Konstruktion einer Quantisierungsabbildung dennoch ermöglichen. Für unsere Zwecke wollen wir die Menge der quantisierbaren Observablen einschränken und bewahren im Gegenzug die Eigenschaft, dass $\hat{\cdot}$ ein Liealgebromorphismus ist. Wir begründen unsere Wahl mit dem Erhalt lokaler, geometrischer Strukturen, welche durch Liealgebromorphismen transportiert werden zu Ungunsten der Freiheit, alle glatten Funktionen auf dem Phasenraum quantisieren zu können. Diese Einschränkung wirkt auf den ersten Blick drastisch, jedoch werden wir sehen, dass es physikalisch nicht gerechtfertigt ist, jede beliebige Funktion auf dem Phasenraum als Observable und damit als Messgröße betrachten zu wollen. Die Mehrheit der in der Physik ermittelten Größen werden nämlich gar nicht gemessen sondern sind lediglich Funktionen von einigen wenigen Messgrößen. In der Regel verfügt der Physiker im Experiment lediglich über die Möglichkeit, Orte zu messen. Selbst die Berechnung des Impulses eines geladenen Elementarteilchens im Detektor wird auf die Bestimmung des Krümmungsradius im magnetischen Feld zurückgeführt. Gleiches gilt beim Vermessen von Zeitintervallen: Man bedient sich eines wiederkehrenden physikalischen Prozesses und *definiert* ihn als periodisch, indem man davon ausgeht, dass die „Zeitspanne“ zwischen je zwei zyklischen Punkten gleich lang ist. Ausgehend davon legt man die Sekunde als eine explizite Anzahl von durchlaufenen Perioden fest. Das impliziert jedoch, dass selbst die Sekunde durch die Messung eines Ortes bestimmt wird. Fast alle physikalischen Messgrößen sind demnach gar nicht gemessen, sondern aus einer Vielzahl von Ortsmessungen berechnet worden. Es ist darum in einer fundamentalen Theorie wie der Quantenmechanik nicht zwingend nötig, für jede ausrechenbare Größe über einen selbstadjungierten Operator zu verfügen. Mehr noch wirft sich die philosophische Frage auf, welche der physikalischen Größen überhaupt physikalisch sind und welche lediglich als Abstraktions-

konzept eingeführt worden sind. Ein praktischer Beleg dieser Anschauung offenbart sich einem jeden, welcher einem Grundschüler das Konzept von Energie erklären möchte, wohingegen die Bedeutungen von Ort und Geschwindigkeit einfacher zu vermitteln sind.

Konkret suchen wir also eine Teilmenge der glatten Funktionen $C^\infty(M, \mathbb{R})$, welche die lineare Hülle einiger weniger **fundamentaler Funktionen** f_i ist. Diese beschreiben einen vollständigen Satz von irreduziblen Observablen, d. h. jede weitere Funktion g , welche mit allen f_i bezüglich der Poissonklammer vertauscht, ist eine Konstante. Eine detaillierte Behandlung von irreduziblen Operatoren kann mithilfe der Lemmata von Schur in [27] nachvollzogen werden. Die fundamentalen Funktionen f_i korrespondieren zu den zugehörigen selbstadjungierten Operatoren \hat{f}_i auf einem Hilbertraum \mathcal{H} . Die Quantisierungsabbildung ist dann ein Liealgebrahomomorphismus von der Menge $\mathfrak{Obs}(M)$ der **fundamentalen Observablen** in die Menge $\mathfrak{Op}_{sa}(\mathcal{H})$ der selbstadjungierten Operatoren auf einem Hilbertraum. Die fundamentalen Observablen und die Poissonklammer lassen sich mathematisch in der **kanonischen Liealgebra** $\mathcal{L}\mathcal{C}$ zusammenfassen. Infolgedessen kann man dann die Quantisierungsabbildung $\hat{\cdot}$ alternativ über einen Umweg als Darstellung der kanonischen Liealgebra beschreiben:



Auf dieser Stufe begegnet man einigen Unwegsamkeiten, wie z. B. der Problematik, dass in der konventionellen Quantenmechanik nur exponentierbare Darstellungen von $\mathcal{L}\mathcal{C}$ physikalisch realisiert sind oder der Eigenschaft unbeschränkter, selbstadjungierter Operatoren, dass sie nur auf einer Teilmenge des Hilbertraums definiert sind.¹ Beide Schwierigkeiten umgeht man, indem man anstatt mit der Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{C}$ mit der zugehörigen Liegruppe \mathcal{C} startet und zu dieser unitäre Darstellungen auf \mathcal{H} sucht, welche als Isometrien des Hilbertraums automatisch beschränkt sind. Daraus lassen sich dann die selbstadjungierten Operatoren der exponentierbaren Darstellung zurückgewinnen:



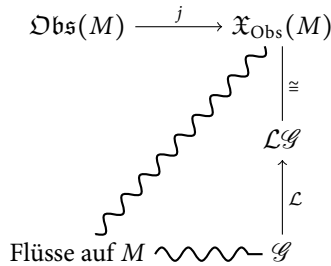
Durch die **kanonische Gruppe** \mathcal{C} werden damit die kanonischen Vertauschungsrelationen der klassischen Theorie sowie der Quantenmechanik festgelegt.

Leider ist zu diesem Zeitpunkt weder die Menge $\mathfrak{Obs}(M)$ der fundamentalen Observablen noch die kanonische Gruppe \mathcal{C} bekannt, d. h. wir wissen immer noch nicht, wie man die Einschränkung an die Observablen zu treffen hat. Es gibt jedoch noch einen anderen Weg, um die kanonische Gruppe mithilfe von hamiltonschen Vektorfeldern zu bestimmen:

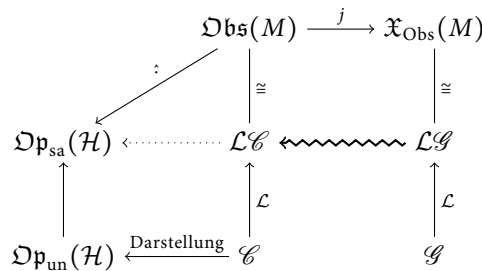
Wir haben im vorangegangenen Kapitel herausgearbeitet, dass man einer klassischen Observable stets ein hamiltonsches Vektorfeld mithilfe des Liealgebrahomomorphismus $j : f_i \mapsto -X_{f_i}$ zuweisen kann. Die hamiltonschen Vektorfelder X_{f_i} der Basisobservablen gehören jeweils zu einem Fluss Φ_i , welcher genau dann eine Einparametergruppenwirkung $\Phi_i : \mathbb{R} \times M \rightarrow M$ auf dem Phasenraum ist, wenn er

¹Die Exponenzierbarkeit der Darstellung wird z. B. im *Stone-von Neumann Theorem* [23] gefordert und der *Satz von Hellinger-Toeplitz* [20] sagt aus, dass unbeschränkte selbstadjungierte Operatoren höchstens auf einem dichten Teilraum von \mathcal{H} definiert sein können.

vollständig ist. Die Gesamtheit der Einparameterflüsse lässt sich zu einer Gruppenwirkung $\Phi : \mathcal{G} \times M \rightarrow M$ einer Liegruppe \mathcal{G} zusammenfassen. Aufgrund dieser geometrischen Interpretation kann man die Gruppe \mathcal{G} oft geschickt raten und ihre Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G}$ ist dann isomorph zu den hamiltonschen Vektorfeldern, welche aus den fundamentalen Observablen stammen:



Eine Gruppenwirkung von \mathcal{G} auf dem Phasenraum M , welche aus den fundamentalen Observablen $\mathfrak{Obs}(M)$ konstruierbar ist, beachtet demnach die symplektische Struktur der zugrundeliegenden Mannigfaltigkeit, denn aus ihr müssen kanonische Transformationen generiert werden können. Darum werden wir \mathcal{G} in Zukunft als **geometrische Gruppe** bezeichnen. Im Gegensatz zur vorangegangenen Konstruktion von Darstellungen der kanonischen Gruppe \mathcal{C} haben wir hier erste Anhaltspunkte gefunden, welche Eigenschaften die geometrische Gruppe \mathcal{G} besitzen sollte und damit wie die fundamentalen Observablen $\mathfrak{Obs}(M)$ aufgefunden werden können. Wir werden sehen, dass eine Konstruktionsvorschrift existiert, mit der man die kanonische Gruppe \mathcal{C} direkt aus der geometrischen Gruppe \mathcal{G} bestimmen kann, d. h. das Auffinden einer geeigneten geometrischen Gruppe resultiert in der Kenntnis der kanonischen Vertauschungsrelationen und der fundamentalen Observablen. Somit haben wir ein Werkzeug zur Hand, mit dessen Hilfe wir durch die geometrischen Eigenschaften des Phasenraums die algebraischen Eigenschaften der zugehörigen Quantenmechanik ableiten können. In unserem Fall wird die Verbindung zwischen beiden Gruppen auf der Stufe ihrer Liealgebren $\mathcal{L}\mathcal{G}$ und $\mathcal{L}\mathcal{C}$ hergestellt:



In der Realität ist die Vorgabe der fundamentalen Observablen $\mathfrak{Obs}(M)$ und die anschließende Konstruktion der geometrischen Gruppe \mathcal{G} unpraktikabel. Weiter hätten wir dann bereits Kenntnis über die kanonische Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{C}$ und müssten nicht den Umweg über hamiltonsche Vektorfelder gehen. Darum studiert man zunächst, welchen Kriterien eine geometrische Gruppe und ihre Gruppenwirkung auf dem Phasenraum genügen müssen, damit sie auf eine natürliche Art und Weise kanonische Transformationen erzeugen können und kehrt die Prozedur anschließend um: Man geht von einer geeigneten Gruppenwirkung auf dem Phasenraum aus und bestimmt aus ihr die kanonische Liealgebra und die fundamentalen Observablen.

An dieser Stelle trifft man eine Wahl aus einer großen Anzahl von Gruppenwirkungen auf dem Phasenraum. Jede dieser Möglichkeiten mündet unter Umständen in unterschiedlichen Vertauschungsrelationen und fundamentalen Observablen. Infolgedessen legt der Phasenraum M die geometrische Gruppe \mathcal{G} und ihre Wirkung *nicht* eindeutig fest. Diese Eigenschaft ist entgegen der naiven Vermutung aber kein Makel des Quantisierungsverfahrens, denn zieht man in Betracht, dass verschiedene Quantenme-

chaniken den gleichen klassischen Limes besitzen können,² dann erwartet man sogar eine Freiheit in der Wahl der geometrischen Gruppe.

3.2 Die konkrete mathematische Umsetzung

In diesem Abschnitt wollen wir die grobe Idee des Quantisierungsverfahrens verfeinern und die verwendeten mathematischen Mittel vorstellen. Ausgangspunkt für die weiteren Betrachtungen soll der Phasenraum M sein, welchen wir mithilfe einer geeigneten Wirkung einer geometrischen Gruppe \mathcal{G} zu einem G -Raum erheben. Weiter werden wir explizit herausarbeiten, welche Klasse von Gruppenwirkungen für unser Verfahren überhaupt in Frage kommt.

Angenommen man wählt eine beliebige geometrische Gruppe \mathcal{G} , so sind wir zunächst an ihrer Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G}$ interessiert. Im Abschnitt (2.5) haben wir bereits demonstriert wie man die Lieklammer $[A, B]_{\mathcal{L}}$ für je zwei Elemente A und B aus der Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G} = T_e\mathcal{G}$ berechnet. Nun wollen wir eine Beziehung zwischen der geometrischen Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G}$ und glatten Vektorfeldern $\mathfrak{X}(M)$ auf dem Phasenraum herstellen. Mithilfe der Exponentialfunktion $\exp : \mathcal{L}\mathcal{G} \rightarrow \mathcal{G}$ und der Gruppenwirkung $\Phi : \mathcal{G} \times M \rightarrow M$ kann man die Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G}$ direkt auf den Phasenraum wirken lassen. Sei dazu $t \mapsto \exp(-tA)$ eine Kurve durch das neutrale Element $e \in \mathcal{G}$, $p \in M$ ein Punkt auf der Mannigfaltigkeit und $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ eine glatte Funktion auf dem Phasenraum, dann ist durch

$$\gamma_p^A f := \left. \frac{d}{dt} \right|_0 f \circ \Phi(\exp(-tA), p) \quad \text{mit} \quad \gamma^A : M \rightarrow TM, p \mapsto \gamma_p^A \quad (3.1)$$

das **fundamentale Vektorfeld** zu A definiert.³ Man rechnet leicht nach, dass γ ein Liealgebrahomomorphismus ist, d. h. es gilt die Identität $\gamma^{[A, B]} = [\gamma^A, \gamma^B]$ zu zeigen:

$$\begin{aligned} \gamma_p^{[A, B]} f &= \left. \frac{d}{dt} \right|_0 f \circ \Phi(\exp(-t[A, B]), p) \\ &= (T_p f)(T_e \Phi_p)(T_0 \exp) \left(-[A, B] \left. \frac{d}{dt} \right|_0 t \right) \\ &= (T_p f)(T_e \Phi_p)(T_0 \exp) ([B, A]) \quad . \end{aligned} \quad (3.2)$$

Auf der anderen Seite erhält man mithilfe der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel:

$$\begin{aligned} [\gamma^A, \gamma^B] f &= \gamma^A(\gamma^B f) - \gamma^B(\gamma^A f) \\ &= \left. \frac{d}{dt} \right|_0 (\gamma^B f) \circ \Phi(\exp(-tA), p) - A \leftrightarrow B \\ &= \left. \frac{d}{dt} \right|_0 \left. \frac{d}{ds} \right|_0 f \circ \Phi(\exp(-sB) \exp(-tA), p) - A \leftrightarrow B \\ &= \left. \frac{d}{dt} \right|_0 \left. \frac{d}{ds} \right|_0 f \circ \Phi(\exp(-sB - tA + \frac{st}{2}[B, A] + \dots), p) - A \leftrightarrow B \\ &= (T_p f)(T_e \Phi_p)(T_0 \exp) \left(\frac{1}{2}[B, A] \right) - A \leftrightarrow B \\ &= (T_p f)(T_e \Phi_p)(T_0 \exp) ([B, A]) \quad . \end{aligned} \quad (3.3)$$

Fundamentale Vektorfelder sind demnach eine Darstellung einer Liealgebra als lineare Operatoren auf dem Trägerraum der glatten Vektorfelder auf M . Möchte man nun, dass die Abbildung γ ein Isomorphismus wird, so muss man noch Injektivität und Surjektivität sicherstellen. Ist die Gruppenwirkung Φ *effektiv*, dann garantiert man die Injektivität von γ . Da die Liealgebra einer Liegruppe isomorph zum

²Offensichtlich haben z. B. alle Quantenmechaniken für beliebiges $\hbar \in \mathbb{R}$ den gleichen klassischen Limes.

³Das negative Signum im Exponenten sorgt lediglich dafür, dass man einen Homomorphismus anstatt eines Antihomomorphismus erhält.

Tangentialraum am neutralen Element ist, reicht es sogar aus, wenn die Standgruppe diskret ist, sprich es existiert in einer Umgebung U von e kein weiteres Element, welches einen beliebigen Punkt $p \in M$ invariant lässt. Diese Eigenschaft trägt den Namen *fast effektiv*. Schränkt man den Zielraum auf das Bild von γ ein, gewährleistet man die Surjektivität. Infolgedessen sind wir nun in der Lage einen *Liealgebraisomorphismus* zwischen der Liealgebra der geometrischen Gruppe $\mathcal{L}\mathcal{G}$ und einer Teilmenge der glatten Vektorfelder $\mathfrak{X}(M)$ auf M anzugeben.

Ferner müssen wir nun überprüfen, unter welchen Voraussetzungen die erhaltenen Vektorfelder hamiltonsch sind. Zunächst prüft man leicht nach, ob γ^A symplektisch ist, indem man die Lieableitung der kanonischen Zweiform ω entlang von γ^A berechnet:

$$0 \stackrel{!}{=} \mathcal{L}_{\gamma^A} \omega = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 \Phi_{\exp(-tA)}^* \omega \quad . \quad (3.4)$$

Die kanonische Zweiform ω wird hier genau dann annulliert, wenn der Fluss eine *symplektische* Transformation ist. Nun gilt es sicherzustellen, dass zu jedem γ^A eine Observable f existiert, d. h. $\gamma^A = df^\sharp$. Für diese nichttriviale Aufgabe benutzt man Aussagen aus dem mathematischen Gebiet der de-Rham-Kohomologie, welches Kriterien festlegen, wann geschlossene Differentialformen auch exakt sind.

Soll die Gruppenwirkung Φ die globale Struktur des Phasenraums M berücksichtigen, muss es stets möglich sein, von jedem Punkt aus einen anderen mithilfe eines Gruppenelementes zu erreichen – die Gruppenwirkung muss also zusätzlich *transitiv* sein. Diese Forderung ist wichtig, damit auch wirklich alle fundamentalen Funktionen mit der Gruppenwirkung verknüpft werden. Am einfachsten überzeugt man sich von dieser Aussage, wenn man sich vorstellt, dass die Gruppenwirkung nicht transitiv wäre. Infolgedessen würden man ausgehend von einem Startpunkt $m \in M$ im Phasenraum einen bestimmten Punkt $\tilde{m} \in M$ nicht mehr durch eine Kurve $\alpha_m(t) := \Phi_t(m)$ erreichen können und hätte demnach keine Vorschrift mehr, wie man aus dem zugehörigen Vektorfeld eine Observable f rekonstruiert, welche differenzierbar ihre Argumente vom Punkt $m \in M$ zu $\tilde{m} \in M$ durchlaufen kann.

Zusammenfassend stellen wir demnach folgende Forderungen an Φ :

- Die Injektivität von γ erfordert eine *fast effektive* Gruppenwirkung.
- Die Gruppenwirkung ist *hamiltonsch*, sprich jedes fundamentale Vektorfeld stammt aus einer Observable.
- Die *Transitivität* der Gruppenwirkung beachtet die globale Struktur der Mannigfaltigkeit.

Diese drei Kriterien schränken die Anzahl der in Frage kommenden Möglichkeiten für die geometrische Gruppe drastisch ein, legen sie aber *nicht* eindeutig fest, d. h. man findet zu einer Mannigfaltigkeit unter Umständen eine Vielzahl möglicher Gruppenwirkungen. Wir können später eine physikalisch motivierte Wahl für die geometrische Gruppe und ihre Gruppenwirkung treffen.

Bevor wir uns jedoch Gedanken über die Wahl der geometrischen Gruppe machen, wollen wir zunächst die fundamentalen Observablen ein wenig genauer beleuchten: Wir haben die Beziehung zwischen glatten Funktionen $\mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R})$ und ihren hamiltonschen Vektorfeldern bereits durch den Liealgebrahomomorphismus j charakterisiert, welcher per Konstruktion eine surjektive Abbildung ist, denn jedes hamiltonsche Vektorfeld X_f stammt per Definition aus einer Observable f . Der Kern von j ist durch die konstanten Funktionen auf dem Phasenraum gegeben, welche isomorph zu \mathbb{R} sind. Ferner kann man die Konstanten mithilfe der Injektion $\iota : \mathbb{R} \hookrightarrow \mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R})$ in die glatten Funktionen einbetten. Die Eigenschaft, dass beim Berechnen der hamiltonschen Vektorfelder die Konstanten auf 0 abgebildet werden, kann man mithilfe einer kurzen, exakten Sequenz⁴ von Liealgebren darstellen:

$$0 \longrightarrow \mathbb{R} \xrightarrow{\iota} \mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R}) \xrightarrow{j} \mathfrak{X}_{\text{ham}}(M) \longrightarrow 0$$

⁴Eine exakte Sequenz ist eine Aneinanderreihung von Abbildungen, bei der der Kern einer Abbildung stets mit dem Bild der vorangegangenen zusammenfällt.

Auf der Stufe von Vektorräumen macht nun das **Splitting-Lemma** [28] die Aussage, dass die Abbildung j (mindestens) eine injektive Rechtsinverse $s : \mathfrak{X}_{\text{ham}} \hookrightarrow \mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R})$ besitzt, so dass $j \circ s = \text{id}_{\mathfrak{X}_{\text{ham}}(M)}$ gilt. Leider ist das auf Stufe von Liealgebren nicht immer der Fall, so dass wir vorerst nur davon ausgehen können, dass s linear ist. Nachträglich muss man testen, ob s ein Liealgebrahomomorphismus ist. Insgesamt kann man infolgedessen die kurze exakte Sequenz und die geometrische Gruppe in einem Diagramm darstellen:

$$\begin{array}{ccccccc}
 0 & \longrightarrow & \mathbb{R} & \xhookrightarrow{i} & \mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R}) & \xrightarrow{j} & \mathfrak{X}_{\text{ham}}(M) & \longrightarrow & 0 \\
 & & & & \downarrow & \swarrow \scriptstyle s & \downarrow \gamma & & \\
 & & & & \mathcal{L}\mathcal{C} & & \mathcal{L}\mathcal{G} & & \\
 & & & & \uparrow \mathcal{L} & & \uparrow \mathcal{L} & & \\
 & & & & \mathcal{C} & & \mathcal{G} & &
 \end{array}$$

Wenn es uns gelingt, die Abbildung s so zu wählen, dass die Komposition $P := s \circ \gamma$ ein Liealgebrahomomorphismus ist, so verfügen wir über eine Abbildung, welche die Liealgebra der geometrischen Gruppe $\mathcal{L}\mathcal{G}$ mit den fundamentalen Observablen $\mathfrak{Obs}(M) := \text{im } P$ verknüpft. Die **Impulsabbildung** P ist als Komposition injektiver Abbildung selbst injektiv und aufgrund der Einschränkung auf ihr Bild surjektiv. In diesem Fall hätten wir eine Liealgebra gefunden, welche den Anforderungen an $\mathcal{L}\mathcal{C}$ genügt und wir könnten die Liealgebra der kanonischen Gruppe mit jener der geometrischen Gruppe identifizieren.

$$\begin{array}{ccc}
 \mathfrak{Obs}(M) & \xrightarrow{j} & \mathfrak{X}_{\text{Obs}}(M) \\
 \downarrow \cong & \swarrow \scriptstyle s & \downarrow \gamma \\
 \mathcal{L}\mathcal{C} & \xlongequal{P = s \circ \gamma} & \mathcal{L}\mathcal{G} \\
 \uparrow \mathcal{L} & & \uparrow \mathcal{L} \\
 \mathcal{C} & & \mathcal{G}
 \end{array}$$

Die Abbildung $P : \mathcal{L}\mathcal{G} \rightarrow \mathfrak{Obs}(M)$ ist genau dann ein Liealgebraisomorphismus, wenn die Differenz $z(A, B) := [P(A), P(B)] - P([A, B])$ verschwindet. Dabei hat man stets die Freiheit, die Impulsabbildung durch eine beliebige Konstante zu erweitern, welche eine lineare Funktion auf der Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G}$ sein muss, damit $P'(A) := P(A) + c(A)$ wieder eine lineare Abbildung ist. Gelingt eine Wahl der Impulsabbildung P , dass die **Obstruktion** $z(A, B)$ auf den Wert 0 fällt, so sind wir mit der angestrebten Konstruktion der kanonischen Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{C}$ zum Ende gekommen. Das ist genau dann der Fall, wenn sich die Obstruktion $z(A, B)$ als lineare Funktion der Lieklammer $[A, B]$ schreiben lässt, denn:⁵

$$\begin{aligned}
 0 &\stackrel{!}{=} [P'(A), P'(B)] - P'([A, B]) \\
 &= [P(A), P(B)] - P([A, B]) - c([A, B]) \\
 &= z(A, B) - c([A, B]) \quad .
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Falls die Impulsabbildung P dennoch nicht zu einem Liealgebraisomorphismus gemacht werden kann, müssen wir auf eine andere Weise die Beziehung zwischen kanonischer Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{C}$ und geometrischer Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G}$ herstellen. Das Problem lässt sich durch eine zentrale Erweiterung von $\mathcal{L}\mathcal{G}$ mit \mathbb{R} lösen, d. h. man definiert $\mathcal{L}\mathcal{C} := \mathcal{L}\mathcal{G} \oplus \mathbb{R}$ mit der Lieklammer:

$$[(A, r_a), (B, r_b)] := ([A, B], z(A, B)) \quad \text{mit } r_a, r_b \in \mathbb{R} \quad . \tag{3.6}$$

⁵Mathematisch kann man die Obstruktion $z(A, B)$ als Kozykel in einer Chevalley-Eilenberg-Kohomologie [28] beschreiben und rechnet nach, ob sie ein Korand ist, also der Kozykel in der Äquivalenzklasse der 0 liegt.

Dazu erweitert man das kommutative Diagramm auf Stufe der Liealgebren um eine weitere exakte Sequenz:

$$\begin{array}{ccccccc}
 0 & \longrightarrow & \mathbb{R} & \xrightarrow{i} & \mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R}) & \xrightarrow{j} & \mathfrak{X}_{\text{ham}}(M) & \longrightarrow & 0 \\
 & & \uparrow \text{id}_{\mathbb{R}} & & \uparrow P_z = s \circ \gamma \circ \beta & & \uparrow \gamma & & \\
 0 & \longrightarrow & \mathbb{R} & \xrightarrow{\alpha} & \mathcal{L}\mathcal{C} & \xrightarrow{\beta} & \mathcal{L}\mathcal{G} & \longrightarrow & 0 \\
 & & & & \uparrow \mathcal{L} & & \uparrow \mathcal{L} & & \\
 & & & & \mathcal{C} & & \mathcal{G} & &
 \end{array}$$

Die Abbildung α bettet die reellen Zahlen injektiv in die Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G} \oplus \mathbb{R}$ ein:

$$\alpha : \mathbb{R} \hookrightarrow \mathcal{L}\mathcal{G} \oplus \mathbb{R}, r \mapsto \alpha(r) := (0, r) \tag{3.7}$$

und β fungiert als surjektive Projektion auf den ersten Eintrag:

$$\beta : \mathcal{L}\mathcal{G} \oplus \mathbb{R} \twoheadrightarrow \mathcal{L}\mathcal{G}, (A, r) \mapsto \beta((A, r)) := A \tag{3.8}$$

Man kann nun eine neue Impulsabbildung mithilfe der alten definieren:

$$P_z : \mathcal{L}\mathcal{G} \oplus \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{C}^\infty(M, \mathbb{R}), (A, r_a) \mapsto P_z((A, r_a)) := P(A) + r_a \tag{3.9}$$

welche ein Liealgebrahomomorphismus ist, was man leicht nachrechnet:

$$\begin{aligned}
 [P_z((A, r_a)), P_z((B, r_b))] &= [P(A) + r_a, P(B) + r_b] \\
 &= [P(A), P(B)] \\
 &= P([A, B]) + z(A, B) \\
 &= P_z([A, B], z(A, B)) \tag{3.10}
 \end{aligned}$$

Infolgedessen gilt die Identität $[P_z((A, r_a)), P_z((B, r_b))] = P_z([A, B], z(A, B))$ für alle $A, B \in \mathcal{L}\mathcal{G}$ bzw. alle $r_a, r_b \in \mathbb{R}$. Die fundamentalen Observablen werden auch hier als Bild der Impulsabbildung $\mathfrak{Obs}(M) := \text{im } P_z$ definiert. Damit besitzen wir eine Vorschrift, die der geometrischen Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G}$ eine Liealgebra zuordnet, welche isomorph zu den fundamentalen Observablen $\mathfrak{Obs}(M)$ ist, darum ist die kanonische Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{C}$ durch die zentrale Erweiterung $\mathcal{L}\mathcal{G} \oplus \mathbb{R}$ der geometrischen Gruppe gegeben.

Jetzt sucht man nach den unitären, irreduziblen Darstellungen der kanonischen Gruppe \mathcal{C} und konstruiert die Quantisierungsabbildung $\hat{\cdot}$:

$$\begin{array}{ccccc}
 & & \mathfrak{Obs}(M) & \xrightarrow{j} & \mathfrak{X}_{\text{Obs}}(M) \\
 & & \uparrow P \text{ bzw. } P_z & & \uparrow \gamma \\
 \mathfrak{Op}_{\text{sa}}(\mathcal{H}) & \longleftarrow & \mathcal{L}\mathcal{C} & \xrightarrow{\text{id bzw. } \beta} & \mathcal{L}\mathcal{G} \\
 \uparrow & & \uparrow \mathcal{L} & & \uparrow \mathcal{L} \\
 \mathfrak{Op}_{\text{un}}(\mathcal{H}) & \xleftarrow{\text{Darstellung}} & \mathcal{C} & & \mathcal{G}
 \end{array}$$

Damit sind wir aber am Ende der Konstruktionsvorschrift angelangt und können uns nun einem expliziten Beispiel widmen.

3.3 Die gewöhnliche Quantenmechanik

Nun ist die Zeit gekommen, das Quantisierungsprogramm mit der kanonischen Gruppe einem ersten Test zu unterziehen. Wir wollen die konventionelle Quantenmechanik in einer Raumdimension, sprich für den Konfigurationsraum $\mathcal{Q} = \mathbb{R}$, konstruieren und mit der bekannten Theorie der nichtrelativistischen Quantenmechanik vergleichen.

Als Phasenraum benutzen wir das Kotangentenbündel $M = T^*\mathcal{Q}$ des Konfigurationsraums, welches als triviales Bündel isomorph zum gewöhnlichen \mathbb{R}^2 ist. Darum bietet es sich an, für den ganzen Phasenraum eine globale Karte $x : M \rightarrow \mathbb{R}^2$, $m \mapsto x(m) := (q, p)$ zu wählen. In diesen Koordinaten erhalten wir die symplektische Zweiform ω direkt aus der Liouvilleform $\tau = p dq$:

$$\omega = -d\tau = -d(p dq) = dq \wedge dp \quad . \quad (3.11)$$

An dieser Stelle müssen wir uns nun Gedanken über die geometrische Gruppe \mathcal{G} und eine geeignete Gruppenwirkung $\Phi : \mathcal{G} \times M \rightarrow M$ machen: Der Phasenraum $M = T^*\mathbb{R}$ ist offensichtlich isomorph zum Vektorraum \mathbb{R}^2 . Eine kanonische Wahl für eine geometrische Gruppe, welche die Struktur des Phasenraums akzeptiert, kann infolgedessen sofort durch die abelsche Gruppe der Translationen auf dem \mathbb{R}^2 getroffen werden.⁶ Es fällt darum auch nicht schwer, eine *transitive* Gruppenwirkung auf dem Phasenraum anzugeben:

$$\Phi : (\mathbb{R}^2, +) \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2, ((\lambda, \rho), (q, p)) \mapsto \Phi_{(\lambda, \rho)}((q, p)) := (q + \lambda, p - \rho) \quad . \quad (3.12)$$

Das Vorzeichen in der Impulskomponente ist rein mathematischer Natur und hebt sich später mit einem Vorzeichen bei der Berechnung der hamiltonschen Vektorfelder weg. Auf die physikalischen Eigenschaften hat es keine Auswirkung. Die Gruppenwirkung ist symplektisch, denn sie lässt die kanonische Zweiform ω invariant. Seien $V_{(q, p)}, W_{(q, p)} \in T_{(q, p)}M$ zwei Tangentialderivationen, dann gilt für alle $(q, p) \in M$:

$$(\Phi_{(\lambda, \rho)}^* \omega_{(q+\lambda, p-\rho)}) \langle V_{(q, p)}, W_{(q, p)} \rangle = \omega_{(q+\lambda, p-\rho)} \langle \Phi_{(\lambda, \rho)*} V_{(q, p)}, \Phi_{(\lambda, \rho)*} W_{(q, p)} \rangle \quad .$$

Die Tangentialabbildung des Flusses ist in Koordinaten lediglich die Einheitsmatrix auf dem \mathbb{R}^2 und daher folgt sofort:

$$(\Phi_{(\lambda, \rho)}^* \omega_{(q+\lambda, p-\rho)}) \langle V_{(q, p)}, W_{(q, p)} \rangle = \omega_{(q+\lambda, p-\rho)} \langle V_{(q+\lambda, p-\rho)}, W_{(q+\lambda, p-\rho)} \rangle \quad .$$

Das bedeutet aber, dass die Einträge der Tangentialvektoren nach dem Pushforward durch den Fluss die selben bleiben. Weiter hängen die Koeffizienten der kanonischen Zweiform nicht vom Fußpunkt ab und daher gilt:

$$(\Phi_{(\lambda, \rho)}^* \omega_{(q+\lambda, p-\rho)}) \langle V_{(q, p)}, W_{(q, p)} \rangle = \omega_{(q, p)} \langle V_{(q, p)}, W_{(q, p)} \rangle \quad . \quad (3.13)$$

Die erste de-Rham-Kohomologiegruppe $H_{\text{dR}}^1(M)$ ist trivial und daher folgt, dass jedes lokal hamiltonsche Vektorfeld X global hamiltonsch ist und darum stets aus einer Observablen gewonnen werden kann, sprich $X = df^\sharp$. Damit ist auch unsere Gruppenwirkung *hamiltonsch*. Die Gruppenwirkung ist zudem regulär und damit *effektiv*, weil schon für ein Element $(q, p) \in M$ aus $\Phi_{(\lambda, \rho)}((q, p)) = (q, p)$ folgt, dass $(\lambda, \rho) = (0, 0) = e$. Damit haben wir alle Voraussetzungen an die Gruppenwirkung erfüllt und können uns der geometrischen Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G}$ und dem Isomorphismus γ widmen.

Zunächst erinnern wir uns an den mathematischen Abschnitt 2.5 über Liegruppen, wo wir festgestellt haben, dass alle Vertauschungsrelationen der Liealgebra einer abelschen Gruppe verschwinden, d. h. für alle $A, B \in \mathcal{L}\mathcal{G}$ gilt $[A, B] = 0$. Weiter bestimmen wir die Exponentialfunktion $\exp : \mathcal{L}\mathcal{G} \rightarrow \mathcal{G}$, indem wir

⁶Beginnt man mit dem affinen Raum \mathbb{A}_1 als Konfigurationsraum, so erhält man sofort eine natürliche Wirkung durch Translationen im Ortsraum und ergänzt diese für $T^*\mathbb{A}_1$ durch Translationen im Impulsraum.

die Integralkurve des zu $A \in \mathcal{L}\mathcal{G}$ zugehörigen linksinvarianten Vektorfeldes durch das neutrale Element bestimmen. Sei dazu α eine Kurve auf \mathcal{G} mit $\alpha(0) = e$ und $\dot{\alpha}(0) = A$, dann gilt:

$$L_g^A := (T_e L_g)(A) = (T_e L_g)([\alpha]) = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 L_g(\alpha(t)) = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 (g + \alpha(t)) = \dot{\alpha}(0) = A \quad . \quad (3.14)$$

Die Exponentialfunktion ist durch die Integralkurve α^A des linksinvarianten Vektorfeldes L^A durch das neutrale Element e definiert, welche der gewöhnlichen Differentialgleichung

$$\dot{\alpha}^A(t) = L_{\alpha^A(t)}^A \equiv A \quad (3.15)$$

zu der Anfangsbedingung $\alpha^A(0) = e$ genügt, und ist infolgedessen durch $\exp(tA) := \alpha^A(t) = t \cdot A$ gegeben. Mit diesem Wissen kann man nun zu der Berechnung der fundamentalen Vektorfelder übergehen:

Die Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G}$ der Gruppe von Translationen auf dem \mathbb{R}^2 ist isomorph zu \mathbb{R}^2 und kann infolgedessen durch zwei reelle Zahlen $A = (a^1, a^2)$ beschrieben werden. Für eine glatte Funktion $g : M \rightarrow \mathbb{R}$ auf dem Phasenraum folgt somit:

$$\gamma_{(q,p)}^A g = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 g \circ \Phi_{\exp(-tA)}((q, p)) = \left. \frac{d}{dt} \right|_0 g(q - t \cdot a^1, p + t \cdot a^2) = (-a^1 \partial_q + a^2 \partial_p) g \quad . \quad (3.16)$$

An dieser Stelle werden wir die fundamentalen Observablen bestimmen, indem wir für eine allgemeine, glatte Funktion $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ den symplektischen Gradienten $-df^\sharp$ ausrechnen und mit dem fundamentalen Vektorfeld γ^A gleichsetzen:

$$j(f) = -df^\sharp = -(\partial_q f dq + \partial_p f dp)^\sharp = -(\partial_p f) \partial_q + (\partial_q f) \partial_p \stackrel{!}{=} -a^1 \partial_q + a^2 \partial_p = \gamma^{(a^1, a^2)} \quad . \quad (3.17)$$

Nun wird auch klar, warum in der Gruppenwirkung das Vorzeichen in der Impulskomponente negativ gewählt worden ist, denn man liest durch einen Koeffizientenvergleich die Gleichungen $a^1 = \partial_p f$ respektive $a^2 = \partial_q f$ ab, welche bis auf Konstanten durch die Funktion $f = a^1 p + a^2 q$ gelöst werden. Es bietet sich nun an, versuchsweise die Impulsabbildung $P : \mathcal{L}\mathcal{G} \rightarrow \mathfrak{Dbs}(M)$ durch $P((a^1, a^2)) := a^1 p + a^2 q$ zu definieren, und diese darauf zu prüfen, ob sie ein Liealgebrahomomorphismus ist:⁷

$$\begin{aligned} z(A, B) &= [P(A), P(B)] - P([A, B]) \\ &= \omega \langle X_{P(A)}, X_{P(B)} \rangle - P(0) \\ &= \omega \langle (-\gamma^A), (-\gamma^B) \rangle - 0 \\ &= (dq \wedge dp) \langle -a^1 \partial_q + a^2 \partial_p, -b^1 \partial_q + b^2 \partial_p \rangle \\ &= -a^1 b^2 + b^1 a^2 \quad . \end{aligned} \quad (3.18)$$

Für diese Wahl von P ist der Kozykel $z(A, B)$ verschieden von 0. Es bleibt noch zu testen, ob eine geschickte Wahl der Konstanten ihn verschwinden lässt. Sei dazu $P'(A) := P(A) + c(A)$ eine neue Impulsabbildung, die um eine bezüglich q und p konstante Abbildung $c(A)$ erweitert worden ist, welche notwendigerweise eine lineare Funktion von A sein muss, dann ist:

$$\begin{aligned} [P'(A), P'(B)] - P'([A, B]) &= [P(A), P(B)] - P'([A, B]) \\ &= z(A, B) - c([A, B]) \\ &= z(A, B) \quad . \end{aligned} \quad (3.19)$$

Das bedeutet, dass in diesem Fall der Kozykel $z(A, B)$ für keine Wahl der Konstante verschwindet. Infolgedessen kann die geometrische Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G}$ die Rolle der kanonischen Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{C}$ nicht übernehmen und darum müssen wir $\mathcal{L}\mathcal{G}$ zentral erweitern:

$$\mathcal{L}\mathcal{C} := \mathcal{L}\mathcal{G} \oplus \mathbb{R} \quad \text{mit} \quad [(A, r_a), (B, r_b)] := ([A, B], z(A, B)) \quad . \quad (3.20)$$

⁷Man bemerke, dass die Impulsabbildung P linear ist und darum $P(0) = 0$ folgt.

Da $\mathcal{L}\mathcal{G}$ abelsch ist, sehen die neuen Vertauschungsrelationen besonders einfach aus:

$$[(a^1, a^2, r_a), (b^1, b^2, r_b)] = (0, 0, b^1 a^2 - b^2 a^1) \quad . \quad (3.21)$$

Die Impulsabbildung auf der zentralen Erweiterung $P_z = P + r$ ist nun ein Liealgebraisomorphismus zwischen der kanonischen Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{C}$ und den fundamentalen Observablen:

$$P_z : \mathcal{L}\mathcal{G} \oplus \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{Obs}(M), (a^1, a^2, r_a) \mapsto a^1 p + a^2 q + r_a \quad . \quad (3.22)$$

Mit der Kenntnis der kanonischen Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{C}$ sind wir fast am Ende unserer Konstruktion angelangt – wir müssen nur noch die zugehörige Liegruppe \mathcal{C} und ihre unitären, irreduziblen Darstellungen suchen. Bevor wir jedoch diesen Weg gehen, werden wir mit den gewonnenen Vertauschungsrelationen der kanonischen Gruppe einen Spezialfall untersuchen, um der formalen Definition ein wenig Leben einzuhauchen. Betrachte dazu zwei Liealgebraelemente $A = (0, 1, 0)$ bzw. $B = (1, 0, 0)$, dann ist:

$$[(0, 1, 0), (1, 0, 0)] = (0, 0, 1) \xleftrightarrow{P_z} [q, p] = 1 \quad . \quad (3.23)$$

Es sollte uns nicht sonderlich überraschen, dass wir mit der kanonischen Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{C}$ die kanonischen Vertauschungsrelationen reproduzieren, immerhin haben wir die Quantisierung in Hinblick auf die konventionelle Quantenmechanik durchgeführt. Mehr noch legt die Impulsabbildung P_z fest, dass das Tripel (a^1, a^2, r_a) lediglich die Koeffizienten vor den Funktionen p, q und 1 beschreibt, d. h. wir können diese als eine Basis der fundamentalen Observablen benutzen. Auch ohne die Darstellungstheorie der zugehörigen Liegruppe sollte die weitere Vorgehensweise intuitiv klar sein: Wir werden am Ende die drei Operatoren \hat{q}, \hat{p} und $\hat{\mathbb{1}}$ erhalten.

Die kanonische Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{C}$ ist in der Literatur [23] unter dem Namen **Weyl-Heisenberg-Algebra** bekannt. Die zugehörige Liegruppe heißt **Heisenberg-Gruppe** und besitzt unitäre, irreduzible Darstellungen $D : \mathcal{C} \rightarrow \text{Aut}(L^2(\mathbb{R}, dq))$, $g \mapsto D(g)$ auf dem Hilbertraum der quadratintegrierbaren Funktionen $L^2(\mathbb{R}, dq)$, welche durch die drei selbstadjungierten Operatoren \hat{q}, \hat{p} und $\hat{\mathbb{1}}$ generiert werden:⁸

$$\begin{aligned} U(a^1) &:= D(\exp(a^1, 0, 0)) = e^{-ia^1 \hat{p}} \quad \text{mit} \quad (U(a^1)\psi)(q) = \psi(q - \mu a^1) \quad , \\ V(a^2) &:= D(\exp(0, a^2, 0)) = e^{-ia^2 \hat{q}} \quad \text{mit} \quad (V(a^2)\psi)(q) = e^{-ia^2 q} \psi(q) \quad , \\ W(r_a) &:= D(\exp(0, 0, r_a)) = e^{-i\mu r_a \hat{\mathbb{1}}} \quad . \end{aligned} \quad (3.24)$$

Mithilfe dieser Darstellung kann man die folgenden Relationen ableiten, welche als **Weyl-Form** oder **multiplikative Form** der kanonischen Vertauschungsrelationen bekannt sind:

$$U(a^1)U(b^1) = U(a^1 + b^1), \quad V(a^2)V(b^2) = V(a^2 + b^2), \quad U(a^1)V(a^2) = V(a^2)U(a^1)e^{i\mu a^1 a^2} \quad . \quad (3.25)$$

Dabei klassifiziert der Parameter $\mu \in \mathbb{R}$ die irreduzible Darstellung, so dass zwei Darstellungen zu unterschiedlichem μ nicht unitär äquivalent sind. Die selbstadjungierten Generatoren \hat{q}, \hat{p} und $\hat{\mathbb{1}}$ haben dann die bekannte Wirkung auf Wellenfunktionen in Ortsdarstellung:

$$(\hat{q}\psi)(q) = q\psi(q) \quad , \quad (\hat{p}\psi)(q) = -i\mu \partial_q \psi(q) \quad , \quad (\hat{\mathbb{1}}\psi)(q) = \psi(q) \quad . \quad (3.26)$$

Abschließend erhält man die Vertauschungsrelationen der selbstadjungierten Operatoren:

$$[\hat{q}, \hat{q}] = [\hat{p}, \hat{p}] = [\hat{q}, \hat{\mathbb{1}}] = [\hat{p}, \hat{\mathbb{1}}] = 0 \quad \text{respektive} \quad [\hat{q}, \hat{p}] = i\mu \hat{\mathbb{1}} \quad . \quad (3.27)$$

Nun kann man noch Einheiten einführen und damit dem Parameter μ physikalische Bedeutung zu messen. Seien dazu $\hat{q}_\phi := q_0 \hat{q}$ respektive $\hat{p}_\phi := p_0 \hat{p}$ die physikalischen Operatoren mit den Einheiten

⁸Das Stone- von Neumann Theorem [23] sichert zu, dass alle unitären, irreduziblen Darstellungen der Heisenberg-Gruppe für festes $\mu \in \mathbb{R}$ unitär äquivalent sind und wir darum die Freiheit haben, immer die Ortsraumdarstellung zu wählen.

$[q_0]$ = Länge bzw. $[p_0]$ = Masse · Länge · Zeit⁻¹, dann liest man dem Produkt $q_0 p_0$ mithilfe der Vertauschungsrelationen die Einheit einer Wirkung ab:

$$[\hat{q}, \hat{p}] = [\hat{q}_\phi, \hat{p}_\phi] \frac{1}{q_0 p_0} = i\mu \hat{\mathbb{1}} \quad . \quad (3.28)$$

Es bietet sich darum an, dem Ausdruck $q_0 p_0 \mu$ den Wert \hbar zuzuweisen. Der numerische Wert von \hbar legt demnach die eine physikalisch realisierte, irreduzible Darstellung der Heisenberg-Gruppe unter den unendlich vielen, nicht unitär äquivalenten Darstellungen fest. Anschaulich mag man sich das so vorstellen, dass der Bohr'sche Atomradius proportional zu \hbar ist und damit die Größe eines Atoms und somit der Geltungsbereich der Quantenmechanik festgelegt wird. Eine alternative Welt mit abweichenden \hbar hätte andere Atomradien und wäre demnach *nicht* kompatibel mit unserer Welt, obwohl beide Theorien den *gleichen* klassischen Limes besäßen.

Die Quantisierungsabbildung von den fundamentalen Observablen in die selbstadjungierten Operatoren kann man nun ohne weiteres hinschreiben:

$$\hat{\cdot} : \mathcal{O}b\mathfrak{s}(M) \rightarrow \mathcal{O}p_{\text{sa}}(\mathcal{H}), \quad a^1 p + a^2 q + r_a \mapsto -i(a^1 \hat{p} + a^2 \hat{q} + r_a \hat{\mathbb{1}}) \quad . \quad (3.29)$$

Damit ist die Konstruktion der konventionellen Quantenmechanik mithilfe der kanonischen Gruppe vollständig und wir können einige Details abschließend diskutieren:

Wie wir sahen, haben wir nicht nur eine Wahl in der Gruppenwirkung, sondern können sogar den Parameter μ in der Darstellung wählen. Die Physik wird demnach nicht ausschließlich durch den Phasenraum bestimmt. Die geometrische Gruppe, ihre Gruppenwirkung *und* ihre Darstellung legen zudem die physikalische Realität fest. Die Bedeutung der Darstellung wird oft unterschätzt, obwohl das prominente Beispiel der Poincaré-Gruppe uns lehrt, dass Elementarteilchen zu unterschiedlicher Masse und Spin sich fundamental anders verhalten können. Darum liegt die Vermutung nahe, dass physikalische Räume G -Räume sind, sprich ein Tripel (M, G, Φ) .

Weiter ist bekannt, dass die konventionelle Quantenmechanik nur auf flachen Räumen konsistent formulierbar ist. Das erläuterte Beispiel für $M = \mathbb{R}^2$ reproduziert die üblichen Operatoren und Vertauschungsrelationen mit einer Gruppenwirkung, die auf einen flachen Raum zugeschnitten ist. Die Umkehrung, dass gekrümmte Räume andere Operatoren und Vertauschungsrelationen haben müssen, ist zwar nicht zwingend anzunehmen, aber man vermag ein Gespür für die Besonderheit der konventionellen Quantenmechanik zu entwickeln. Im nächsten Kapitel werden wir eine Abwandlung des harmonischen Oszillators auf der Mannigfaltigkeit $S^1 \times \mathbb{R}^+$ quantisieren und diese Vermutung untermauern. Die resultierende Quantenmechanik ist eine grundlegend andere.

4 Quantisierung des harmonischen Oszillators

DER harmonische Oszillator ist wohl eines der ästhetischsten und fundamentalsten Modelle der theoretischen Physik, was wohl in seiner Einfachheit und seinem didaktischen Nutzen begründet ist. Viele Konzepte in der Behandlung naturwissenschaftlicher Phänomene fußen auf dieser idealisierten Beschreibung eines Partikels, welches in einem konvexen Potential gefangen ist. Dazu gehören z. B. die Darstellung elektromagnetischer Wellen, die stark mit dem mathematischen Gebiet der Fourieranalyse verknüpft ist oder die Quantisierung von Feldoperatoren – ganz zu schweigen von dem außergewöhnlichen Nutzen bei der Berechnung klassischer Systeme.

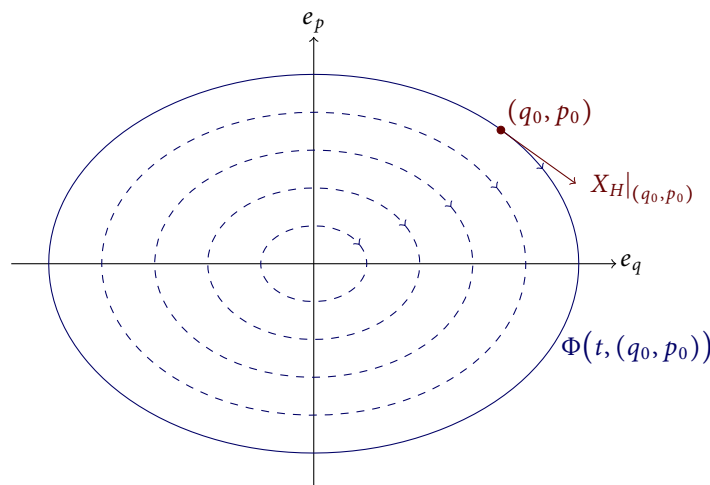
Die Hamilton'sche Funktion des eindimensionalen, freien, harmonischen Oszillators der Masse m und der Frequenz ω ist in einer Karte des Kotangententialbündels $T^*\mathbb{R} \cong \mathbb{R}^2$ gegeben durch:

$$H: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_0^+, (q, p) \mapsto H(q, p) := \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 \quad . \quad (4.1)$$

Die kanonischen Gleichungen sind durch das hamiltonsche Vektorfeld $X_H := dH^\sharp = \frac{p}{m} \partial_q - m\omega^2 q \partial_p$ festgelegt und ziehen die bekannten trigonometrischen Funktionen \cos und \sin als Integralkurven nach sich:

$$\begin{aligned} q(t) &:= \Phi^q(t, (q_0, p_0)) = q_0 \cos(\omega t) + \frac{p_0}{m\omega} \sin(\omega t) \quad , \\ p(t) &:= \Phi^p(t, (q_0, p_0)) = -q_0 m\omega \sin(\omega t) + p_0 \cos(\omega t) \quad . \end{aligned} \quad (4.2)$$

Der Fluss im Phasenraum $\Phi = (\Phi^q, \Phi^p)$ wird durch Ellipsen mit den Halbachsen $a = \sqrt{q_0^2 + \frac{p_0^2}{m^2\omega^2}}$ bzw. $b = \sqrt{q_0^2 m^2 \omega^2 + p_0^2}$ beschrieben, welche im Uhrzeigersinn orientiert sind.



Der Drehsinn ist nicht willkürlich gewählt sondern wird durch die Forderung festgelegt, dass die Änderung der Ortskoordinate streng monoton vom Impuls abhängt, so dass $\dot{q} = \frac{p}{m}$. Diese Einschränkung, welche für jedes klassische System mit geschlossenen Bahnen im Phasenraum gilt, wird später noch eine wichtige Rolle bei der alternativen Quantisierung des harmonischen Oszillators spielen.

4.1 Die konventionelle Quantisierung

In diesem Abschnitt wollen wir die Quantisierung im üblichen Rahmen in Anlehnung an das Lehrbuch von Florian Scheck [13] über nichtrelativistische Quantenmechanik nachvollziehen, um die Details des Systems herauszuarbeiten. Die zugrundeliegende symplektische Mannigfaltigkeit, welche uns als Phasenraum dienen soll, ist das triviale Kotangentenbündel des reellen Zahlenstrahls $T^*\mathbb{R} \cong \mathbb{R}^2$. Das gewöhnliche Quantisierungsverfahren mithilfe der drei Operatoren \hat{q} , \hat{p} und $\hat{1}$ fällt darum mit der Konstruktion von Christopher Isham aus dem vorangegangenen Kapitel zusammen.

Der Startpunkt soll die Hamilton'sche Funktion (4.1) sein, welche mithilfe der Abbildung

$$\begin{aligned} \hat{\cdot} : \mathfrak{O}b\mathfrak{s}(\mathbb{R}^2) &\rightarrow \mathfrak{O}p(L^2(\mathbb{R}, dq)) \\ q &\mapsto \hat{q} := q \\ p &\mapsto \hat{p} := -i\hbar\partial_q \end{aligned} \quad (4.3)$$

quantisiert wird. Der Hamiltonoperator \hat{H} hat entsprechend in der Ortsdarstellung die bekannte Form und impliziert die stationäre Schrödingergleichung:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 \quad \text{und daher} \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 \right) \psi(q) = E\psi(q) \quad . \quad (4.4)$$

Führt man die einheitenlosen Größen $Q := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q$ und $P := \frac{p}{\sqrt{\hbar m\omega}}$ ein, so vereinfacht sich die Eigenwertgleichung auf:

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial Q^2} + Q^2 \right) \tilde{\psi}(Q) = E \tilde{\psi}(Q) \quad . \quad (4.5)$$

In Hinblick auf den weiteren Fortgang werden wir uns nun nicht bemühen, die Eigenfunktionen zu bestimmen, sondern verfolgen eine Lösungsmethode mithilfe von Operatoren. Heuristisch versucht man die dritte binomische Formel $(x+y)(x-y) = x^2 - y^2$ zu reproduzieren und definiert:

$$\hat{a}^\pm := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{q} \mp \frac{i}{\sqrt{\hbar m\omega}} \hat{p} \right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} \mp i\hat{P}) \quad . \quad (4.6)$$

Dieser algebraische Kunstgriff erlaubt uns den Hamiltonoperator mit den Operatoren \hat{a}^+ respektive \hat{a}^- auszudrücken. Dazu berechne man folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a}^- + \frac{1}{2} \right) &= \hbar\omega \left(\frac{1}{2} (\hat{Q} - i\hat{P})(\hat{Q} + i\hat{P}) + \frac{1}{2} \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{Q}^2 + \hat{P}^2 + i\hat{Q}\hat{P} - i\hat{P}\hat{Q} + 1) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \hat{q}^2 + \frac{1}{\hbar m\omega} \hat{p}^2 + i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar^2 m\omega}} [\hat{q}, \hat{p}] + 1 \right) \\ &= \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \hat{q}^2 \quad . \end{aligned} \quad (4.7)$$

Die Operatoren \hat{a}^+ und \hat{a}^- sind formal offensichtlich hermitesch vermöge der Eigenschaft $(\hat{a}^-)^* = \hat{a}^+$ und erfüllen die bekannten Vertauschungsrelationen

$$[\hat{a}^\pm, \hat{a}^\pm] = 0 \quad \text{respektive} \quad [\hat{a}^\mp, \hat{a}^\pm] = \frac{1}{2} (\mp i [\hat{Q}, \hat{P}] \mp i [\hat{Q}, \hat{P}]) = \pm 1 \quad . \quad (4.8)$$

Angenommen wir hätten die Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator \hat{H} bereits bestimmt, sprich es gälte die Eigenwertgleichung $\hat{H}\tilde{\psi}(Q) = E\tilde{\psi}(Q)$, dann ist $\hat{a}^\pm \tilde{\psi}(Q)$ ebenso ein Eigenzustand, denn

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{a}^+ \tilde{\psi}(Q)) &= \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a}^- + \frac{1}{2} \right) \hat{a}^+ \tilde{\psi}(Q) \\ &= \hat{a}^+ \hbar\omega \left(\hat{a}^- \hat{a}^+ + \frac{1}{2} \right) \tilde{\psi}(Q) \\ &= \hat{a}^+ \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a}^- + [\hat{a}^-, \hat{a}^+] + \frac{1}{2} \right) \tilde{\psi}(Q) \\ &= (E + \hbar\omega) (\hat{a}^+ \tilde{\psi}(Q)) \end{aligned} \quad (4.9)$$

Analog erhält man die Relation $\hat{H}(\hat{a}^- \tilde{\psi}(Q)) = (E - \hbar\omega)(\hat{a}^- \tilde{\psi}(Q))$ und schlussfolgert, dass die Operatoren \hat{a}^+ und \hat{a}^- den Energieeigenwert um den Betrag $\hbar\omega$ steigern bzw. senken. Dieser Eigenschaft sind die Namen *Auf- und Absteigeoperatoren* respektive *Leiteroperatoren* geschuldet. Die Eigenfunktionen könnten demnach mit der ganzen Zahl $n \in \mathbb{Z}$ charakterisiert werden, jedoch stellt sich heraus, dass es eine kleinste Zahl n_0 gibt, so dass der zugehörige Eigenvektor durch Anwenden des Absteigeoperators vernichtet wird, sprich $\hat{a}^- \tilde{\psi}_{n_0}(Q) = 0$. Dazu betrachte man das Betragsquadrat eines Zustandes $\hat{a}^- \psi(Q)$ und benutze die Beziehung (4.7) zwischen dem Hamiltonoperator und den Leiteroperatoren:

$$\begin{aligned} 0 \leq \|\hat{a}^- \psi(Q)\|^2 &= \int_{\mathbb{R}} dQ \tilde{\psi}(Q)^* \hat{a}^+ \hat{a}^- \tilde{\psi}(Q) \\ &= \int_{\mathbb{R}} dQ \tilde{\psi}(Q)^* \left(\frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) \tilde{\psi}(Q) \\ &= \left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dQ \tilde{\psi}(Q)^* \tilde{\psi}(Q)}_{\geq 0} . \end{aligned} \quad (4.10)$$

Daraus folgt aber sofort, dass $\left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) \geq 0$ und damit ist der kleinstmögliche Energieeigenwert durch die untere Schranke $\frac{\hbar\omega}{2}$ begrenzt. Das Spektrum des Hamiltonoperator ist demnach durch natürliche Zahlen charakterisiert:

$$\sigma(\hat{H}) \ni E_n \geq \frac{\hbar\omega}{2} \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}_0 . \quad (4.11)$$

In der Regel definiert man nun den hermiteschen Operator $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}^-$ mit dem Eigenwert n , welcher mit dem Hamiltonoperator \hat{H} kommutiert. Seine Vertauschungsrelationen mit den Leiteroperatoren legen die Eigenschaft, des Auf- bzw. Absteigens noch klarer offen:

$$[\hat{N}, \hat{a}^\pm] = [\hat{a}^+ \hat{a}^-, \hat{a}^\pm] = \hat{a}^+ [\hat{a}^-, \hat{a}^\pm] + [\hat{a}^+, \hat{a}^\pm] \hat{a}^- = \pm \hat{a}^\pm . \quad (4.12)$$

Der Hamiltonoperator hat damit die einfache und eingängige Form $\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right)$ und erfüllt die Eigenwertgleichung:

$$\hat{H} \tilde{\psi}_n(Q) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \tilde{\psi}_n(Q) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \tilde{\psi}_n(Q) \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}_0 . \quad (4.13)$$

An dieser Stelle wollen wir nicht weiter in das Detail gehen, da wir in erster Linie am Spektrum des harmonischen Oszillators interessiert sind. Bemerkenswert ist der Fakt, dass die Energie des Grundzustands $\tilde{\psi}_0(Q)$ nicht verschwindet sondern den endlichen Wert $\frac{\hbar\omega}{2}$ annimmt, welcher historisch als Energie des Vakuums interpretiert wurde.

Später wird man in Quantenfeldtheorien auf das Problem stoßen, dass dieser nichtverschwindende Term eine Divergenz erzeugt, sobald man über alle Frequenzen integriert, denn das Integral $\int_0^\infty d\omega \frac{\hbar\omega}{2}$ hat keinen endlichen Wert. Philosophisch tut sich damit die Frage auf, ob Max Planck mit dem Vorgehen, den Hohlraumstrahler durch eine Schar harmonischer Oszillatoren mit diskreten Eigenwerten von der ultravioletten Katastrophe zu befreien, nicht etwa eine noch subtilere ultraviolette Divergenz geschaffen hat. Interessiert man sich nicht für den Grundzustand, wäre eine Renormierung des Hamiltonoperators möglich, derart

$$\hat{H}_{\text{ren}} := \hat{H} - \frac{\hbar\omega}{2} = \hbar\omega \hat{N} , \quad (4.14)$$

doch wird im weiteren Verlauf dieser Diplomarbeit der Casimireffekt eine wichtige Rolle spielen, ein Effekt, welcher den Grundzustand einer Feldtheorie und damit den Grundzustand des harmonischen Oszillators in den Mittelpunkt stellt. Zuerst wollen wir uns jedoch mit einer alternativen Darstellung des klassischen, harmonischen Oszillators beschäftigen.

4.2 Winkel-Wirkungsvariablen-Darstellung

In der Physik herrscht übergreifend Konsens über die Anschauung, dass sich Naturphänomene unabhängig vom Betrachter beschreiben lassen. Das impliziert die Forderung, dass die Lösungen der Bewegungsgleichungen in einem beliebigen Koordinatensystem gewonnen werden können. Im Hamilton'schen Formalismus wird diese Invarianz unter Koordinatentransformationen gerade durch symplektische Transformationen realisiert, da jene die kanonische Volumenform und damit das Phasenraumvolumen erhalten. Für den harmonischen Oszillator existiert eine lokal symplektische Abbildung, welche die Form der Hamilton'schen Funktion auf eine sehr einfache Form bringt:

$$F : \mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^2 \setminus \{\mathbf{0}\}$$

$$(\varphi, I) \mapsto (q, p) := \left(\sqrt{2I/(m\omega)} \cos \varphi, -\sqrt{2Im\omega} \sin \varphi \right)$$

bzw. die zugehörige Umkehrfunktion, welche durch Summation der Größen q^2 und p^2 respektive aus dem Quotienten von p und q unter penibler Beachtung der Eindeutigkeit des Winkels φ gewonnen werden kann:

$$F^{-1} : \mathbb{R}^2 \setminus \{\mathbf{0}\} \rightarrow \mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+$$

$$(q, p) \mapsto (\varphi, I) := \left(\arctan2(m\omega q, -p), m\omega q^2/2 + p^2/(2m\omega) \right) \quad . \quad (4.15)$$

Dabei ist die Funktion $\arctan2$ eine Abwandlung des üblichen Arkustangens, welcher den Quadranten beachtet, indem er die Vorzeichen von q und p berücksichtigt. Allgemein kann man den Winkel, welcher dem Punkt (x, y) aus der punktierten Ebene $\mathbb{R}^2 \setminus \{\mathbf{0}\}$ zugeordnet ist, durch die folgende Vorschrift bestimmen:

$$\arctan2 : \mathbb{R}^2 \setminus \{\mathbf{0}\} \rightarrow [0, 2\pi)$$

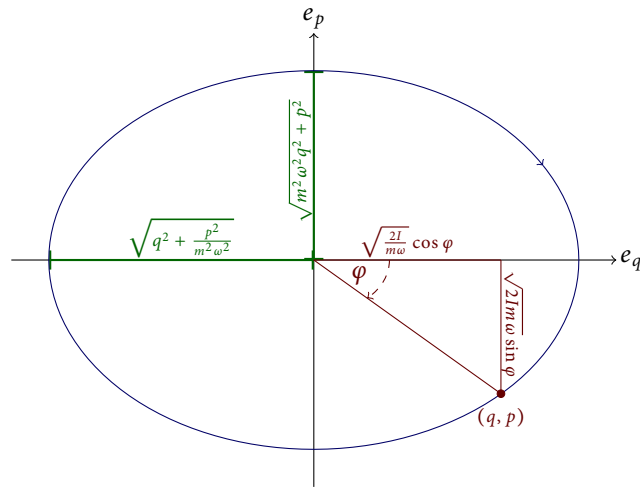
$$(x, y) \mapsto \begin{cases} \arctan \frac{y}{x} & \text{für } x > 0, y \geq 0 \\ \arctan \frac{y}{x} + 2\pi & \text{für } x > 0, y < 0 \\ \arctan \frac{y}{x} + \pi & \text{für } x < 0 \\ \pi/2 & \text{für } x = 0, y > 0 \\ 3\pi/2 & \text{für } x = 0, y < 0 \end{cases} \quad . \quad (4.16)$$

Das geübte Auge sieht sofort, dass es sich lediglich um eine Parametrisierung einer Ellipse handelt, in welcher der Drehsinn des Winkels negiert worden ist. Die Halbachsen der Ellipse fallen mit denen aus dem vorangegangenen Abschnitt über den klassischen, harmonischen Oszillator zusammen, welches sich in den Relationen

$$a = \sqrt{\frac{2I}{m\omega}} \equiv \sqrt{q^2 + \frac{p^2}{m\omega^2}} \quad \text{respektive} \quad b = \sqrt{2Im\omega} \equiv \sqrt{m\omega^2 q^2 + p^2} \quad (4.17)$$

niederschlägt. Man bemerke, dass die Halbachsen a und b lediglich durch einen Proportionalitätsfaktor $m\omega$ skaliert sind, so dass $b = m\omega a$. Es bietet sich darum an, später normierte Koordinaten $Q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q$ und $P = \frac{1}{\sqrt{\hbar m\omega}} p$ einzuführen, welche die Ellipse in einen Kreis deformieren. Zunächst wollen wir jedoch die Geometrie des Phasenraums in den kartesischen Koordinaten studieren und die Beziehung zu den neuen, sogenannten *Winkel-Wirkungsvariablen*, herausarbeiten.

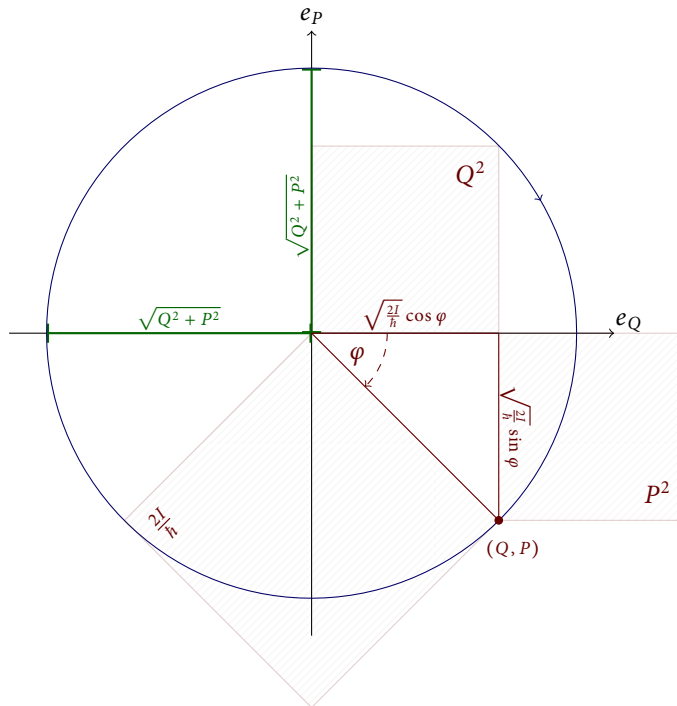
Trägt man in einem kartesischen Koordinatensystem die Kurve $\gamma(\varphi) := (q, p) = F(\varphi, I)$ für festes I und variablen Winkel φ auf, so erhält man die selbe Phasenraumellipse, welche Lösung der kanonischen Gleichungen in kartesischen Koordinaten war. Dieses Verhalten ist in der folgenden Skizze aufgetragen und suggeriert, dass die Größe I eine Konstante der physikalischen Bewegung ist:



Noch deutlicher wird diese Erkenntnis, wenn man die Hamilton'sche Funktion umrechnet, welche in den neuen Koordinaten $\tilde{H} := F^* H = H \circ F$ die erstaunlich einfache und ästhetische Form

$$\tilde{H}(\varphi, I) = H(q(\varphi, I), p(\varphi, I)) = \frac{1}{2m} 2Im\omega \sin^2 \varphi + \frac{m\omega^2}{2} \frac{2I}{m\omega} \cos^2 \varphi = \omega I \quad (4.18)$$

hat. Für eine feste Frequenz ist die Energie des System also mit der Größe I zu identifizieren. Mehr noch beschreibt I bis auf Konstanten die Fläche, welche in normierten Koordinaten Q respektive P gerade dem Radius $\frac{2I}{\hbar} = (Q^2 + P^2)$ zugeordnet werden würde, sprich nichts weiter als die Manifestation des pythagoreischen Theorems.



Die Wirkungsvariable I legt darum die Geometrie der physikalischen Kurve im Phasenraum fest und ist entlang von Lösungen der kanonischen Gleichungen eine Konstante.

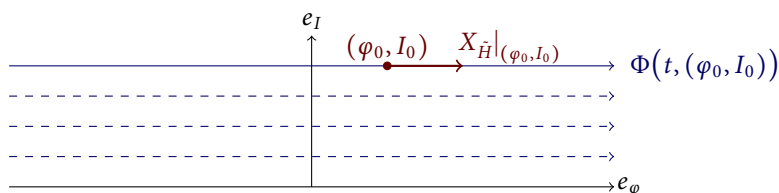
An dieser Stelle wollen wir erneut die Bemerkung über den Drehsinn des Phasendiagramms aufnehmen. Die Größe I ist offensichtlich strikt positiv, denn für $I = 0$ ist die Transformation F nicht definiert. Mehr noch kann man zeigen, dass I eine Erhaltungsgröße im Sinne des Noethertheorems der Hamiltonschen Mechanik ist. Dazu betrachte man die kanonische Zweiform $\tilde{\Omega} := d\varphi \wedge dI$ und die hamiltonschen Vektorfelder $X_I := dI^\sharp = 1\partial_\varphi - 0\partial_I$ respektive $X_{\tilde{H}} := d\tilde{H}^\sharp = \omega\partial_\varphi - 0\partial_I$ und verifiziere, dass die Poissonklammer $[I, \tilde{H}] = \tilde{\Omega}\langle X_I, X_{\tilde{H}} \rangle$ verschwindet:

$$\tilde{\Omega}\langle X_I, X_{\tilde{H}} \rangle = \frac{dI}{dt} - \frac{\partial I}{\partial t} \Leftrightarrow \tilde{\Omega}\langle \partial_\varphi, \omega\partial_\varphi \rangle = 0 \quad . \quad (4.19)$$

Da I aber keine explizite Zeitabhängigkeit aufweist, muss sein totales Differential bezüglich der Zeit verschwinden, d. h. I ist entlang der Integralkurven von $X_{\tilde{H}}$, nämlich $\Phi := (\Phi^\varphi, \Phi^I)$, gegeben durch

$$\begin{aligned} \varphi(t) &:= \Phi^\varphi(t, (\varphi_0, I_0)) = \omega t + \varphi_0 \quad \text{bzw.} \\ I(t) &:= \Phi^I(t, (\varphi_0, I_0)) = I_0 \quad , \end{aligned} \quad (4.20)$$

konstant. Dazu betrachte man auch das Phasendiagramm in den neuen Koordinaten. Die Bewegung gleicht der Bahn eines kräftefreien Partikels, welcher mit konstantem Impuls gleichförmig auf Geraden durch den Ortsraum propagiert:



Das Vektorfeld $X_{\tilde{H}}$ lässt sich auch als Pushforward des hamiltonschen Vektorfeldes X_H gewinnen, solange man den Nullpunkt $\mathbf{0} = (0, 0)$ explizit herausnimmt. Sei $f : \mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ eine beliebige Funktion auf dem Phasenraum, dann ergibt der Pushforward von X_H durch F^{-1} mit $\mathbf{x} = (x^1, x^2) := (q, p)$ respektive $\mathbf{y} = (y^1, y^2) := (\varphi, I)$ das gewünschte Ergebnis:

$$\begin{aligned} (F_*^{-1} X_H)f &= F_*^{-1} \circ X_H \circ F^{-1*} \circ f \\ &= (X_H(f \circ F^{-1})) \circ F \\ &= (d(f \circ F^{-1})\langle X_H \rangle) \circ F \\ &= \left(\frac{\partial f}{\partial y^i} \frac{\partial F^{-1i}}{\partial x^j} dx^j \left\langle \frac{p}{m} \partial_{x^1} - m\omega^2 q \partial_{x^2} \right\rangle \right) \circ F \\ &= \left(\frac{\partial f}{\partial y^i} \frac{\partial F^{-1i}}{\partial x^j} \left(\frac{p}{m} \delta_1^j - m\omega^2 q \delta_2^j \right) \right) \circ F \end{aligned} \quad (4.21)$$

An dieser Stelle wollen wir kurz unterbrechen und die Jacobimatrix $(M^{-1})^i_j := \frac{\partial F^{-1i}}{\partial x^j}$ explizit bestimmen:

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{m\omega p}{m^2 q^2 \omega^2 + p^2} & -\frac{m\omega q}{m^2 q^2 \omega^2 + p^2} \\ m\omega q & \frac{p}{m\omega} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{m\omega p}{m^2 q^2 \omega^2 + p^2} & -\frac{m\omega q}{m^2 q^2 \omega^2 + p^2} \\ m\omega q & \frac{p}{m\omega} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{p}{m} \\ -m\omega^2 q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega \\ 0 \end{pmatrix} \quad . \quad (4.22)$$

Infolgedessen gilt $(F_*^{-1} X_H)f = \left(\frac{\partial f}{\partial y^i} \omega \delta_1^i + 0 \delta_2^i \right) \circ F$ und da die Frequenz ω nicht vom Ort q bzw. dem Impuls p abhängt ist $\omega \circ F = \omega$. Abschließend konstatieren wir: $(F_*^{-1} X_H)f = \omega \partial_\varphi f = X_{\tilde{H}} f$ und das Vektorfeld der Bewegungsgleichungen $X_{\tilde{H}}$ ist damit das mit F zurückverpflanzte,¹ hamiltonsche Vektorfeld X_H . Diese Konstruktion hält offensichtlich nicht für den Nullpunkt $\mathbf{0}$, da dort die Jacobimatrix nicht

¹Wir wollen den Push eines Vektorfeldes mit der Inversen einer Funktion F *Zurückverpflanzung* mithilfe von F nennen.

existiert. Die Indefinitheit des Winkels im Ursprung kann man sich anschaulich so vorstellen, dass es unmöglich ist, am Nordpol der Erde den Längengrad zu bestimmen.

Ferner ist F eine lokal symplektische Transformation, weil sie die kanonische Zweiform invariant lässt. Setze dazu $\Omega := dq \wedge dp$ und verifiziere in einer Karte für zwei Tangentialvektoren V_{y_0} respektive W_{y_0} und für alle Punkte $y_0 = (\varphi_0, I_0) \in \mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+$, dass die zurückgezogene Volumenform gerade mit $\tilde{\Omega}$ zusammenfällt:

$$\begin{aligned} (F^* dq \wedge dp)_{y_0} \langle V_{y_0}, W_{y_0} \rangle &= (dq \wedge dp)_{F(y_0)} \langle F_* y_0 V_{y_0}, F_* y_0 W_{y_0} \rangle \\ &= (dq \wedge dp)_{x_0} \left\langle \left. \frac{\partial F^i}{\partial y^j} \right|_{y_0} v^j \partial_i^{x_0}, \left. \frac{\partial F^k}{\partial y^l} \right|_{y_0} w^l \partial_k^{x_0} \right\rangle \\ &= \left. \frac{\partial F^i}{\partial y^j} \right|_{y_0} v^j \varepsilon_{ik} \left. \frac{\partial F^k}{\partial y^l} \right|_{y_0} w^l \end{aligned} \quad (4.23)$$

Die Funktionalmatrix $M^i_j := \frac{\partial F^i}{\partial y^j}$ ist eine symplektische Matrix und hat die explizite Darstellung

$$M_{y_0} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{2I_0}{m\omega}} \sin \varphi_0 & \frac{1}{\sqrt{2I_0 m \omega}} \cos \varphi_0 \\ -\sqrt{2I_0 m \omega} \cos \varphi_0 & -\sqrt{\frac{m}{2I_0}} \sin \varphi_0 \end{pmatrix}, \text{ ferner gilt } (M_{y_0}^T)_j^i \varepsilon_{ik} (M_{y_0})^k_l = \varepsilon_{jl} \quad (4.24)$$

Setzt man dieses Ergebnis in die offenstehende Rechnung ein, so erhält man erwartungsgemäß:

$$(F^* dq \wedge dp)_{y_0} \langle V_{y_0}, W_{y_0} \rangle = v^j \varepsilon_{jl} w^l = (d\varphi \wedge dI)_{y_0} \langle V_{y_0}, W_{y_0} \rangle \Leftrightarrow F^* \Omega = \tilde{\Omega} \quad (4.25)$$

In gewisser Weise verwundert die Existenz dieser symplektischen Transformation F nicht, weil sie lediglich die Symmetrie der physikalischen Lösungskurven, nämlich Ellipsen, wiedergibt und der Winkel φ bis auf Proportionalitätsfaktoren die Zeit und damit die Evolution des Systems repräsentiert. Klassisch macht es trotz der Unzulänglichkeit des Ursprungs $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^2$ keinen Unterschied, in welchen Koordinaten man das System beschreibt, da die kanonischen Gleichungen durch Verpflanzung ineinander übergehen: $X_{\tilde{H}} = F_*^{-1} X_H$. Trotz dieser klassischen Äquivalenz beider Systeme von harmonischen Oszillatoren existiert ein gravierender Unterschied zwischen ihnen.

Der Phasenraum des harmonischen Oszillators in kartesischen Koordinaten ist durch das triviale Kotangentialbündel $T^*\mathbb{R} \cong \mathbb{R}^2$ gegeben, die symplektische Transformation F respektiert jedoch nur die punktierte Ebene $\mathbb{R}^2 \setminus \{\mathbf{0}\}$ und ihr Urbild ist dementsprechend die Mannigfaltigkeit $\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+$, welche allerdings *nicht* mit dem trivialen Kotangentialbündel der Einheitssphäre $T^*\mathcal{S}^1 \cong \mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}$ zusammenfällt. Mehr noch ist \mathbb{R}^2 einfach zusammenhängend im Gegensatz zur punktierten Ebene $\mathbb{R}^2 \setminus \{\mathbf{0}\}$ und das einführende Beispiel in Gleichung (2.1) im mathematischen Kapitel lehrt uns, dass das Fehlen eines einzigen Punktes dazu führen kann, dass geschlossene Differentialformen nicht mehr zwanghaft aus einer Stammform durch die äußere Ableitung gewonnen werden können. Auf der einen Seite ist es legitim, nach den Konsequenzen für die Quantisierung des harmonischen Oszillators in den neuen Koordinaten zu fragen, denn wir wissen bereits aus Kapitel 3, dass eine Quantisierung durch die Operatoren \hat{q} , \hat{p} und $\hat{1}$ nur auf dem Phasenraum \mathbb{R}^2 standhält. Auf der anderen Seite sollte die Quantisierung zweier äquivalenter, klassischer Systeme zumindest ähnliche Resultate nach sich ziehen und die Möglichkeit des Vergleichs beider Modelle eröffnen.

4.3 Ein naiver Versuch der Quantisierung

Historisch spielt die Winkel- und Wirkungsvariablen-Darstellung einer Hamilton'schen Funktion bei der Quantisierung eine wichtige Rolle. Genau sind diese in der folgenden Definition [29] festgehalten:

Definition 4.3.1. (Integrabilität von Systemen) Ein mechanisches System mit $2N$ Freiheitsgraden und zugehöriger Hamilton'scher Funktion $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ heiße *integrabel*, wenn eine umkehrbare Abbildung F existiert, so dass es neue Koordinaten $(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}}) := F^{-1}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ gibt, die folgende Eigenschaften erfüllen:

- Die alten Orte und Impulse $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = F(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}})$ sind periodische Funktionen in \tilde{q}^i für alle $i \in N$, darum werden die Koordinaten \tilde{q}^i auch **Winkelvariablen** genannt.
- Die neue Hamilton'sche Funktion $F^*H = H \circ F$ hängt nur noch von $\tilde{\mathbf{p}}$ ab. Die Koordinaten \tilde{p}_i sollen **Wirkungsvariablen** heißen.
- Die kanonischen Gleichungen gelten auch für die Winkel- und Wirkungsvariablen.

Die letzte Forderung impliziert übrigens, dass F ein lokaler Symplektomorphismus ist. Die neuen Variablen $(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}})$ werden in der Regel mit $(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{I})$ entsprechend ihrer Nomenklatur bezeichnet.

Die Eigenschaft, dass die neue Hamilton'sche Funktion \tilde{H} nicht mehr explizit von den Winkelvariablen φ^i abhängt, zieht sofort die Konstanz der Wirkungsvariablen entlang der Lösungsbahnen des hamiltonschen Vektorfeld $X_{\tilde{H}}$ nach sich, denn:

$$\frac{d}{dt} I_i = -\frac{\partial}{\partial \varphi^i} \tilde{H}(\mathbf{I}) = 0 \quad \Rightarrow \quad I_i(t) = \Phi^{I_i}(t, (\boldsymbol{\varphi}_0, \mathbf{I}_0)) = I_{0i} \quad . \quad (4.26)$$

Die Richtungsableitung der Hamilton'schen Funktion $\tilde{H}(\mathbf{I})$ entlang der Koordinate I_i ist offensichtlich ebenso eine Funktion, welche ausschließlich von \mathbf{I} abhängt, darum ist die partielle Ableitung $\omega^i := \partial_{I_i} \tilde{H}$ entlang der physikalischen Bewegung $\mathbf{I}(t) = \Phi^{\mathbf{I}}(t, (\boldsymbol{\varphi}_0, \mathbf{I}_0))$ eine Konstante:

$$\omega^i(\mathbf{I}) := \frac{\partial}{\partial I_i} \tilde{H}(\mathbf{I}) \equiv \frac{d}{dt} \varphi^i \quad \Rightarrow \quad \left. \frac{d}{dt} \varphi^i \right|_{\Phi^{\mathbf{I}}} = \omega^i(\Phi^{\mathbf{I}}(t, (\boldsymbol{\varphi}_0, \mathbf{I}_0))) = \omega^i(\mathbf{I}_0) = \text{const.} \quad , \quad (4.27)$$

woraus sofort der Fluss von $\varphi^i(t)$ durch Integration gewonnen werden kann:

$$\varphi^i(t) := \Phi^{\varphi^i}(t, (\boldsymbol{\varphi}_0, \mathbf{I}_0)) = \omega^i(\mathbf{I}_0)t + \varphi_0^i \quad . \quad (4.28)$$

Damit ist das System jedoch vollständig integriert, woher der Name **integrables System** herrührt. Die Winkelvariablen $\boldsymbol{\varphi}$ sind alle periodisch und die Wirkungsvariablen \mathbf{I} konstant entlang der physikalischen Bahnen, d. h. die Untermannigfaltigkeit der physikalischen Zustände im Phasenraum zu der Anfangsbedingung $(\boldsymbol{\varphi}_0, \mathbf{I}_0)$ ist gerade durch die regulären Punkte der impliziten Funktion $f := \mathbf{I} - \mathbf{I}_0 = 0$ gegeben. Topologisch ist diese Untermannigfaltigkeit homöomorph zu einem Torus vom Grad N

$$\mathcal{T}^N := \underbrace{\mathcal{S}^1 \times \dots \times \mathcal{S}^1}_{N\text{-mal}} \quad , \quad (4.29)$$

warum auch der Begriff der **invarianten Tori** mit dieser Thematik assoziiert wird. Die Lösungen der Bewegungsgleichungen in den alten Koordinaten erhält man dann durch die Koordinatentransformation $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = F(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{I})$ – die Schwierigkeit liegt also nicht in der Integration des Systems sondern in dem Auffinden einer entsprechenden Funktion F , welche die Umrechnung auf Winkel- und Wirkungsvariablen ermöglicht.

In unserem speziellen Fall des harmonischen Oszillators für $N = 1$ ist die Untermannigfaltigkeit der physikalischen Zustände zu fester Anfangsbedingung (φ_0, I_0) gerade die Ellipse, welche offensichtlich homöomorph zum trivialen Torus $\mathcal{T}^1 = \mathcal{S}^1$ ist. Die Aussage, dass die Geometrie der Ellipse durch die Wirkungsvariable $I = I_0$ festgelegt würde, lässt sich in diesem Zusammenhang nun auch analytisch im Rahmen von beschränkenden Funktionen und Untermannigfaltigkeiten des Phasenraums verifizieren.

Für die semiklassische Quantisierung hamiltonscher Systeme sind die Winkel- und Wirkungsvariablen besonders nützlich: Exemplarisch betrachte man die Hamilton'sche Funktion des harmonischen Oszillators in den neuen Koordinaten $\tilde{H}(\mathbf{I}) = \omega I$ und bemerke, dass die Größe I tatsächlich die Einheit einer Wirkung hat, denn $[I] = \text{Energie} \cdot \text{Zeit}$. Postuliert man daraufhin Niels Bohrs Auswahlbedingung, dass die Wirkung nur in äquidistanten Schritten der Größe $h = 2\pi\hbar$ auftreten kann, so liest man das Spektrum des Hamiltonoperators \hat{H} direkt ab:

$$\sigma(\hat{H})_{\text{semi}} = \{ \hbar \omega n \mid n \in \mathbb{N}_0 \} \quad . \quad (4.30)$$

Das ist ein bemerkenswert gutes Resultat, wenn man berücksichtigt, dass wir eigentlich nichts über die Eigenfunktionen oder die Vertauschungsrelationen der drei Operatoren \hat{q} , \hat{p} respektive $\hat{\mathbb{I}}$ vorausgesetzt haben. Diese Form der semiklassischen Quantisierung wird auch *Einstein-Brillouin-Keller-Methode* [29] genannt und hat in der Praxis den großen Vorteil, dass man das Lösen der Schrödingergleichung, welche eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung ist, auf das Lösen zweier gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung zurückführen kann. Die zugrundeliegende Theorie ermöglicht auch eine explizite Konstruktion der Wellenfunktion $\psi(q)$, worauf wir jedoch nicht weiter eingehen wollen.

4.4 Das Versagen des Winkels

Konsequenterweise müsste man nun versuchen, den harmonischen Oszillator in den Variablen φ und I derart zu quantisieren,² dass die Wellenfunktionen in ihrer Ortsdarstellung Teilmenge des Hilbertraums $\mathcal{H} = L^2([0, 2\pi], d\varphi)$ mit dem zugehörigen Skalarprodukt

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : L^2([0, 2\pi], d\varphi) \times L^2([0, 2\pi], d\varphi) \rightarrow \mathbb{R}, (\psi_1, \psi_2) \mapsto \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \psi_1^* \psi_2 \quad (4.31)$$

unter der Berücksichtigung periodischer Anschlussbedingungen $\psi(0) = \psi(2\pi)$ sind. Eine abzählbare Basis von $L^2([0, 2\pi], d\varphi)$ ist durch $e_n := \exp(in\varphi)$ für $n \in \mathbb{N}_0$ gegeben³ und die Operatoren in Ortsdarstellung $\hat{\varphi} := \varphi$ respektive $\hat{I} := -i\hbar\partial_\varphi$ werden analog zur Konstruktion in $L^2(\mathbb{R}, dq)$ realisiert. Man überprüfe zunächst, dass beide Operatoren hermitesch sind, seien dazu ψ_1 und ψ_2 2π -periodische, quadratintegrale Funktionen, dann folgt für den Winkel

$$\langle \psi_1 | \hat{\varphi} \psi_2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \psi_1^* \varphi \psi_2 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi (\varphi \psi_1)^* \psi_2 = \langle \hat{\varphi} \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (4.32)$$

Analog errechnet man für die Wirkung, dass der Oberflächenterm wegen der Periodizität verschwindet:

$$\langle \psi_1 | \hat{I} \psi_2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \psi_1^* (-i\hbar\partial_\varphi) \psi_2 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi i\hbar\partial_\varphi \psi_1^* \psi_2 + \frac{\hbar}{2\pi i} \left[\psi_1(\varphi)^* \psi_2(\varphi) \right]_0^{2\pi} = \langle \hat{I} \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (4.33)$$

Die Kommutatoren der Operatoren $\hat{\varphi}$ und \hat{I} respektieren das klassische Resultat der Poissonklammern

$$[\varphi, I]_{\varphi, I} = \partial_\varphi \varphi \partial_I I - \partial_\varphi I \partial_I \varphi = 1 \quad \mapsto \quad [\hat{\varphi}, \hat{I}] \psi = -i\hbar \varphi \partial_\varphi \psi + i\hbar \partial_\varphi (\varphi \psi) = i\hbar \psi \quad (4.34)$$

und das Bestimmen der Energie des Systems erfolgt mithilfe des Hamiltonoperators:

$$\hat{H} = \omega \hat{I} \quad \Rightarrow \quad \langle \hat{H} \rangle_n = \omega \langle e_n | \hat{I} | e_n \rangle = \hbar \omega n \quad (4.35)$$

Allerdings hält diese Konstruktion im Rahmen selbstadjungierter Operatoren $\hat{\varphi}$ bzw. \hat{I} nicht einer genauen Überprüfung stand, denn betrachte das Matrixelement:

$$i\hbar \delta_{nm} = \langle e_n | [\hat{\varphi}, \hat{I}] | e_m \rangle = \langle e_n | \hat{\varphi} \hat{I} | e_m \rangle - \langle e_n | \hat{I} \hat{\varphi} | e_m \rangle = \hbar(m-n) \langle e_n | \hat{\varphi} | e_m \rangle \quad (4.36)$$

und erwäge den Spezialfall $n = m$, welcher auf den Widerspruch $i\hbar = 0$ führt. Der wahre Grund für das Scheitern ergründet sich in dem Fakt, dass die Gleichung $i\hbar \delta_{nm} = \langle e_n | [\hat{\varphi}, \hat{I}] | e_m \rangle$ nicht gilt. Dazu studiere man die Definitionsbereiche der beteiligten Operatoren:

²Wir folgen auch hier der Veröffentlichung von François Gieres [20].

³Die Beschränkung auf positive Werte von n ist der Tatsache geschuldet, dass wir Energien beschreiben wollen.

Der Multiplikationsoperator $\hat{\phi} = \varphi$ ist überall definiert und selbstadjungiert. Wegen der Periodizität des Winkels φ ist der Definitionsbereich des Operators \hat{I} durch alle 2π -periodische Funktionen gegeben, deren Ableitung existiert und eine Teilmenge des Hilbertraums ist, sprich:

$$\mathcal{D}(\hat{I}) = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \partial_\varphi \psi \in \mathcal{H} \text{ und } \psi(0) = \psi(2\pi)\} \quad . \quad (4.37)$$

Der Oberflächenterm bei der partiellen Integration verschwindet genau dann, wenn ψ^* ebenso eine 2π -periodische Funktion ist und darum fallen die Definitionsbereiche $\mathcal{D}(\hat{I})$ und $\mathcal{D}(\hat{I}^\dagger)$ zusammen. Damit ist auch \hat{I} ein selbstadjungierter Operator. Weiter sind die Definitionsbereiche von Kombinationen zweier linearer Operatoren \hat{A} und \hat{B} stets gegeben durch:

$$\mathcal{D}(\hat{A} + \hat{B}) = \mathcal{D}(\hat{A}) \cap \mathcal{D}(\hat{B}) \quad \text{und} \quad \mathcal{D}(\hat{A}\hat{B}) = \{\psi \in \mathcal{D}(\hat{B}) \mid \hat{B}\psi \in \mathcal{D}(\hat{A})\} \quad . \quad (4.38)$$

Infolgedessen ist der Definitionsbereich des Kommutators $[\hat{\phi}, \hat{I}]$ durch $\mathcal{D}([\hat{\phi}, \hat{I}]) = \mathcal{D}(\hat{\phi}\hat{I}) \cap \mathcal{D}(\hat{I}\hat{\phi})$ festgelegt. Dabei sind die einzelnen Definitionsbereiche explizit durch folgende Ausdrücke gegeben:

$$\mathcal{D}(\hat{\phi}\hat{I}) = \{\psi \in \mathcal{D}(\hat{I}) \mid \hat{I}\psi \in \mathcal{D}(\hat{\phi})\} \quad \text{bzw.} \quad \mathcal{D}(\hat{I}\hat{\phi}) = \{\psi \in \mathcal{D}(\hat{\phi}) \mid \hat{\phi}\psi \in \mathcal{D}(\hat{I})\} \quad . \quad (4.39)$$

Die Funktion $\phi := \varphi\psi$ im letzten Ausdruck nimmt die Werte $\phi(0) = 0 \cdot \psi(0) = 0$ respektive $\phi(2\pi) = 2\pi \cdot \psi(2\pi)$ an und weil sie im Definitionsbereich von \hat{I} liegen soll, gilt sogar $\phi(0) = \phi(2\pi) \equiv 0$. Das ist aber nur für die Wahl $\psi(2\pi) = 0$ möglich und darum ist der Definitionsbereich des Kommutators mit der Beobachtung $\mathcal{D}(\hat{\phi}\hat{I}) = \mathcal{D}(\hat{I}\hat{\phi})$ durch den folgenden Ausdruck gegeben:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}([\hat{\phi}, \hat{I}]) &= \mathcal{D}(\hat{\phi}\hat{I}) \cap \mathcal{D}(\hat{I}\hat{\phi}) \\ &= \{\psi \in \mathcal{H} \mid \partial_\varphi \psi \in \mathcal{H} \text{ und } \psi(0) = \psi(2\pi)\} \cap \{\psi \in \mathcal{H} \mid \partial_\varphi \psi \in \mathcal{H} \text{ und } \psi(2\pi) = 0\} \\ &= \{\psi \in \mathcal{H} \mid \partial_\varphi \psi \in \mathcal{H} \text{ und } \psi(0) = \psi(2\pi) = 0\} \quad . \end{aligned} \quad (4.40)$$

Die Basisfunktionen $e_n = \exp(in\varphi)$ unseres Hilbertraums \mathcal{H} liegen aber gar nicht im Definitionsbereich des Kommutators $\mathcal{D}([\hat{\phi}, \hat{I}])$, streng genommen nehmen sie sogar *nie* den Wert 0 an. Darum ist ein Ausdruck wie $\langle e_n | [\hat{\phi}, \hat{I}] | e_m \rangle$ noch nicht einmal definiert und der vermeintliche Widerspruch löst sich in Luft auf. Trotzdem werfen sich eine Menge Fragen auf:

Die Unstetigkeit des Winkels in der mathematischen Beschreibung verursacht den Verlust der affinen Struktur im Parameter φ , d. h. wir haben die Freiheit verloren, den Nullpunkt $\varphi = 0$ beliebig auf den Einheitskreis zu legen. Der Definitionsbereich des Kommutators legt eindeutig den Referenzpunkt $\psi(0) = 0$ für die Wellenfunktionen fest, mehr noch verfügen wir nicht mehr über das gewohnte symbolische Kalkül mit den Operatoren $\hat{\phi}$ und \hat{I} . Ist diese Festlegung auf ein ausgezeichnetes Koordinatensystem für den Winkel überhaupt noch physikalisch? Kann der Winkel als multiplikativer Operator überhaupt als Observable angesehen werden? Können andere stetige Größen wie z. B. die trigonometrischen Funktionen \cos und \sin den Winkel besser beschreiben und erlaubt diese Vorgehensweise eine konsistente Beschreibung einer Quantenmechanik auf dem Einheitskreis?

Genau an dieser Stelle wollen wir uns darauf besinnen, dass wir bereits im Besitz eines Quantisierungsverfahrens auf beliebigen symplektischen Mannigfaltigkeiten sind. Der nächste Abschnitt wird eine Antwort auf die Mehrheit der aufgeworfenen Fragen geben, indem wir mithilfe einer Gruppenwirkung auf dem Phasenraum $\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+$ eine quantisierte Theorie konstruieren.

4.5 Konstruktion der Observablen

In diesem Abschnitt wollen wir das Quantisierungsverfahren mit der kanonischen Gruppe auf den Phasenraum $M = \mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+$ anwenden. Als erstes versuchen wir, eine *natürliche* Gruppenwirkung einer geometrischen Gruppe \mathcal{G} auf M zu finden. Hier kann man ausnutzen, dass $\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+$ diffeomorph zu einem Kegel C ist, dessen Spitze entfernt worden ist. Bettet man den Kegel als Teilmenge des \mathbb{R}^3 ein, so kann man ihn als Untermannigfaltigkeit mithilfe einer impliziten Funktion beschreiben:

$$C := \{(x^0, x^1, x^2) \in \mathbb{R}^3 \mid (x^0)^2 - (x^1)^2 - (x^2)^2 = 0 \text{ und } x^0 > 0\} \quad . \quad (4.41)$$

Der Diffeomorphismus kann explizit durch die Abbildung ρ angegeben werden:

$$\rho : \mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+ \rightarrow C \subset \mathbb{R}^3, \quad (\varphi, I) \mapsto (I, I \cos \varphi, I \sin \varphi) \quad . \quad (4.42)$$

Seine Umkehrabbildung ρ^{-1} kann aus Beziehungen am Einheitskreis bei penibler Beachtung des Winkels gewonnen werden:

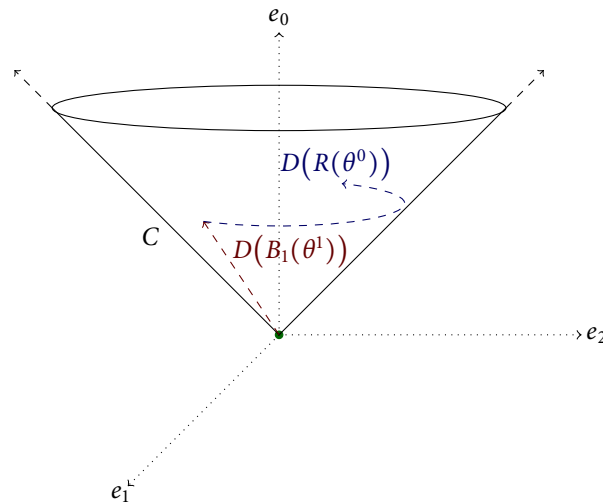
$$\rho^{-1} : C \subset \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+, \quad (x^0, x^1, x^2) \mapsto (\arctan2(x^1, x^2), x^0) \quad . \quad (4.43)$$

Bei der Suche nach einer Gruppenwirkung suggeriert die Gestalt des Vorwärts(licht)kegels C natürlich sofort die eigentliche orthochrone Lorentzgruppe $SO^\uparrow(1,2)$, welche als Automorphismus auf C wirkt. Wir wollen die fundamentale Darstellung $D : SO^\uparrow(1,2) \rightarrow \text{Aut}(\mathbb{R}^3)$, $g \mapsto D(g)$ und ihre Erzeugenden auf dem \mathbb{R}^3 mithilfe von 3×3 -Matrizen wählen:

$$\begin{aligned} D(R(\theta^0)) &:= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta^0 & -\sin \theta^0 \\ 0 & \sin \theta^0 & \cos \theta^0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad K_0 := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \\ D(B_1(\theta^1)) &:= \begin{pmatrix} \cosh \theta^1 & \sinh \theta^1 & 0 \\ \sinh \theta^1 & \cosh \theta^1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad K_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \\ D(B_2(\theta^2)) &:= \begin{pmatrix} \cosh \theta^2 & 0 & \sinh \theta^2 \\ 0 & 1 & 0 \\ \sinh \theta^2 & 0 & \cosh \theta^2 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad K_2 := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad . \end{aligned} \quad (4.44)$$

Der Parameter θ^0 beschreibt den Drehwinkel um die x^0 -Achse und θ^1 bzw. θ^2 sind die Rapiditäten der Lorentzboosts in Richtung x^1 - und x^2 -Achse. Somit realisieren wir eine Gruppenwirkung Ψ auf dem Kegel mithilfe der fundamentalen Darstellung:

$$\Psi : SO^\uparrow(1,2) \times C \rightarrow C, \quad (g, x) \mapsto \Psi(g, x) := D(g) \cdot x^T \quad \text{mit} \quad x = (x^0, x^1, x^2) \quad . \quad (4.45)$$



Graphisch überzeugt man sich davon, dass jeder Punkt auf dem Kegel schon durch eine Kombination aus $D(R(\theta^0))$ und $D(B_1(\theta^1))$ erreichbar ist und die Gruppenwirkung damit *transitiv* ist. *Effektiv* ist die Wirkung auch, da jede Kombination der Parameter $(\theta^0, \theta^1, \theta^2)$ verschieden von $(0, 0, 0)$ einen Punkt auf dem Kegel entweder durch eine Drehung oder eine Translation entlang der Kegelkontur transformiert. Dass die Wirkung *symplektisch* ist, kann man aufgrund der Einbettung in den \mathbb{R}^3 vorerst nicht zeigen, weshalb wir später darauf eingehen werden. Damit haben wir eine Gruppenwirkung Ψ_g auf dem Kegel C gefunden, welche geeignet scheint. Eigentlich brauchen wir aber eine Gruppenwirkung Φ auf $\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+$. Diese können wir mithilfe des Diffeomorphismus ρ konstruieren:

$$\begin{array}{ccc}
\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+ & \xrightarrow{\rho} & C \\
\Phi_g \downarrow & & \downarrow \Psi_g \\
\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+ & \xleftarrow{\rho^{-1}} & C
\end{array}$$

Wir definieren $\Phi_g := \rho^{-1} \circ \Psi_g \circ \rho$ und machen damit den Diffeomorphismus ρ zu einer äquivarianten Abbildung, denn für alle $(\varphi, I) \in \mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+$ und $g \in SO^\uparrow(1, 2)$ gilt:

$$\rho \circ \Phi_g((\varphi, I)) = \rho \circ \rho^{-1} \circ \Psi_g \circ \rho((\varphi, I)) = \Psi_g \circ \rho((\varphi, I)) \quad (4.46)$$

Damit sind $\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+$ und C nicht nur als differenzierbare Mannigfaltigkeiten äquivalent sondern auch als G -Räume. Für eine beliebige glatte Funktion $f : \mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ kann man nun punktweise die fundamentalen Vektorfelder angeben:

$$\begin{aligned}
\gamma_{(\varphi, I)}^A f &= \left. \frac{d}{dt} \right|_0 f \circ \Phi_{\exp(-tA)}((\varphi, I)) \\
&= \left. \frac{d}{dt} \right|_0 f \circ \rho^{-1} \circ \Psi_{\exp(-tA)} \circ \rho((\varphi, I)) \\
&= \left. \frac{d}{dt} \right|_0 f \circ \rho^{-1} \circ \Psi_{\exp(-tA)}((x^0, x^1, x^2)) \\
&= \Gamma_{(x^0, x^1, x^2)}^A (f \circ \rho^{-1}) \\
&= (\rho_*^{-1} \Gamma_{(x^0, x^1, x^2)}^A) f
\end{aligned} \quad (4.47)$$

Die fundamentalen Vektorfelder $\gamma^A \in \mathfrak{X}(\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+)$ kann man also durch den Pushforward der fundamentalen Vektorfelder $\Gamma^A \in \mathfrak{X}(C)$ mithilfe der Funktion ρ^{-1} bestimmen.

Die Liealgebra der Darstellung von der Lorentzgruppe auf dem Kegel ist durch die Erzeugenden K_0, K_1 und K_2 gegeben. Ihre Exponentialfunktion kann man mithilfe der Darstellung D angeben:

$$\begin{aligned}
\exp : \mathcal{LD}(SO^\uparrow(1, 2)) &\rightarrow D(SO^\uparrow(1, 2)) \\
\theta^0 K_0 &\mapsto \exp(\theta^0 K_0) = D(R(\theta^0)) \\
\theta^i K_i &\mapsto \exp(\theta^i K_i) = D(B_i(\theta^i)) \quad \text{für } i \in \{1, 2\} \quad (4.48)
\end{aligned}$$

Ein allgemeines Element $A \in \mathcal{LD}(SO^\uparrow(1, 2))$ aus der Liealgebra kann man demnach mithilfe von drei reellen Zahlen θ^0, θ^1 bzw. θ^2 durch $A := \theta^0 K_0 + \theta^1 K_1 + \theta^2 K_2$ parametrisieren. Darum ist die Liealgebra isomorph zum \mathbb{R}^3 mit den Vertauschungsrelationen:

$$[(\theta^0, \theta^1, \theta^2), (\xi^0, \xi^1, \xi^2)] = (\theta^2 \xi^1 - \theta^1 \xi^2, \theta^2 \xi^0 - \theta^0 \xi^2, \theta^0 \xi^1 - \theta^1 \xi^0) \quad (4.49)$$

Das fundamentale Vektorfeld $\Gamma^A \in \mathfrak{X}(C)$ ist infolgedessen für eine glatte Funktion $g : C \rightarrow \mathbb{R}$ durch den folgenden Ausdruck gegeben:

$$\begin{aligned}
\Gamma_x^A g &= \left. \frac{d}{dt} \right|_0 g \circ \Psi_{\exp(-tA)}((x^0, x^1, x^2)) \\
&= \left. \frac{d}{dt} \right|_0 g((x^0, x^1, x^2) \cdot (\mathbb{1} - tA + \frac{t^2}{2} A^2 + \mathcal{O}(t^3))^T) \\
&= -\left((\theta^1 x^1 + \theta^2 x^2) \partial_0^x + (\theta^1 x^0 - \theta^0 x^2) \partial_1^x + (\theta^0 x^1 + \theta^2 x^0) \partial_2^x \right) g \quad (4.50)
\end{aligned}$$

Für die Zurückverpflanzung des fundamentalen Vektorfeldes Γ^A mithilfe des Diffeomorphismus ρ benötigen wir das Differential von ρ^{-1} :

$$J := d\rho^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{x^2}{(x^1)^2 + (x^2)^2} & \frac{x^1}{(x^1)^2 + (x^2)^2} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow -J \cdot A \cdot x^T = -\begin{pmatrix} \theta^0 + \frac{\theta^2 x^0 x^1 - \theta^1 x^0 x^2}{(x^1)^2 + (x^2)^2} \\ \theta^1 x^1 + \theta^2 x^2 \end{pmatrix} \quad (4.51)$$

Substituiert man nun die Koordinatenfunktionen x^0, x^1 bzw. x^2 mithilfe von ρ , so erhält man das fundamentale Vektorfeld $\gamma^A \in \mathfrak{X}(\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+)$:

$$\gamma^A = -\left((\theta^0 - \theta^1 \sin \varphi + \theta^2 \cos \varphi)\partial_\varphi + (\theta^1 I \cos \varphi + \theta^2 I \sin \varphi)\partial_I\right) . \quad (4.52)$$

Weiter berechnet man das hamiltonsche Vektorfeld $j(f) = -X_f$ einer allgemeinen Observable auf dem Phasenraum $f : \mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ und setzt es mit dem fundamentalen Vektorfeld γ^A gleich:

$$-df^\sharp = -(\partial_I f)\partial_\varphi + (\partial_\varphi f)\partial_I \stackrel{!}{=} -(\theta^0 - \theta^1 \sin \varphi + \theta^2 \cos \varphi)\partial_\varphi - (\theta^1 I \cos \varphi + \theta^2 I \sin \varphi)\partial_I . \quad (4.53)$$

Aus einem Koeffizientenvergleich folgt, dass sich die Observable f als Linearkombination aus den Funktionen $I, I \sin \varphi$ bzw. $I \cos \varphi$ schreiben lässt:

$$f(\varphi, I) = \theta^0 I - \theta^1 I \sin \varphi + \theta^2 I \cos \varphi . \quad (4.54)$$

Die Rechnung, ob die Gruppenwirkung Φ_g symplektisch ist, erübrigt sich von hier an, denn wir konnten die fundamentalen Observablen aus den fundamentalen Vektorfeldern bestimmen, d. h. Φ_g ist global hamiltonsch. Nun kann man testweise die Impulsabbildung P definieren und nachrechnen, ob der Kozykel $z(A, B)$ verschwindet:

$$P : so^\uparrow(1, 2) \rightarrow \mathfrak{D}\mathfrak{b}\mathfrak{s}(\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+), (\theta^0, \theta^1, \theta^2) \mapsto P(\theta^0, \theta^1, \theta^2) := \theta^0 I - \theta^1 I \sin \varphi + \theta^2 I \cos \varphi . \quad (4.55)$$

Seien $A = (\theta^0, \theta^1, \theta^2)$ respektive $B = (\xi^0, \xi^1, \xi^2)$ zwei Liealgebraelemente aus $so^\uparrow(1, 2)$, so ist die Poissonklammer aus $P(A)$ und $P(B)$ gegeben durch:

$$\begin{aligned} [P(A), P(B)] &= \partial_\varphi(\theta^0 I - \theta^1 I \sin \varphi + \theta^2 I \cos \varphi) \partial_I(\xi^0 I - \xi^1 I \sin \varphi + \xi^2 I \cos \varphi) - \theta \leftrightarrow \xi \\ &= -I(\theta^1 \cos \varphi + \theta^2 \sin \varphi)(\xi^0 - \xi^1 \sin \varphi + \xi^2 \cos \varphi) - \theta \leftrightarrow \xi \\ &= -I(\theta^1 \xi^0 \cos \varphi - \theta^1 \xi^1 \sin \varphi \cos \varphi + \theta^1 \xi^2 \cos^2 \varphi \\ &\quad + \theta^2 \xi^0 \sin \varphi - \theta^2 \xi^1 \sin^2 \varphi + \theta^2 \xi^2 \sin \varphi \cos \varphi) - \theta \leftrightarrow \xi \\ &= (\theta^2 \xi^1 - \theta^1 \xi^2)I - (\theta^2 \xi^0 - \theta^0 \xi^2)I \sin \varphi + (\theta^0 \xi^1 - \theta^1 \xi^0)I \cos \varphi \\ &= P([A, B]) . \end{aligned} \quad (4.56)$$

Infolgedessen verschwindet die Obstruktion $z(A, B) = [P(A), P(B)] - P([A, B])$ und wir können die geometrische Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{G} = so^\uparrow(1, 2)$ mit der kanonischen Liealgebra $\mathcal{L}\mathcal{C}$ identifizieren. Eine Basis der fundamentalen Observablen ist demnach durch den folgenden Ausdruck gegeben:

$$\mathcal{B} = \{k_0, k_1, k_2\} \quad \text{mit} \quad k_0 := I \quad \text{und} \quad k_1 := I \cos \varphi \quad \text{respektive} \quad k_2 := -I \sin \varphi . \quad (4.57)$$

An dieser Stelle haben wir den Index der beiden Boosts aus mathematischen Gründen getauscht, was zwar die Vertauschungsrelationen an einigen Stellen um ein Vorzeichen abändert, aber die Struktur der Liealgebra unangetastet lässt.⁴ Nun kann man zur Darstellungstheorie der eigentlichen, orthochronen Lorentzgruppe $SO^\uparrow(1, 2)$ oder eine ihrer Überlagerungsgruppen aufbrechen.

4.6 Die Liealgebra $so^\uparrow(1, 2)$ und ihre Darstellungen

Im vorangegangenen Abschnitt haben wir die neuen Observablen $k_0 = I, k_1 = I \cos \varphi$ und $k_2 = -I \sin \varphi$ konstruiert, welche bezüglich der Poissonklammer $[\cdot, \cdot]_{\varphi, I}$ die Vertauschungsrelationen der Liealgebra $so^\uparrow(1, 2)$ erfüllen. Für die weitere Studie ihrer Eigenschaften wollen wir die linearen Operatoren \hat{K}_n

⁴Der Grund ist lediglich, dass man die später auftretenden Auf- und Absteigeoperatoren $\hat{K}^\pm = \hat{K}_1 \pm i\hat{K}_2$ analog zu denen der Drehimpulsalgebra schreiben kann.

benutzen, welche zuvor mit der imaginären Zahl i durchmultipliziert worden sind, was sich lediglich in den Vorzeichen der Vertauschungsrelationen niederschlägt:

$$\begin{aligned} [k_0, k_1]_{\varphi, I} &= -k_2 & [\hat{K}_0, \hat{K}_1] &= i\hat{K}_2 \\ [k_0, k_2]_{\varphi, I} &= k_1 & \mapsto [\hat{K}_0, \hat{K}_2] &= -i\hat{K}_1 \\ [k_1, k_2]_{\varphi, I} &= k_0 & [\hat{K}_1, \hat{K}_2] &= -i\hat{K}_0 \quad . \end{aligned} \quad (4.58)$$

Mithilfe der Operatoren \hat{K}_1 und \hat{K}_2 lassen sich die Auf- und Absteigeoperatoren $\hat{K}^\pm := \hat{K}_1 \pm i\hat{K}_2$ definieren, deren Name sich in den Vertauschungsrelationen mit \hat{K}_0 begründet. Man beachte dazu die starke Ähnlichkeit mit Gleichung (4.12):

$$\begin{aligned} [\hat{K}_0, \hat{K}^\pm] &= [\hat{K}_0, \hat{K}_1] \pm i[\hat{K}_0, \hat{K}_2] \stackrel{(4.58)}{=} i\hat{K}_2 \pm \hat{K}_1 = \pm\hat{K}^\pm \quad \text{bzw.} \\ [\hat{K}^-, \hat{K}^+] &= i[\hat{K}_1, \hat{K}_2] - i[\hat{K}_2, \hat{K}_1] \stackrel{(4.58)}{=} \hat{K}_0 + \hat{K}_0 = 2\hat{K}_0 \quad . \end{aligned} \quad (4.59)$$

Angenommen man habe eine explizite Darstellung des Operators \hat{K}_0 gewählt und die zugehörige Eigenfunktion gefunden, so dass die Eigenwertgleichung $\hat{K}_0\psi_\mu = \mu\psi_\mu$ gilt, dann sind die Zustände $\hat{K}^\pm\psi_\mu$ auch Eigenzustände vermöge der Eigenschaft:

$$\hat{K}_0(\hat{K}^\pm\psi_\mu) = (\hat{K}^\pm\hat{K}_0 + [\hat{K}_0, \hat{K}^\pm])\psi_\mu \stackrel{(4.59)}{=} (\mu \pm 1)(\hat{K}^\pm\psi_\mu) \quad . \quad (4.60)$$

Das Spektrum des Operators \hat{K}_0 ist analog zur konventionellen Quantisierung mithilfe der Operatoren \hat{a}^\pm äquidistant, d. h. $\sigma(\hat{K}_0) \cong \mathbb{Z}$. Eine untere Schranke ist hier nicht durch eine algebraische Abschätzung möglich, da der Kommutator der Auf- und Absteigeoperatoren im Gegensatz zur konventionellen Quantisierung wieder proportional zu \hat{K}_0 ist, d. h. das Spektrum kann ebenso negative Werte annehmen. Eine Beschränkung auf positive Werte wäre demnach eine künstlich eingeführte, physikalische Forderung, welche jedoch ihre Rechtfertigung in der Tatsache findet, dass der Operator \hat{K}_0 der Observablen I zugeordnet wird und diese bekanntlich eine Fläche in der klassischen Betrachtung, mehr noch proportional zur Energie des Systems, ist. Darum wollen wir den Eigenwert μ als Summe zweier charakterisierender Zahlen $\mu = n + k$ schreiben, wobei k den Eigenwert des Grundzustands $\mu_0 = 0 + k$ widerspiegelt:

$$\sigma(\hat{K}_0) = \{n + k \mid n \in \mathbb{N}_0, k \in \mathbb{R}^+\} \ni \mu \geq k \quad . \quad (4.61)$$

Nun wollen wir einen Operatoren bestimmen, welcher sich als Polynom der Operatoren \hat{K}_0, \hat{K}_1 respektive \hat{K}_2 schreiben lässt und gleichzeitig mit ihnen kommutiert. Dieser sogenannte **Casimiroperator** ist durch $\hat{C} := \hat{K}_1^2 + \hat{K}_2^2 - \hat{K}_0^2$ in Analogie zur Liealgebra der Lorentzgruppe $SO^\dagger(1, 3)$ gegeben, denn:

- Zunächst verifizieren wir $[\hat{K}_0, \hat{C}] = 0$ mithilfe von Gleichung (4.58):

$$\begin{aligned} [\hat{K}_0, \hat{C}] &= [\hat{K}_0, \hat{K}_1^2] + [\hat{K}_0, \hat{K}_2^2] - [\hat{K}_0, \hat{K}_0^2] \\ &= \hat{K}_1[\hat{K}_0, \hat{K}_1] + [\hat{K}_0, \hat{K}_1]\hat{K}_1 + \hat{K}_2[\hat{K}_0, \hat{K}_2] + [\hat{K}_0, \hat{K}_2]\hat{K}_2 \\ &\stackrel{(4.58)}{=} i\hat{K}_1\hat{K}_2 + i\hat{K}_2\hat{K}_1 - i\hat{K}_2\hat{K}_1 - i\hat{K}_1\hat{K}_2 \quad . \end{aligned} \quad (4.62)$$

- Ferner rechnet man leicht das Verschwinden des Kommutators $[\hat{K}_1, \hat{C}]$ nach:

$$\begin{aligned} [\hat{K}_1, \hat{C}] &= [\hat{K}_1, \hat{K}_1^2] + [\hat{K}_1, \hat{K}_2^2] - [\hat{K}_1, \hat{K}_0^2] \\ &= \hat{K}_2[\hat{K}_1, \hat{K}_2] + [\hat{K}_1, \hat{K}_2]\hat{K}_2 - \hat{K}_0[\hat{K}_1, \hat{K}_0] - [\hat{K}_1, \hat{K}_0]\hat{K}_0 \\ &\stackrel{(4.58)}{=} -i\hat{K}_2\hat{K}_0 - i\hat{K}_0\hat{K}_2 + i\hat{K}_0\hat{K}_2 + i\hat{K}_2\hat{K}_0 \quad . \end{aligned} \quad (4.63)$$

- Abschließend ermittelt man analog zu den vorangegangenen Rechnungen $[\hat{K}_0, \hat{C}] = 0$:

$$\begin{aligned}
 [\hat{K}_2, \hat{C}] &= [\hat{K}_2, \hat{K}_1^2] + [\hat{K}_2, \hat{K}_2^2] - [\hat{K}_2, \hat{K}_0^2] \\
 &= \hat{K}_1[\hat{K}_2, \hat{K}_1] + [\hat{K}_2, \hat{K}_1]\hat{K}_1 - \hat{K}_0[\hat{K}_2, \hat{K}_0] - [\hat{K}_2, \hat{K}_0]\hat{K}_0 \\
 &\stackrel{(4.58)}{=} i\hat{K}_1\hat{K}_0 + i\hat{K}_0\hat{K}_1 - i\hat{K}_0\hat{K}_1 - i\hat{K}_1\hat{K}_0 \quad .
 \end{aligned} \tag{4.64}$$

Der Casimiroperator \hat{C} lässt sich offensichtlich auch durch die Auf- und Absteigeoperatoren \hat{K}^+ bzw. \hat{K}^- ausdrücken, denn man prüfe den folgenden Ausdruck:

$$\hat{K}^- \hat{K}^+ = (\hat{K}_1 - i\hat{K}_2)(\hat{K}_1 + i\hat{K}_2) = \hat{K}_1^2 + \hat{K}_2^2 + i[\hat{K}_1, \hat{K}_2] \stackrel{(4.58)}{=} \hat{C} + \hat{K}_0^2 + \hat{K}_0 \quad . \tag{4.65}$$

Analog erhält man die Relation $\hat{K}^+ \hat{K}^- = \hat{C} + \hat{K}_0^2 - \hat{K}_0$. Damit können wir nun den Eigenwert des Casimiroperators explizit mithilfe des Grundzustands ψ_{0+k} ausrechnen. Der Operator \hat{K}_0 kommutiert per Definition mit dem Casimiroperator \hat{C} , so dass die Eigenfunktionen ψ_μ gleichzeitig Eigenvektoren von \hat{C} sind, d. h. $\hat{C}\psi_\mu \equiv \hat{C}\psi_{\mu,c} = c\psi_{\mu,c}$ und damit gilt mit $\hat{K}^+ = (\hat{K}^-)^*$:

$$\begin{aligned}
 0 = \|\hat{K}^- \psi_{k,c}\|^2 &= \langle k, c | \hat{K}^+ \hat{K}^- | k, c \rangle \\
 &= \langle k, c | \hat{C} | k, c \rangle + \langle k, c | \hat{K}_0^2 | k, c \rangle - \langle k, c | \hat{K}_0 | k, c \rangle \\
 &= c \langle k, c | k, c \rangle + k^2 \langle k, c | k, c \rangle - k \langle k, c | k, c \rangle \quad .
 \end{aligned} \tag{4.66}$$

Aus dieser Gleichung liest man den Eigenwert von \hat{C} direkt als $c = k - k^2$ ab. Zusammenfassend bietet es sich an, die Eigenfunktionen anstatt durch die Zahlen $\mu = n + k$ und $c = k(1 - k)$ mit dem Paar (n, k) zu klassifizieren, so dass

$$\hat{K}_0 \psi_{(n,k)} = (n + k) \psi_{(n,k)} \quad \text{respektive} \quad \hat{C} \psi_{(n,k)} = k(1 - k) \psi_{(n,k)} \quad . \tag{4.67}$$

Nun ist es auch möglich die Wirkung der Auf- und Absteigeoperatoren explizit anzugeben. Setze dazu $\hat{K}^+ \psi_{(n,k)} = \xi^+ \psi_{(n+1,k)}$ und benutze die Normierung der Eigenfunktionen $\langle n+1, k | n+1, k \rangle = \langle n, k | n, k \rangle$:

$$\begin{aligned}
 |\xi^+|^2 \langle n+1, k | n+1, k \rangle &= \langle n, k | \hat{K}^- \hat{K}^+ | n, k \rangle \\
 &= (k(1 - k) + (n + k)^2 + (n + k)) \langle n, k | n, k \rangle \\
 &= (2k + n)(n + 1) \langle n, k | n, k \rangle
 \end{aligned} \tag{4.68}$$

Damit ist ξ^+ bis auf eine willkürliche Phase $e^{i\theta}$ eindeutig durch $\xi^+ = \sqrt{(2k + n)(n + 1)}$ festgelegt. Analog erhält man für $\xi^- = \sqrt{(2k + n - 1)n}$ und fasst zusammen:

$$\hat{K}^+ \psi_{(n,k)} = \sqrt{(2k + n)(n + 1)} \psi_{(n+1,k)} \quad \text{und} \quad \hat{K}^- \psi_{(n,k)} = \sqrt{(2k + n - 1)n} \psi_{(n-1,k)} \quad . \tag{4.69}$$

Hier wird besonders deutlich, dass in die Herleitung des Eigenwerts vom Casimiroperator \hat{C} die Forderung eingegangen ist, dass es einen Grundzustand gibt, denn die Normierung ξ^- erzwingt sofort $\hat{K}^- \psi_{(0,k)} = 0$, d. h. das Abreißen des Spektrums nach unten ist bereits im Verhalten von \hat{C} verschlüsselt.

Nun stellt sich natürlich die Frage, ob überhaupt eine Darstellung existiert, welche die geforderten Eigenschaften respektiert. Prinzipiell ist es hier möglich eine endlichdimensionale Darstellung auf der Liealgebra selbst, welche zugleich dreidimensionaler Vektorraum ist, zu finden, die *adjungierte Darstellung*. Hier konstruiert man eine explizite Darstellung der drei Operatoren \hat{K}_0, \hat{K}_1 bzw. \hat{K}_2 , indem man ihnen 3×3 -Matrizen mithilfe der Strukturkonstanten der Liealgebra zuweist:

$$[\hat{K}_l, \hat{K}_m] = i \sum_{n=1}^3 f_{lmn} \hat{K}_n \quad \text{und daraufhin} \quad M(\hat{K}_n)_{lm} := i f_{lmn} \quad . \tag{4.70}$$

Die Vertauschungsrelationen der Operatoren \hat{K}_n liefern damit sofort die explizite Form der Matrizen:

$$M(\hat{K}_0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad M(\hat{K}_1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad M(\hat{K}_2) = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \quad (4.71)$$

Definiert man nun abschließend die Abbildung

$$\text{ad}_{M(\hat{K}_l)} : \mathfrak{so}^\dagger(1,2) \rightarrow \mathfrak{so}^\dagger(1,2), \quad M(\hat{K}_m) \mapsto \text{ad}_{M(\hat{K}_l)}(M(\hat{K}_m)) := [M(\hat{K}_l), M(\hat{K}_m)] , \quad (4.72)$$

so findet man tatsächlich zu den Eigenwerten $\pm 1, 0$ der Matrix $M(\hat{K}_0)$ drei Eigenvektoren, nämlich die Darstellung der Leiteroperatoren $M(\hat{K}^\pm)$ bzw. $M(\hat{K}_0)$ selbst:

$$\text{ad}_{M(\hat{K}_0)}(M(\hat{K}^\pm)) = [M(\hat{K}_0), M(\hat{K}^\pm)] = \pm 1M(\hat{K}^\pm) \quad \text{bzw.} \quad \text{ad}_{M(\hat{K}_0)}(M(\hat{K}_0)) = 0M(\hat{K}_0) . \quad (4.73)$$

In dieser Darstellung hat \hat{K}_0 noch einen negativen Eigenwert, wir werden später ausschließlich positive Energien beschreiben. Außerdem merken wir für den endlichdimensionalen Fall schnell, dass uns die Eigenvektoren ausgehen und unser Spektrum damit schnell abreißen müsste, darum braucht es eine Darstellung auf einem unendlichdimensionalen Vektorraum.

4.7 Die positive, diskrete Serie

In unserem Fall hat die **positive, diskrete Serie der Lorentzgruppe** [30] die geforderten Eigenschaften: Für $k \geq \frac{1}{2}$ ist der Hilbertraum der holomorphen Funktionen auf der offenen Einheitscheibe $\mathcal{D} = \{z = x + iy \mid |z| < 1\}$ mit dem Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle := \frac{2k-1}{\pi} \int_{\mathcal{D}} dx dy f(z)^* g(z) (1 - |z|^2)^{2k-2} \quad (4.74)$$

und der expliziten Darstellungen der drei Operatoren

$$\hat{K}_0 = k + z \frac{d}{dz} \quad \text{und} \quad \hat{K}^+ = 2kz + z^2 \frac{d}{dz} \quad \text{bzw.} \quad \hat{K}^- = \frac{d}{dz} \quad (4.75)$$

eine⁵ richtige Wahl. Da sich jede holomorphe Funktion in Potenzen von z entwickeln lässt, macht es Sinn, den Ausdruck $\langle z^n, z^m \rangle$ für $n, m \in \mathbb{N}_0$ zu betrachten:

$$\begin{aligned} \langle z^n, z^m \rangle &= \frac{2k-1}{\pi} \int_{\mathcal{D}} dx dy z^{n*} z^m (1 - |z|^2)^{2k-2} \\ &= \frac{2k-1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^1 \rho d\rho \rho^n e^{-in\varphi} \rho^m e^{im\varphi} (1 - \rho^2)^{2k-2} \\ &= \frac{2k-1}{\pi} 2\pi \delta_{nm} \int_0^1 d\rho \rho^{n+m+1} (1 - \rho^2)^{2k-2} \\ &= (2k-1) \delta_{nm} \beta\left(2k-1, \frac{m}{2} + \frac{n}{2} + 1\right) . \end{aligned} \quad (4.76)$$

Dabei beschreibt die β -Funktion eine Kombination aus Γ -Funktionen

$$\beta(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \quad (4.77)$$

⁵Eine Übersicht über die vielfältige Darstellungstheorie der Lorentzgruppe und ihrer Überlagerungsgruppen findet man in [31].

derart, dass der vollständige Ausdruck für die Normierung wie folgt lautet:

$$\langle z^n, z^m \rangle = (2k-1)\delta_{nm} \frac{\Gamma(2k-1)\Gamma(n+1)}{\Gamma(2k+n)} = \delta_{nm} \frac{\Gamma(2k)\Gamma(n+1)}{\Gamma(2k+n)} \quad . \quad (4.78)$$

Daher bietet es sich an, eine orthogonale und normierte Basis für den Hilbertraum der holomorphen Funktionen auf der offenen Einheitscheibe modulo einer beliebigen Phase in folgender Form festzulegen:

$$e_{n,k} := \sqrt{\frac{\Gamma(2k+n)}{\Gamma(2k)\Gamma(n+1)}} z^n \quad . \quad (4.79)$$

Die Wirkung der Operatoren \hat{K}_0, \hat{K}^\pm kann man nun explizit nachrechnen:

$$\hat{K}_0 e_{n,k} = \sqrt{\frac{\Gamma(2k+n)}{\Gamma(2k)\Gamma(n+1)}} \left(k + z \frac{d}{dz} \right) z^n = (k+n) \sqrt{\frac{\Gamma(2k+n)}{\Gamma(2k)\Gamma(n+1)}} z^n = (n+k) e_{n,k} \quad . \quad (4.80)$$

Mithilfe der Relation $x\Gamma(x) = \Gamma(x+1)$ erhält man für den Aufsteigeoperator:

$$\begin{aligned} \hat{K}^+ e_{n,k} &= \sqrt{\frac{\Gamma(2k+n)}{\Gamma(2k)\Gamma(n+1)}} \left(2kz + z^2 \frac{d}{dz} \right) z^n = (2k+n) \sqrt{\frac{\Gamma(2k+n)}{\Gamma(2k)\Gamma(n+1)}} z^{n+1} \\ &= \sqrt{(2k+n)(n+1)} \sqrt{\frac{(2k+n)\Gamma(2k+n)}{\Gamma(2k)(n+1)\Gamma(n+1)}} z^{n+1} = \sqrt{(2k+n)(n+1)} e_{n+1,k} \quad . \end{aligned} \quad (4.81)$$

Abschließend verifiziert man das Verhalten des Absteigeoperators:

$$\begin{aligned} \hat{K}^- e_{n,k} &= \sqrt{\frac{\Gamma(2k+n)}{\Gamma(2k)\Gamma(n+1)}} \frac{d}{dz} z^n = n \sqrt{\frac{\Gamma(2k+n)}{\Gamma(2k)\Gamma(n+1)}} z^{n-1} \\ &= \sqrt{(2k+n-1)n} \sqrt{\frac{\Gamma(2k+n)n}{(2k+n-1)\Gamma(2k)\Gamma(n+1)}} z^{n-1} = \sqrt{(2k+n-1)n} e_{n-1,k} \end{aligned} \quad (4.82)$$

Für zwei beliebige holomorphe Funktionen f und g existiert bekanntlich immer eine Reihenentwicklung der Form $f = \sum_n a_n z^n$ respektive $g = \sum_m b_m z^m$, so dass ihr Skalarprodukt hauptsächlich durch die Koeffizienten aus der Reihenentwicklung bestimmt wird, denn

$$\langle f, g \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} a_n^* b_m \langle z^n, z^m \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^* b_n \frac{\Gamma(2k)\Gamma(n+1)}{\Gamma(2k+n)} \quad . \quad (4.83)$$

Für $k = \frac{1}{2}$ vereinfacht sich das Skalarprodukt sogar auf jenes des Hilbertraums der quadratsummierbaren Folgen l_2 und erlaubt eine Interpretation als Hilbertraum $L^2([0, 2\pi], d\varphi)$, deren Wellenfunktionen positive Fourierkoeffizienten haben, d. h. $a_n = 0$ für $n < 0$:

$$\psi_1 = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{in\varphi} \quad \text{bzw.} \quad \psi_2 = \sum_{m=0}^{\infty} b_m e^{im\varphi} \quad . \quad (4.84)$$

Das zugehörige Skalarprodukt hat erwartungsgemäß die Form:

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi_1^* \psi_2 d\varphi \quad . \quad (4.85)$$

Eine Rechnung verifiziert die Isomorphie zwischen beiden Hilberträumen für den Grenzwert $k \rightarrow \frac{1}{2}$:

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} a_n^* b_m e^{i\varphi(m-n)} d\varphi = \frac{2\pi}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} a_n^* b_m \delta_{nm} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^* b_n \quad . \quad (4.86)$$

Die Operatoren \hat{K}_0 bzw. \hat{K}^\pm können als Generatoren einer unitären Darstellung der Überlagerungsgruppe $SU(1,1)$ von $SO(1,2)$ angegeben werden:⁶

$$\hat{K}_0 := -i\partial_\varphi + \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad \hat{K}^+ := e^{i\varphi}(1 - i\partial_\varphi) \quad \text{bzw.} \quad \hat{K}^- := e^{-i\varphi}(-i\partial_\varphi) \quad . \quad (4.87)$$

Die Wirkung der Operatoren auf die Basiszustände ergibt das bekannte Ergebnis:

$$\begin{aligned} \hat{K}_0 e^{in\varphi} &= (-i\partial_\varphi + \frac{1}{2})e^{in\varphi} = (n + \frac{1}{2})e^{in\varphi} \quad , \\ \hat{K}^+ e^{in\varphi} &= e^{in\varphi}(1 - i\partial_\varphi)e^{in\varphi} = (n+1)e^{i(n+1)\varphi} \quad , \\ \hat{K}^- e^{in\varphi} &= e^{-in\varphi}(-i\partial_\varphi)e^{in\varphi} = ne^{i(n-1)\varphi} \quad . \end{aligned} \quad (4.88)$$

Abschließend sind wir natürlich an den konventionellen Leiteroperatoren \hat{a}^\pm interessiert, welche wir nun konstruieren werden.

4.8 Konstruktion alternativer Leiteroperatoren

In diesem Abschnitt sollen alternative Auf- bzw. Absteigeoperatoren \hat{A}^\pm konstruiert werden, welche die gleichen Vertauschungsrelationen der üblichen Leiteroperatoren \hat{a}^\pm des harmonischen Oszillators erfüllen. Dazu besinne man sich zunächst der Eigenschaft eines selbstadjungierten Operators \hat{O} mit diskreten Spektrum, dass er sich stets in einer Summe von Projektionsoperatoren zerlegen lässt derart, dass die Bildräume orthogonal aufeinander stehen – eine direkte Folge des Spektralsatzes:

$$\hat{O} = \sum_{\lambda \in \sigma(\hat{O})} \lambda \hat{P}_\lambda \quad \text{mit} \quad \hat{P}_\lambda \psi = \psi_\lambda \quad \text{für alle} \quad \psi \in \mathcal{H} \quad . \quad (4.89)$$

Dabei sind die Eigenwerte λ reell und die Menge aller Eigenfunktionen ψ_λ eine orthogonale Basis des Hilbertraums \mathcal{H} . Nun lässt sich für eine beliebige reellwertige Funktion $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine Operatorfunktion $F: \mathfrak{Dp}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathfrak{Dp}(\mathcal{H})$ definieren [32].

Definition 4.8.1. (Operatorfunktion) Sei f eine reellwertige Funktion auf \mathbb{R} derart, dass $f(\lambda) \rightarrow 0$ wenn $\lambda \rightarrow 0$ und $f(0) = 0$, dann heiße die Abbildung F definiert durch

$$F(\hat{O}) := \sum_{\lambda \in \sigma(\hat{O})} f(\lambda) \hat{P}_\lambda \quad (4.90)$$

zu f zugehörige **Operatorfunktion**. Es ist auch möglich die Einschränkungen an die Funktion f weniger hart zu fassen, so dass f in einer Umgebung der 0 beschränkt ist. Oft setzt man unter Missachtung der Definitionsbereiche $F = f$.

Ist \hat{O} ein selbstadjungierter Operator, so erbt der Operator $F(\hat{O})$ diese Eigenschaft, solange f stets reellwertig bleibt, denn sei ϕ Eigenzustand zum Eigenwert λ , dann ist

$$\langle \phi | F(\hat{O}) \phi \rangle = \langle \phi | f(\lambda) \phi \rangle = f(\lambda) \langle \phi | \phi \rangle = f(\lambda)^* \langle \phi | \phi \rangle = \langle f(\lambda) \phi | \phi \rangle = \langle F(\hat{O}) \phi | \phi \rangle \quad . \quad (4.91)$$

⁶Zu geraden k gehören die Operatoren zu einer Darstellung der $SO(1,2)$ und für halbzahlige k benutzt man die Überlagerungsgruppe $SU(1,1)$ analog zu Beschreibung von Drehimpulsen bzw. Spin mithilfe der Gruppen $SO(3)$ und $SU(2)$.

Betrachtet man die Wirkung der Leiteroperatoren in Gleichung (4.69), dann fällt einem sofort auf, dass diese bis auf den Faktor $\sqrt{2k+n}$ respektive $\sqrt{2k+n-1}$ mit der Wirkung der Auf- und Absteigeoperatoren des harmonischen Oszillators \hat{a}^\pm zusammenfallen. Darum bietet es sich an, neue Operatoren \hat{A}^\pm derart zu definieren, dass die Vorfaktoren herausfallen:

$$\hat{A}^+ := \hat{K}^+ \frac{1}{\sqrt{\hat{K}_0 + k}} \quad \text{respektive} \quad \hat{A}^- := \frac{1}{\sqrt{\hat{K}_0 + k}} \hat{K}^- . \quad (4.92)$$

Dabei wird die Funktion $f(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda+k}}$ für die Konstruktion des Operators $F(\hat{K}_0)$ benutzt. Es existiert sogar eine Integraldarstellung, welche mithilfe der Identität

$$\frac{1}{\sqrt{x}} = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\rho \frac{1}{\sqrt{\rho}} \frac{1}{\rho+x} \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}^+ \quad (4.93)$$

gewonnen werden kann. Das Auswerten der inversen Wurzel eines Operators \hat{O} zwischen Eigenzuständen ψ respektive ϕ wird dann wie folgt vorgenommen:

$$\langle \psi | \frac{1}{\sqrt{\hat{O}}} | \phi \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\rho \frac{1}{\sqrt{\rho}} \langle \psi | (\rho \hat{1} + \hat{O})^{-1} | \phi \rangle . \quad (4.94)$$

Die Wirkung der neuen Operatoren \hat{A}^\pm auf die Eigenzustände von \hat{K}_0 bzw. \hat{C} ergibt das gewünschte Ergebnis:

$$\begin{aligned} \hat{A}^+ \psi_{(n,k)} &= \hat{K}^+ \frac{1}{\sqrt{\hat{K}_0 + k}} \psi_{(n,k)} = \hat{K}^+ \frac{1}{\sqrt{n+2k}} \psi_{(n,k)} = \sqrt{n+1} \psi_{(n+1,k)} \quad \text{bzw.} \\ \hat{A}^- \psi_{(n,k)} &= \frac{1}{\sqrt{\hat{K}_0 + k}} \hat{K}^- \psi_{(n,k)} = \frac{1}{\sqrt{\hat{K}_0 + k}} \sqrt{(2k+n-1)n} \psi_{(n-1,k)} = \sqrt{n} \psi_{(n-1,k)} . \end{aligned} \quad (4.95)$$

Man bemerke, dass bis auf die Abhängigkeit des Eigenzustands $\psi_{(n,k)}$ vom Parameter k die Gesamtwirkung der neuen Leiteroperatoren *nicht* von der expliziten Wahl von k abhängt. Die Auf- bzw. Absteigeoperatoren erfüllen die üblichen Vertauschungsrelationen des harmonischen Oszillators, denn

$$[\hat{A}^-, \hat{A}^+] \psi_{(n,k)} = (\hat{A}^- \hat{A}^+ - \hat{A}^+ \hat{A}^-) \psi_{(n,k)} = ((n+1) - n) \psi_{(n,k)} = \hat{1} \psi_{(n,k)} . \quad (4.96)$$

Algebraisch wäre es nun auch möglich, zwei Operatoren \hat{q} und \hat{p} zu rekonstruieren, welche die selben Vertauschungsrelationen wie die Weyl-Heisenberg-Algebra der nichtrelativistischen Quantenmechanik besitzen:

$$\hat{q} := \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{A}^+ + \hat{A}^-) \quad \text{respektive} \quad \hat{p} := i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (\hat{A}^+ - \hat{A}^-) . \quad (4.97)$$

Der Kommutator beider Operatoren produziert das bekannte Ergebnis:

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \frac{i\hbar}{2} ([\hat{A}^+, \hat{A}^+] - [\hat{A}^+, \hat{A}^-] + [\hat{A}^-, \hat{A}^+] - [\hat{A}^-, \hat{A}^-]) = i\hbar \hat{1} . \quad (4.98)$$

Berechnet man den Hamiltonoperator $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p})$ mit den neuen Operatoren, so erhält man erwartungs-

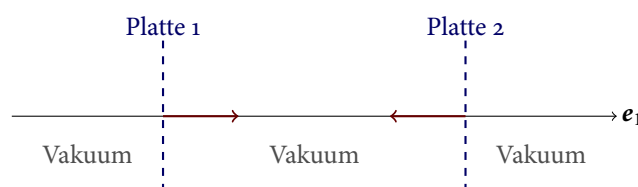
gemäß das Spektrum des konventionellen harmonischen Oszillators:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}(\hat{q}, \hat{p}) &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2 \\
 &= \frac{1}{2m} \frac{-\hbar m\omega}{2} (\hat{A}^+ - \hat{A}^-)^2 + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{A}^+ + \hat{A}^-)^2 \\
 &= \frac{\hbar\omega}{4} \left((\hat{A}^+ + \hat{A}^-)^2 - (\hat{A}^+ - \hat{A}^-)^2 \right) \\
 &= \frac{\hbar\omega}{4} (4\hat{A}^+\hat{A}^- + 2) \\
 &= \hbar\omega \left(\hat{A}^+\hat{A}^- + \frac{1}{2} \right) .
 \end{aligned} \tag{4.99}$$

Infolgedessen ist es in diesem Rahmen möglich, den konventionellen harmonischen Oszillator durch die alternative Quantisierung auf $\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+$ zu beschreiben.

5 Anwendung auf den Casimireffekt

QUANTISIERTE Theorien warten zum Erstaunen des Betrachters immer wieder mit unerwarteten Effekten auf, welche keine Analogie in der klassischen Mechanik besitzen und um so konsternierter vernimmt man die Botschaft, dass das Experiment diese in der Regel bestätigt. Eine solcher Vorhersagen von Quantenfeldtheorien ist die Eigenschaft zweier perfekt leitender, parallel angeordneter Platten im Vakuum, dass sie sich ohne Anwesenheit eines äußeren Potentials anziehen, der sogenannte *Casimireffekt*. In diesem Zusammenhang ist es hilfreich zu realisieren, dass in dieser theoretischen Anordnung eine Kraft aus dem Vakuum, sprich aus dem Nichts, entsteht. In der folgenden Abbildung ist zur Illustration die Anordnung für den eindimensionalen Fall im Ort aufgetragen.¹



Als erster postulierte Hendrik Casimir [33] im Jahre 1948 die Existenz dieser Kraft im Rahmen einer Rechnung in der Quantenelektrodynamik und erst acht Jahre später gelang es einer Gruppe von Experimentatoren um Jewgeni Lifschitz, den Effekt tatsächlich durch das Experiment [34] zu bestätigen.

Man mag sich zunächst naiv fragen, welches Detail in der vorangegangenen Abbildung dafür verantwortlich ist, dass eine Kraft wirkt, immerhin ist bis auf die Platten, welche wir als massefreie Objekte idealisieren wollen, absolut *nichts* beteiligt. Wir werden im Laufe dieses Kapitels herausarbeiten, dass es verschiedene Klassen des Vakuums sind, welche diesen Effekt verursachen, d. h. es bedarf einer Differenzierung des Nichts. Anschaulich lässt sich vereinfacht illustrieren, dass das Vakuum zwischen den Platten im mathematischen Sinne dünner ist als außerhalb und somit ein Druck an den Platten entsteht, um dieser Ungleichverteilung entgegenzuwirken. Streng mathematisch gesprochen, ist die Mächtigkeit der möglich realisierbaren Zustände zwischen den Platten kleiner als außerhalb.

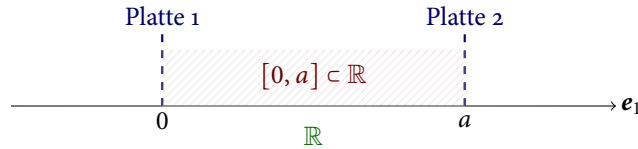
Die Casimirkraft wirkt nur auf sehr kurzen Distanzen und ist damit der alltäglichen Observation verborgen. Sie existiert abhängig von der genauen Anordnung des Experiments und Wahl der Materialien in anziehender sowie abstoßender Form und spielt eine enorme Rolle in der Nanotechnologie bzw. in Fertigungsprozessen auf vergleichbarer Größenskala, weshalb sie in der Zukunft eine immer wichtigere Rolle einnehmen wird. Ihr akademischer Wert liegt in der Erkenntnis, dass Feldtheorien mit ihren unendlich vielen Freiheitsgraden anscheinend eine plausible Konstruktion zur Beschreibung von physikalischen Phänomenen sind. Einen ausführlichen Überblick zum aktuellen Stand der Forschung zum Casimireffekt und seinen Anwendungen bietet die Publikation von Steve Lamoreaux [35].

5.1 Der Casimireffekt für das Klein-Gordon-Feld

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wollen wir der Übersicht und Einfachheit zu Liebe den Casimireffekt lediglich für den spinlosen Fall auf eindimensionalen Ortsraum betrachten. Diese Einschränkung wird die wesentlichen Mechanismen in der Rechnung nicht beeinträchtigen, so dass eine Verallgemeinerung auf den vollen Minkowskiraum zu jeder Zeit möglich ist. Auch wird der didaktische Wert dieser Rechnung durch diese unwesentliche Vereinfachung nicht geschmälert, mehr noch kommen die essentiellen Strukturen besser zu Tage.

¹Die Platten können in diesem *eindimensionalen* Fall natürlich nicht ausgedehnt in Richtung der Ordinate realisiert werden.

Explizit wählen wir eine zweidimensionale, flache und reellwertige Raumzeit mit einer Metrik mit Index eins, sprich den Minkowskiraum in zwei Dimensionen $M_2 := (\mathbb{R}^2, g = \text{diag}(+1, -1))$. Den Ortsanteil des Konfigurationsraums M_2 wollen wir in zwei Regionen unterteilen: Das Gebiet zwischen den Platten wollen wir so wählen, dass es durch das abgeschlossene Intervall $[0, a] \subset \mathbb{R}$ repräsentiert wird.² Ohne Anwesenheit der Platten soll die uns interessierende Region der gesamte Zahlenstrahl der reellen Zahlen \mathbb{R} sein.



Ferner werden wir versuchen, auf jedem dieser beiden Gebiete eine Quantenfeldtheorie mithilfe des reellwertigen Klein-Gordon-Feldes zu definieren, dessen Lagrangedichte \mathcal{L} und Hamiltondichte \mathcal{H} bekanntlich durch die folgenden Gleichungen in natürlichen Einheiten gegeben sind:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{m^2}{2} \phi \phi \quad \text{respektive} \quad \mathcal{H} = \frac{1}{2} \partial_0 \phi \partial_0 \phi + \frac{1}{2} \partial_1 \phi \partial_1 \phi + \frac{m^2}{2} \phi \phi \quad . \quad (5.1)$$

Zu diesem Zeitpunkt betrachten wir das Problem noch als rein klassische Feldtheorie – die Quantisierung der beteiligten Felder wird erst später stattfinden. Aus diesem Grund ist es legitim die Bewegungsgleichungen aus dem Variationsprinzip für klassische Felder zu gewinnen. Man erhält infolgedessen die homogene Klein-Gordon-Gleichung:

$$\partial_\mu \frac{\partial}{\partial (\partial_\mu \phi)} \mathcal{L} - \frac{\partial}{\partial \phi} \mathcal{L} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (\square + m^2) \phi = 0 \quad . \quad (5.2)$$

Die Lösungen auf beiden Gebieten unterscheiden sich aufgrund der abweichenden Randbedingungen: Bei Anwesenheit der Platten ist es sinnvoll, das Verschwinden der Felder am Rand und damit eine Dirichlet-Randbedingung zu fordern. Im komplementären Fall existieren schlichtweg keine Randbedingungen, welche die Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung in irgendeiner Form einschränken. Zunächst wollen wir den ersten Fall ein wenig genauer beleuchten.

5.1.1 Anwesenheit der Platten

Im realen Experiment fordert man die Anwesenheit von perfekt leitenden Platten, damit man das Verschwinden der physikalischen Felder, repräsentiert durch masselose Photonen, auf dem Rand sicher garantieren kann. Unser massives und spinloses „Photon“ wollen wir deswegen mithilfe der Dirichlet-Randbedingung $\phi(t, 0) = \phi(t, a) = 0$ implementieren. Man prüft leicht nach, dass die entsprechenden Lösungen durch die Positiv- und Negativfrequenzlösung $\phi_k^\pm(t, x) = A e^{\pm i \omega t} \sin(kx)$ für ein $A \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ gegeben sind. Die Randbedingung erzwingt, dass das Produkt ka ein ganzzahliges Vielfaches von der Kreiszahl π sein muss und der Impuls daher nur in *diskreten* Werten vorkommen kann:

$$ka \stackrel{!}{=} \pi n \quad \text{für alle } n \in \mathbb{Z} \quad \Rightarrow \quad k = \frac{\pi n}{a} \quad . \quad (5.3)$$

Der Kosinus tritt übrigens deswegen nicht auf, weil wir per Konstruktion das Intervall nicht symmetrisch um den Nullpunkt gelegt haben, damit greifen wir die vorangegangene Bemerkung über die Lage des Intervalls erneut auf und konstatieren, dass eine allgemeine Wahl lediglich kompliziertere Linearkombinationen aus Kosinus und Sinus verursacht hätte.

²Die Rechnung wird nur durch die Länge des Intervalls bestimmt und wird hier ausschließlich deswegen rechts vom Ursprung positioniert, damit die Lösungen der Bewegungsgleichungen zu gegebenen Randbedingungen besonders einfach sind.

Die Klein-Gordon-Gleichung erzwingt, dass der Impuls k und die Energie ω durch die Dispersionsrelation der speziellen Relativitätstheorie, die *Energie-Impuls-Beziehung*³ $-\omega^2 + k^2 + m^2 = 0$, verknüpft sind. Aus der Konstanz der Ruhemasse m und dem diskreten Spektrums des Impulses k folgt sofort, dass die Energie ω ebenso nur in diskreten Werten vorliegen kann. Analog zum Kastenpotential in der nicht-relativistischen Quantenmechanik können somit nur *abzählbar*, wenn auch unendlich, viele mögliche Zustände zwischen den Platten realisiert werden.

Die Amplitude A wollen wir nun mithilfe des Skalarprodukts für das Klein-Gordon-Feld normieren und fordern sinnvollerweise, dass Positiv- bzw. Negativfrequenzlösung orthogonale Zustände sind:

$$\langle f, g \rangle := i \int_0^a dx (f^* \partial_t g - \partial_t f^* g) \quad \text{mit} \quad \langle \phi_k^\pm, \phi_{k'}^\pm \rangle = \mp \delta_{kk'} \quad \text{bzw.} \quad \langle \phi_k^\pm, \phi_{k'}^\mp \rangle = 0 \quad . \quad (5.4)$$

Die erste der beiden Relationen legt den Koeffizienten A bis auf eine komplexe Phase eindeutig fest:

$$\begin{aligned} \langle \phi_k^\pm, \phi_{k'}^\pm \rangle &= i \int_0^a dx (\phi_k^{\pm*} \partial_0 \phi_{k'}^\pm - \partial_0 \phi_k^{\pm*} \phi_{k'}^\pm) \\ &= i |A|^2 e^{it(\mp \omega_k \pm \omega_{k'})} (\pm i \omega_{k'} \pm i \omega_k) \int_0^a dx \sin(kx) \sin(k'x) \quad . \end{aligned}$$

Verwendet man nun die Darstellung des Sinus in exponentieller Schreibweise $\sin(x) = \frac{1}{2i}(e^{+ix} - e^{-ix})$, so erhält man:

$$\begin{aligned} &= \mp |A|^2 e^{\mp it(\omega_k - \omega_{k'})} (\omega_{k'} + \omega_k) \frac{1}{4} \int_0^a dx (e^{ix(k-k')} + e^{-ix(k-k')} - e^{ix(k+k')} - e^{-ix(k+k')}) \\ &= \mp \frac{|A|^2}{4} e^{\mp it(\omega_k - \omega_{k'})} (\omega_{k'} + \omega_k) (2a\delta_{kk'} - 2a\delta_{-kk'}) \quad . \end{aligned}$$

Man bemerke, dass für die gegebene Lösung immer nur einer der beiden Summanden in $2a\delta_{kk'} - 2a\delta_{-kk'}$ beitragen kann. Die Gleichung $\sin(kx) \sin(k'x) = -\sin(-kx) \sin(k'x)$ legt offen, dass die Terme für $k = -k'$ mit denen für $k = k'$ zusammenfallen, darum entscheiden wir uns für die Lesart, in der zwei Lösungen genau dann übereinstimmen, wenn beide Impulse identisch sind und ignorieren die andere, äquivalente Beschreibung.

$$= \mp \frac{a|A|^2}{2} e^{\mp it(\omega_k - \omega_{k'})} (\omega_{k'} + \omega_k) \delta_{kk'} \quad . \quad (5.5)$$

Für verschiedene Impulse k bzw. k' verschwindet der berechnete Ausdruck immer und für den komplementären Fall $k = k'$ fallen die Frequenzen ω_k respektive $\omega_{k'}$ zusammen, d. h. es muss folgender Zusammenhang gelten: $a|A|^2 \omega_k = 1$. Durch diese Relation ist die Amplitude A bis auf eine Phase festgelegt, welche wir aus ästhetischen Gründen vernachlässigen wollen:

$$\langle \phi_k^\pm, \phi_{k'}^\pm \rangle = \mp |A|^2 \omega_k \delta_{kk'} \quad \text{und daher} \quad A := \frac{1}{\sqrt{a\omega_k}} \quad . \quad (5.6)$$

Analog zur vorangegangenen Rechnung bestimmt man die verbleibende Orthogonalitätsrelation

$$\langle \phi_k^\pm, \phi_{k'}^\mp \rangle = \mp \frac{a|A|^2}{2} e^{\mp it(\omega_k + \omega_{k'})} (\omega_k - \omega_{k'}) \delta_{kk'} \quad (5.7)$$

³Die Energie-Impuls-Beziehung beschreibt als implizite Funktion $f(\omega, k) = -\omega^2 + k^2 + m^2 = 0$ die Massenschale als Hyperfläche.

und stellt fest, dass sie für alle Kombinationen aus k bzw. k' immer verschwindet. Damit ist die Lösung der Klein-Gordon-Gleichung im Rahmen einer klassischen Feldtheorie vollständig festgelegt und wir können zur Konstruktion einer Quantenfeldtheorie fortschreiten.

Dem reellen Feld ϕ weisen wir mithilfe der Fourierzerlegung den Charakter eines Feldoperators zu, indem es als Summe der Positiv- bzw. Negativfrequenzlösungen und der Leiteroperatoren des harmonischen Oszillators geschrieben wird.

$$\hat{\phi}(t, x) := \sum_{k \geq 0} (\phi_k^-(t, x) \hat{a}_k^- + \phi_k^+(t, x) \hat{a}_k^+) \quad \text{mit} \quad [\hat{a}_k^-, \hat{a}_{k'}^+] = \delta_{kk'} \quad \text{bzw.} \quad [\hat{a}_k^+, \hat{a}_{k'}^+] = 0 \quad . \quad (5.8)$$

Hier wird deswegen über die Positiv- und Negativfrequenzlösungen in dieser Form summiert, damit der Feldoperator $\hat{\phi}$ selbstadjungiert ist und damit ein ladungsfreies Teilchen beschreibt. Die Leiteroperatoren \hat{a}_k^\pm sind so zu lesen, dass sie eine Mode mit dem Impuls k oder analog mit der Frequenz ω_k erzeugen oder vernichten.

Der Casimireffekt macht eine Aussage über eine Kraft, welche stark mit dem Vakuum assoziiert wird, also liegt es nahe, die Energie des Grundzustands zwischen den Platten $E_{[0,a]} := \int_0^a dx \langle 0 | \widehat{\mathcal{H}} | 0 \rangle$ auszurechnen. Man rufe sich dazu erneut die Hamiltondichte in Gleichung (5.1) für das reellwertige Klein-Gordon-Feld in das Gedächtnis und substituiere die Felder ϕ mit den Feldoperatoren $\hat{\phi}$. Wir wollen nun iterativ die einzelnen Beiträge bestimmen, indem wir mit dem ersten Summanden starten:⁴

$$\begin{aligned} \langle 0 | \partial_0 \hat{\phi} \partial_0 \hat{\phi} | 0 \rangle &= \langle 0 | \sum_k \sum_{k'} \partial_0 \phi_k^- \hat{a}_k^- \partial_0 \phi_{k'}^+ \hat{a}_{k'}^+ | 0 \rangle = \langle 0 | \sum_k \sum_{k'} (-i\omega_k) i\omega_{k'} \phi_k^- \phi_{k'}^+ (\delta_{kk'} + \hat{a}_{k'}^+ \hat{a}_k^-) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \sum_k \frac{\omega_k \omega_k}{a \omega_k} \sin^2(kx) | 0 \rangle = \sum_k \frac{\omega_k}{a} \sin^2(kx) \quad . \end{aligned} \quad (5.9)$$

Analog bestimmt man den zweiten Summanden in der Rechnung

$$\begin{aligned} \langle 0 | \partial_1 \hat{\phi} \partial_1 \hat{\phi} | 0 \rangle &= \langle 0 | \sum_k \sum_{k'} \partial_1 \phi_k^- \hat{a}_k^- \partial_1 \phi_{k'}^+ \hat{a}_{k'}^+ | 0 \rangle = \langle 0 | \sum_k \sum_{k'} \frac{kk' \cos(kx) \cos(k'x)}{a \sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} (\delta_{kk'} + \hat{a}_{k'}^+ \hat{a}_k^-) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \sum_k \frac{\omega_k^2 - m^2}{a \omega_k} \cos^2(kx) | 0 \rangle = \sum_k \left(\frac{\omega_k}{a} - \frac{m^2}{a \omega_k} \right) \cos^2(kx) \end{aligned} \quad (5.10)$$

sowie den letzten Beitrag zum Erwartungswert der Hamiltondichte für den Grundzustand

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\phi} \hat{\phi} | 0 \rangle &= \langle 0 | \sum_k \sum_{k'} \phi_k^- \hat{a}_k^- \phi_{k'}^+ \hat{a}_{k'}^+ | 0 \rangle = \langle 0 | \sum_k \sum_{k'} \phi_k^- \phi_{k'}^+ (\delta_{kk'} + \hat{a}_{k'}^+ \hat{a}_k^-) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \sum_k \phi_k^- \phi_k^+ | 0 \rangle = \sum_k \frac{1}{a \omega_k} \sin^2(kx) \quad . \end{aligned} \quad (5.11)$$

In der Summe erhält man unter Berücksichtigung der Additionstheoreme $\cos^2(x) + \sin^2(x) = 1$ und $\cos^2(x) - \sin^2(x) = \cos(2x)$ den kompletten Grundzustandserwartungswert der Hamiltondichte:

$$\begin{aligned} \langle 0 | \widehat{\mathcal{H}} | 0 \rangle &= \frac{1}{2} \sum_k \left(\frac{\omega_k}{a} (\sin^2(kx) + \cos^2(kx)) \right) + \frac{1}{2} \sum_k \left(\frac{m^2}{a \omega_k} (\sin^2(kx) - \cos^2(kx)) \right) \\ &= \frac{1}{2a} \sum_k \omega_k - \frac{m^2}{2a} \sum_k \frac{\cos(2kx)}{\omega_k} \quad . \end{aligned} \quad (5.12)$$

Die Energie zwischen den Platten ist durch das bestimmte Integral über das Intervall $[0, a]$ des Grundzustandserwartungswertes gegeben und ergibt unter der Voraussetzung, dass Summierung und Inte-

⁴Dabei gehen wir prinzipiell ohne explizite Prüfung davon aus, dass Ableitungen, Grenzwertprozesse, Summen und Integrale stets vertauschen.

gralbildung vertauschen, mit der Randbedingung für den Impuls $k = \frac{\pi n}{a}$ den folgenden Ausdruck:

$$E_{[0,a]} = \int_0^a dx \langle 0 | \widehat{\mathcal{H}} | 0 \rangle = \frac{1}{2a} \sum_k \int_0^a dx \omega_k - \frac{m^2}{2a} \sum_k \underbrace{\int_0^a dx \frac{\cos(\frac{2\pi n}{a} x)}{\omega_k}}_{=0} = \frac{1}{2} \sum_k \omega_k \quad . \quad (5.13)$$

Der zweite Summand fällt weg, weil das Integral des Kosinus über eine volle Periode stets verschwindet. Das verblüffend einfache Ergebnis ist, dass die Grundzustandsenergie des Vakuums einer Quantenfeldtheorie gerade die Summe über alle Grundzustandsenergien der harmonischen Oszillatoren der beteiligten Impulse in der Fourierzerlegung entspricht. Mit diesem Ausgangswissen hätte man direkt nach der Einführung der Feldoperatoren als Superposition von Normalmoden die Grundzustandsenergie voraussagen können. Wie sieht jedoch die Energie aus, wenn keine Platten vorhanden sind?

5.1.2 Abwesenheit der Platten

In diesem Abschnitt wollen wir die Rechnung für das Klein-Gordon-Feld ohne Randbedingungen wiederholen, was physikalisch der Anordnung entspricht, wenn keine Platten anwesend sind. Wir starten erneut mit der Klein-Gordon-Gleichung und finden die Standardlösungen ohne Randbedingungen, nämlich planare Wellen, auf:

$$\phi_k^\pm(t, x) = B e^{\pm i(\omega t - kx)} \quad \text{für ein } B \in \mathbb{C} \setminus \{0\} \quad . \quad (5.14)$$

Die Dispersionsrelation $-\omega^2 + k^2 + m^2 = 0$ wird erneut durch die Klein-Gordon-Gleichung forciert mit dem Unterschied, dass die Impulse k und Frequenzen $\omega = \omega_k$ dieses mal kontinuierliche Werte annehmen dürfen. In Analogie zum einführenden Kapitel der Diplomarbeit und den Bemerkungen über kontinuierliche Größen müssen die Wellenfunktionen nun mithilfe der Dirac'schen Deltadistribution normiert werden:

$$\langle f, g \rangle := i \int_{\mathbb{R}} dx (f^* \partial_0 g - \partial_0 f^* g) \quad \text{mit} \quad \langle \phi_k^\pm, \phi_{k'}^\pm \rangle = \mp 2\omega_k \delta(k - k') \quad \text{bzw.} \quad \langle \phi_k^\pm, \phi_{k'}^\mp \rangle = 0 \quad . \quad (5.15)$$

Der zusätzliche Faktor $2\omega_k$ ist Konvention und hier ausschließlich deswegen in dieser Form gewählt worden, damit das Integrationsmaß der Fourierzerlegung manifest kovariant ist. Darum wollen wir dieser Besonderheit keine weitere Beachtung schenken. Die Amplitude B bestimmen wir auch hier bis auf eine beliebige Phase aus der ersten Orthogonalitätsrelation:

$$\begin{aligned} \langle \phi_k^\pm, \phi_{k'}^\pm \rangle &= i \int_{\mathbb{R}} dx (\phi_k^{\pm*} \partial_0 \phi_{k'}^\pm - \partial_0 \phi_k^{\pm*} \phi_{k'}^\pm) = i |B|^2 e^{it(\pm\omega_{k'} \mp \omega_k)} (\pm i \omega_{k'} \pm i \omega_k) \int_{\mathbb{R}} dx e^{ix(\pm k \mp k')} \\ &= \mp 2\pi |B|^2 e^{\mp it(\omega_k - \omega_{k'})} (\omega_{k'} + \omega_k) \delta(k - k') = \mp 2\pi |B|^2 (2\omega_k) \delta(k - k') \quad . \end{aligned} \quad (5.16)$$

Die Normierung kann somit reell durch $B := (2\pi)^{-\frac{1}{2}}$ gewählt werden. Die zweite Orthogonalitätsrelation verschwindet analog zur Rechnung mit den Platten und soll hier nicht mehr explizit vorgeführt werden.

Mit dem Auffinden der Positiv- und Negativfrequenzlösungen ist es nun wieder möglich, einen Feldoperator mithilfe der Fourierzerlegung zu definieren

$$\hat{\phi}(t, x) := \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\omega_k} (\phi_k^-(t, x) \hat{a}_k^- + \phi_k^+(t, x) \hat{a}_k^+) \quad \text{mit} \quad [\hat{a}_k^-, \hat{a}_{k'}^+] = 2\omega_k \delta(k - k') \quad , \quad [\hat{a}_k^\pm, \hat{a}_{k'}^\pm] = 0, \quad (5.17)$$

um mit ihm den Erwartungswert der Grundzustandsenergie dichte zu bestimmen. Das gehäufte Auftreten des Faktors $2\omega_k$ ist erneut der Tatsache geschuldet, dass das Integrationsmaß $\frac{dk}{2\omega_k}$ manifest kovariant geschrieben worden ist. Man könnte ihn auch in der Definition der Leiteroperatoren \hat{a}_k^\pm verstecken.

Nun berechnen wir wieder schrittweise die einzelnen Summanden des Erwartungswertes für den Grundzustand:

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \partial_0 \hat{\phi} \partial_0 \hat{\phi} | 0 \rangle &= \langle 0 | \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\omega_k} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk'}{2\omega_{k'}} \partial_0 \phi_k^- \hat{a}_k^- \partial_0 \phi_{k'}^+ \hat{a}_{k'}^+ | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\omega_k} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk'}{2\omega_{k'}} (-i\omega_k) i\omega_{k'} \phi_k^- \phi_{k'}^+ (2\omega_k \delta(k-k') + \hat{a}_{k'}^+ \hat{a}_k^-) | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\omega_k} \frac{\omega_k^2}{2\pi} | 0 \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}} dk \omega_k \quad .
\end{aligned} \tag{5.18}$$

Der zweite Term leistet folgenden Beitrag:

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \partial_1 \hat{\phi} \partial_1 \hat{\phi} | 0 \rangle &= \langle 0 | \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\omega_k} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk'}{2\omega_{k'}} \partial_1 \phi_k^- \hat{a}_k^- \partial_1 \phi_{k'}^+ \hat{a}_{k'}^+ | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\omega_k} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk'}{2\omega_{k'}} ik(-ik') \phi_k^- \phi_{k'}^+ (2\omega_k \delta(k-k') + \hat{a}_{k'}^+ \hat{a}_k^-) | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\omega_k} \frac{k^2}{2\pi} | 0 \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}} dk \left(\omega_k - \frac{m^2}{\omega_k} \right) \quad .
\end{aligned} \tag{5.19}$$

Der letzte Summand ergibt sich zu:

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \hat{\phi} \hat{\phi} | 0 \rangle &= \langle 0 | \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\omega_k} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk'}{2\omega_{k'}} \phi_k^- \hat{a}_k^- \phi_{k'}^+ \hat{a}_{k'}^+ | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\omega_k} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk'}{2\omega_{k'}} \phi_k^- \phi_{k'}^+ (2\omega_k \delta(k-k') + \hat{a}_{k'}^+ \hat{a}_k^-) | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\omega_k} \frac{1}{2\pi} | 0 \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}} dk \frac{1}{\omega_k} \quad .
\end{aligned} \tag{5.20}$$

In der Summe erhält man für den Erwartungswert der Hamiltondichte des Grundzustands das erwartete Ergebnis, nämlich schlichtweg das Integral aller Frequenzen anstatt der Summe:

$$\langle 0 | \widehat{\mathcal{H}} | 0 \rangle = \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}} dk \left(\omega_k + \omega_k - \frac{m^2}{\omega_k} + \frac{m^2}{\omega_k} \right) = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}} dk \omega_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dk \omega_k \quad . \tag{5.21}$$

Die Energie, welche das System auf dem Intervall $[0, a]$ ohne Anwesenheit der Platten für den Grundzustand beansprucht hätte, ist durch das Integral

$$E_{[0,a]} = \int_0^a dx \langle 0 | \widehat{\mathcal{H}} | 0 \rangle = \frac{a}{2\pi} \int_0^{\infty} dk \omega_k \tag{5.22}$$

gegeben. Es ist interessant, dass bis auf die Massenabhängigkeit der Frequenz $\omega_k^2 = k^2 + m^2$, die Masse des Feldes für die Energie in beiden Fällen keine Rolle spielt – stets fallen die Terme mit Massenabhängigkeit aus der Rechnung. Da wir den Casimireffekt für ein spinloses Photon berechnen wollen, werden wir von hier an, die Masse des Klein-Gordon-Feldes auch stets vernachlässigen.

Konzeptionell würde man nun in der Berechnung des Casimireffekts so fortfahren, dass man die Energie zwischen den Platten bestimmt und jenen Wert abzieht, welchen man ohne Platten erwartet

hätte. Man renormiert also die Energieskala auf den Wert, welcher der Minkowskiraum ohne Randbedingungen dem Vakuum zuweist. Mathematisch steht man vor der Schwierigkeit, dass die Größe $E_{[0,a]}$ für den Fall mit und ohne Platten jeweils divergiert, da die Summe aller Frequenzen wegen der Unbeschränktheit der Werte in ω keinen endlichen Wert annehmen kann. Man sucht darum nach einem Verfahren, welches solchen divergenten Ausdrücken endliche Werte zuweisen kann, um einen Vergleich beider Energien anstellen zu können.

5.1.3 Regularisierung des masselosen Falls

Bei der Behandlung des harmonischen Oszillators im Rahmen der nichtrelativistischen Quantenmechanik ist die Bemerkung gefallen, dass die nichtverschwindende Energie des Grundzustands $\frac{1}{2}\hbar\omega$ in Feldtheorien divergente Terme verursacht, die sogenannten *UV-Divergenzen*. In unserem Fall beschreibt die Vakuumenergie gerade die Summe respektive das Integral aller Grundzustandsenergien eines harmonischen Oszillators über alle erlaubten Energien. Der Vergleich der Fälle mit respektive ohne Platten gestaltet sich aus jenem Grund schwer, weil Differenzen von Unendlichkeiten nicht wohldefiniert sind.

Eine Rechnung im Rahmen der Normalordnung, d. h. dass die Aufsteigeoperatoren stets links von den Absteigeoperatoren arrangiert werden, ist in unserer Situation nicht nur unangebracht, weil wir eine Aussage über die Energie des Vakuums treffen wollen, sie ist sogar fundamental falsch, weil sie in beiden Fällen dem Grundzustand die Energie 0 zuweist. Wir möchten diesem Vorgehen, das Sinnbild entgegenstellen, dass man versuchen würde, die Höhe zweier Gebäude zu vergleichen, während man durch „Normalordnung“ ihre Höhe zugleich auf Normalnull setzt. Man käme zur Ansicht, dass beide Gebäude gleich hoch sind. Wir wollen hingegen die Energieskala des plattenlosen, kontinuierlichen Falles so fixieren, dass ihr Grundzustand verschwindende Energie besitzt. In Analogie zu unserem Sinnbild setzt man die Höhe eines Gebäudes auf Normalnull und misst von dort aus die Höhe des anderen.

Mathematisch wird man solchen divergenten Ausdrücken in der Regel Herr, indem man einen regulierenden Parameter δ einführt, so dass der regularisierte Ausdruck an der Stelle $\delta = 0$ wieder den divergenten Term ergibt und für jedes $\delta > 0$ einen sinnvollen, endlichen Wert produziert. Nun fährt man fort, indem man den regularisierten Ausdruck entweder numerisch für sehr kleines δ löst oder eine analytische Berechnung anstrebt und den Parameter δ später an einer Stelle eliminiert, wo die Grenzwertbildung $\delta \rightarrow 0$ unproblematisch erscheint. Die uns interessierenden, divergenten Terme sind durch die Energie $E_{[0,a]}$ zwischen den und ohne die Platten gegeben:

$$E_{[0,a]}^{\text{mit}} = \frac{1}{2} \sum_{k \geq 0} \omega_k \quad \text{respektive} \quad E_{[0,a]}^{\text{ohne}} = \frac{a}{2\pi} \int_0^{\infty} dk \omega_k \quad . \quad (5.23)$$

Die Energie zwischen den Platten ist für den masselosen Fall aufgrund der Masseschalenbedingung durch $\omega_k = \frac{\pi n}{a}$ gegeben, so dass dieser Term in einer natürlichen Weise wieder eine Abhängigkeit vom Abstand a aufweist. Im freien Fall ohne die Platten gilt die Identität $\omega_k = k$.⁵ In beiden Fällen ist es möglich, durch die Substitution $\omega_k \mapsto \Omega_{k,\delta} := \omega_k e^{-\delta\omega_k}$ eine Form der Regularisierung zu finden, die für $\delta = 0$ den alten Ausdruck reproduziert und für $\delta > 0$ endliche Summen und Integrale verursacht. Diese Vorgehensweise wird *UV-Cutoff* genannt und wichtet die Frequenzen mit einer Dämpfungsfunktion, so dass kleine Frequenzen mehr beitragen als große. Trotz der Tatsache, dass man dieses Verfahren sehr einfach physikalisch motivieren kann, indem man in das Feld führt, dass reale Materialien gewissen Beschränkungen unterliegen oder die Energie im System endlich ist und somit ein Abschneiden der Frequenzen vollkommen legitim ist, möchte ich darauf hinweisen, dass die explizite Form der regularisierenden Funktion unter gewissen Voraussetzungen keine Auswirkungen auf das Endergebnis hat. In dem Sinne werden wir die Rechnung mit einem expliziten Vertreter aus der Klasse der geeigneten Funktionen vornehmen und später ein paar Worte über die allgemeine Situation verlieren.

Startet man mit dem diskreten Fall, so führt die Substitution der Frequenzen auf den folgenden Aus-

⁵Das Betragszeichen ist nicht nötig, weil wir in beiden Fällen stets nur über positive Impulse k summieren bzw. integrieren

druck:

$$E_{[0,a]}^{\text{mit},\delta} = \frac{1}{2} \sum_{k \geq 0} \Omega_{k,\delta} = \frac{1}{2} \sum_{k \geq 0} \omega_k \exp(-\delta \omega_k) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\pi n}{a} \exp\left(-\delta \frac{\pi n}{a}\right) . \quad (5.24)$$

Unter der Voraussetzung, dass Summe und Differential vertauschen, ist es möglich mithilfe der geometrischen Reihe, die Summe explizit auszuwerten:

$$E_{[0,a]}^{\text{mit},\delta} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \delta} \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\delta \frac{\pi n}{a}\right) = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \delta} \frac{1}{1 - \exp\left(-\delta \frac{\pi}{a}\right)} = \frac{\pi}{2a} \frac{\exp\left(-\delta \frac{\pi}{a}\right)}{\left(1 - \exp\left(-\delta \frac{\pi}{a}\right)\right)^2} . \quad (5.25)$$

Dieser Term hat noch immer für $\delta = 0$ keine sinnvolle Interpretation, so dass wir ihn für kleine Dämpfungen δ mithilfe der Entwicklung

$$\frac{\exp(x)}{\left(1 - \exp(x)\right)^2} = \frac{1}{x^2} - \frac{1}{12} + \frac{x^2}{240} - \frac{x^4}{6048} + \mathcal{O}(x^6) \quad (5.26)$$

ausdrücken wollen. Man erhält abschließend für die Energie die Abschätzung:

$$E_{[0,a]}^{\text{mit},\delta} = \frac{\pi}{2a} \left(\frac{a^2}{\delta^2 \pi^2} - \frac{1}{12} + \frac{\delta^2 \pi^2}{240a^2} - \frac{\delta^4 \pi^4}{6048a^4} \right) + \mathcal{O}(\delta^6) . \quad (5.27)$$

Man bemerke, dass für $\delta \rightarrow 0$ alle Terme ab der zweiten Ordnung im Dämpfungsparameter δ verschwinden und nur der führende Term das divergente Verhalten repräsentiert. Würde man nun ohne Korrespondenz zum kontinuierlichen Fall ohne Platten der divergenten Summe einen Wert zuweisen wollen, so wäre die Konstante $-\frac{\pi}{24a}$ eine gute Wahl. Vorher wollen wir jedoch die selbe Regularisierung für das Integral durchführen, bevor wir voreilig Schlüsse ziehen. Auch hier wird unter exzessiven Vertauschen von Integral, Differential und Grenzwertprozessen das Ergebnis durch eine kurze Rechnung gewonnen:

$$E_{[0,a]}^{\text{ohne},\delta} = \frac{a}{2\pi} \int_0^{\infty} dk k \exp(-\delta k) = -\frac{a}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \delta} \int_0^{\infty} dk \exp(-\delta k) = -\frac{a}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \delta} \frac{1}{\delta} = \frac{a}{2\pi \delta^2} . \quad (5.28)$$

Tatsächlich fallen also der divergente Term aus der Reihenentwicklung und der Beitrag aus dem kontinuierlichen Fall zusammen, d. h. es ist legitim den Beitrag $\frac{a}{2\pi \delta^2}$ als Grundzustandsenergie des unbeschränkten Minkowskiraums M_2 im Intervall $[0, a]$ anzusehen. Konsequenterweise legt man nun fest, dass die Energien im diskreten Fall zwischen den Platten von nun an stets in Bezug auf diese Grundzustandsenergie des unbeschränkten M_2 gemessen werden sollen. Man führt dementsprechend die Renormierung bezüglich der Vorschrift

$$E_{\text{ren}} := \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(E_{[0,a]}^{\text{mit},\delta} - E_{[0,a]}^{\text{ohne},\delta} \right) = -\frac{\pi}{24a} \quad (5.29)$$

durch. In Anlehnung an die anschauliche Bemerkung am Anfang des Kapitels ist das Vakuum zwischen den Platten tatsächlich dünner als ohne Anwesenheit der Platten, denn immerhin ist die renormierte Grundzustandsenergie *negativ*. Die Casimirkraft für ein spinloses Photon in einer Raumdimension ist folglich als negativer Gradient der renormierten Energie gegeben und beträgt in natürlichen Einheiten:

$$F(a) = -d E_{\text{ren}}(a) = -\frac{\pi}{24a^2} da . \quad (5.30)$$

Der negative Koeffizient des Basisvektors da sorgt dafür, dass die Platten sich anziehen und das Kraftgesetz proportional zum inversen Quadrat des Abstands ist – ein Grund für die kurze effektive Reichweite

des Effekts. Ferner bemerke man, dass zu jedem Zeitpunkt eine lineare Veränderung der Grundzustandsenergie des harmonischen Oszillators sich proportional auf die Kraft durchschlägt, d. h. der Casimireffekt ermöglicht einen direkten Zugang zum Grundzustand des nichtrelativistischen, harmonischen Oszillators.

Nun mag man einwenden, dass der explizite Wert der Kraft vom Regularisierungsverfahren und insbesondere von der Wahl der Dämpfungsfunktion abhängig ist. Dieser Frage kann mit einer allgemeineren Konstruktion mithilfe der *Abel-Plana-Formel* [36] für eine Funktion $F(\xi)$

$$\sum_{\xi=0}^{\infty} F(\xi) - \int_0^{\infty} d\xi F(\xi) = \frac{1}{2}F(0) + i \int_0^{\infty} dt \frac{F(it) - F(-it)}{e^{2\pi t} - 1} \quad (5.31)$$

begegnet werden: In unserem Fall ist $F(k) = \omega_k$ gerade die Dispersionsrelation, welche Energien mit Impulsen verknüpft. Zerlegt man die regularisierte Frequenz $\Omega_{k,\delta}$ in das Produkt der originären Frequenz ω_k und einer Dämpfungsfunktion $\Lambda_{\omega,\delta}$ mit den Voraussetzungen, dass Λ als Funktion der Frequenz und des Dämpfungsparameters δ eine monoton fallende Funktion ist, sowie die folgenden offensichtlichen Anforderungen

$$\Lambda_{\omega,\delta} \leq 1 \quad \text{für alle } \delta \geq 0 \quad \text{und} \quad \Lambda_{\omega,0} = 1 \quad \text{respektive} \quad \lim_{\delta \rightarrow \infty} \Lambda_{\omega,\delta} = 0 \quad (5.32)$$

erfüllt, dann ist die Methode des *UV-Cutoff* unter der Voraussetzung der Vertauschbarkeit von Grenzwertprozessen und Integralbildung bzw. Summierung *unabhängig* vom expliziten Profil der Dämpfungsfunktion, denn

$$\begin{aligned} \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\sum_{k \geq 0} \omega_k \Lambda_{\omega,\delta} - \int_0^{\infty} dk \omega_k \Lambda_{\omega,\delta} \right) &= \frac{1}{2} \lim_{\delta \rightarrow 0} \omega_0 \Lambda_{0,\delta} + i \int_0^{\infty} dt \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\omega_{it} \Lambda_{it,\delta} - \omega_{-it} \Lambda_{-it,\delta}}{e^{2\pi t} - 1} \\ &= \frac{1}{2} \omega_0 + i \int_0^{\infty} dt \frac{\omega_{it} - \omega_{-it}}{e^{2\pi t} - 1} . \end{aligned} \quad (5.33)$$

Mehr noch impliziert die Rechnung, dass man den Casimireffekt direkt mit der Abel-Plana-Formel unter Vernachlässigung einer Dämpfungsfunktion berechnen kann. Es existieren noch weitere Regularisierungsverfahren wie die Regularisierung mithilfe der ζ -Funktion bzw. die *dimensionale Regularisierung*, welche unter anderen in einer Publikation von Martin Reuter und Walter Dittrich [37] diskutiert werden. Zusammenfassend wollen wir festhalten, dass der genaue Wert des Casimireffekts nicht von einer der genannten Regularisierungsverfahren abhängt.

Mathematisch passiert hier etwas sehr einfaches: Wir tun es Carl Friedrich Gauß gleich, indem wir die Summe aller natürlichen Zahlen bestimmen wollen und zuletzt das Integral aller positiven reellen Zahlen abziehen – wir legen folglich ein Maß für die Mächtigkeit der natürlichen bzw. der reellen Zahlen fest und versuchen beide Klassen der Unendlichkeit miteinander in Beziehung zu setzen. Eng mit dieser Thematik ist die populäre *Euler-Mascheroni-Konstante*

$$\gamma := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} - \int_1^{\infty} dx \frac{1}{x} \approx 0,5772 \quad (5.34)$$

verwandt, welche noch heute Gegenstand vieler ungelöster Probleme in der Mathematik ist. Auch hier versucht man die Differenz zweier Unendlichkeiten zu erfassen.

5.2 Der Casimireffekt im Hinblick auf die neue Quantisierung

Abschließend wollen wir kurz motivieren, wie die alternative Quantisierung mithilfe der eigentlichen orthochronen Lorentzgruppe $SO(1,2)$ sich auf den Casimireffekt auswirkt. In diesem Abschnitt folgen

wir der Publikation von Hans Kastrup [38] über den harmonischen Oszillator. Die Gleichungen in (5.23) im vorangegangenen Abschnitt suggerieren, dass die Grundzustandsenergie einer Feldtheorie sich als Summe bzw. Integral der Grundzustandsenergien eines harmonischen Oszillators über das Impulsspektrum schreiben lässt. Anschaulich kann man sich das so vorstellen, dass ein Feld sich als Überlagerung ungekoppelter harmonischer Oszillatoren synthetisieren lässt. Die Fourierzerlegung der Felder wie z. B. in den Gleichungen (5.8) und (5.17) verdeutlichen diesen Sachverhalt.

Aufgrund dieser Beobachtung wollen wir ein kontinuierliches Feld mit unendlich vielen Freiheitsgraden als Limes einer Vielteilchentheorie für die Teilchenzahl $N \rightarrow \infty$ annähern. Für unsere Zwecke gehen wir von einem diskreten Impulsspektrum aus und indizieren die Impulse mit natürlichen Zahlen $i \in \mathbb{N}_0$ inklusive der 0. Der Raum der Zustände \mathcal{H} ist infolgedessen der Tensorproduktraum von Einteilchenhilberträumen \mathcal{H}_1 :

$$\mathcal{H} := \bigotimes_{i=0}^{\infty} \mathcal{H}_1 = \underbrace{\mathcal{H}_1}_{\text{zu } p_0} \otimes \underbrace{\mathcal{H}_1}_{\text{zu } p_1} \otimes \underbrace{\mathcal{H}_1}_{\text{zu } p_2} \otimes \cdots \otimes \underbrace{\mathcal{H}_1}_{\text{zu } p_{\infty}} \quad . \quad (5.35)$$

Ein Element aus dem Vielteilchenhilbertraum ist dementsprechend durch das Tensorprodukt von Einteilchenzuständen gegeben:

$$\mathcal{H} \ni \underbrace{|n_0, k\rangle}_{\text{zu } p_0} \otimes \underbrace{|n_1, k\rangle}_{\text{zu } p_1} \otimes \underbrace{|n_2, k\rangle}_{\text{zu } p_2} \otimes \cdots \otimes \underbrace{|n_{\infty}, k\rangle}_{\text{zu } p_{\infty}} \quad . \quad (5.36)$$

Wir gehen der Einfachheit davon aus, dass alle Einteilchenzustände zu der *gleichen* Darstellung der positiven, diskreten Serie gehören, d. h. der Parameter k ist konstant. Der Hamiltonoperator \hat{H} auf dem Vielteilchenhilbertraum \mathcal{H} wird analog zu einer Vielteilchentheorie mithilfe des Einteilchenhamiltonoperators $\hat{H}_i^1 := \omega_{p_i} \hat{K}_0$ konstruiert:⁶

$$\hat{H} := (\hat{H}_0^1 \otimes \hat{1} \otimes \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{1}) + (\hat{1} \otimes \hat{H}_1^1 \otimes \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{1}) + \cdots + (\hat{1} \otimes \hat{1} \otimes \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{H}_{\infty}^1) \quad . \quad (5.37)$$

Die Gesamtenergie des Grundzustands dieser Vielteilchentheorie ergibt sich infolgedessen zu:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \langle 0, k | \otimes \cdots \otimes \langle 0, k | \hat{H} | 0, k \rangle \otimes \cdots \otimes | 0, k \rangle \\ &= \langle 0, k | \hat{H}_0^1 | 0, k \rangle \cdot \langle 0, k | \hat{1} | 0, k \rangle \cdots + \langle 0, k | \hat{1} | 0, k \rangle \cdot \langle 0, k | \hat{H}_1^1 | 0, k \rangle \cdots + \dots \\ &= \langle 0, k | \omega_{p_0} (0 + k) | 0, k \rangle \cdot \langle 0, k | \hat{1} | 0, k \rangle \cdots + \langle 0, k | \hat{1} | 0, k \rangle \cdot \langle 0, k | \omega_{p_1} (0 + k) | 0, k \rangle \cdots + \dots \\ &= k \sum_{p_i \geq 0} \omega_{p_i} \quad . \end{aligned} \quad (5.38)$$

Analog erhält man für ein kontinuierliches Impulsspektrum das Integral aller Frequenzen. Das Resultat erinnert sehr stark an das mithilfe des Klein-Gordon-Feldes berechnete Ergebnis:

$$E_{[0,a]}^{\text{mit}} = k \sum_{p \geq 0} \omega_p \quad \text{respektive} \quad E_{[0,a]}^{\text{ohne}} = k \frac{a}{\pi} \int_0^{\infty} dp \omega_p \quad . \quad (5.39)$$

Die Regularisierung und Renormierung erfolgt analog zum konventionellen Fall $k = \frac{1}{2}$ und damit ist die Casimirkraft direkt proportional zu der Konstante k . Die Messung der Casimirkraft ermöglicht demnach einen direkten Zugriff auf den Grundzustand eines harmonischen Oszillators und kann somit zur Falsifikation der alternativen Quantisierung für den Fall $k \neq \frac{1}{2}$ benutzt werden.

Dieser Weg vermittelt eine Intuition, wie der Casimireffekt zu berechnen ist, liefert aber leider keinen Ansatz im Rahmen einer Quantenfeldtheorie. Die Hamiltondichte der zugehörigen Theorie sowie die Normalmodenzerlegung der auftretenden Felder sind leider unbekannt. Darum bietet es sich an, genau diesen Punkt in der Zukunft genauer zu untersuchen und Gegenstand weiterer Forschung zu machen.

⁶In Anlehnung an die Rechnung im vorangegangenen Abschnitt wurde $\hbar = 1$ gewählt.

5.3 Eine abschließende Diskussion

An dieser Stelle wollen wir zum Ende kommen und das gewonnene Wissen kurz reflektieren. Im Verlauf der Diplomarbeit ist klar geworden, dass die nichtrelativistische Quantenmechanik noch viele Geheimnisse verbirgt. Die konventionelle Beschreibung mithilfe der Operatoren \hat{q} , \hat{p} und $\hat{\mathbb{1}}$ lässt sich in der Regel nur auf flache Phasenräume wie den \mathbb{R}^n anwenden. Der harmonische Oszillator in seiner Winkel- und Wirkungsvariablendarstellung demonstriert eindrucksvoll, dass allein eine Umrechnung auf Polarkoordinaten aufgrund der Periodizität des Winkels Schwierigkeiten bereiten kann. Wir haben auch gesehen, dass der Winkel als unstetige Observable eine Formulierung einer Quantenmechanik mithilfe der Operatoren $\hat{\varphi}$, \hat{I} und $\hat{\mathbb{1}}$ unmöglich macht. Ferner sind wir zur Überzeugung gekommen, dass es *keine* Quantisierungsabbildung gibt, welche *alle* klassischen Observablen, dargestellt durch glatte Funktionen auf dem Phasenraum, auf selbstadjungierte Operatoren abbilden kann. Etwas leger ausgedrückt bedeutet das, dass die Konstruktion einer nichtrelativistischen Quantenmechanik nicht durch das schlichte Verteilen von Dächern über den Observablen geschehen kann. Es existiert eine Vielzahl von Quantisierungsvorschriften [22], welche dieser Problematik Tribut zollen und Auswege aufzeigen.

Im Rahmen dieser Diplomarbeit haben wir uns für das Quantisierungsprogramm mit der kanonischen Gruppe entschieden, welches die Anzahl der quantisierbaren Observablen einschränkt und im Gegenzug die Korrespondenz zwischen Poissonklammern und dem Kommutator als Lieklammern der zugehörigen Liealgebren erhält. Infolgedessen wird der Standpunkt vertreten, dass der Erhalt geometrischer Strukturen durch Liealgebrahomomorphismen in den Mittelpunkt gestellt wird. Die fundamentalen Observablen und ihre Vertauschungsrelationen werden in diesem Formalismus aus den Eigenschaften des Phasenraums durch hamiltonsche Gruppenwirkungen gewonnen und beachten somit die geometrischen Beschaffenheiten des zugrundeliegenden Raums. Mit diesem Formalismus ist es uns gelungen, die konventionelle Quantenmechanik auf dem Konfigurationsraum $\mathcal{Q} = \mathbb{R}^n$ zu reproduzieren und den unstetigen Winkel als fundamentale Observable auf dem Einheitskreis auszuschließen. Im Rahmen des harmonischen Oszillators in Winkel- und Wirkungsvariablendarstellung ist eine konsistente Beschreibung mithilfe der Funktionen

$$k_0 = I \quad \text{und} \quad k_1 = I \cos \varphi \quad \text{respektive} \quad k_2 = -I \sin \varphi \quad (5.40)$$

möglich. Diese drei Observablen beschreiben eine Basis der fundamentalen Observablen und erfüllen bezüglich der Poissonklammern die Vertauschungsrelationen der eigentlichen orthochronen Lorentzgruppe $SO^\uparrow(1, 2)$. Die Konstruktion von selbstadjungierten Operatoren der zugehörigen Quantenmechanik mithilfe der Darstellungstheorie von $SO^\uparrow(1, 2)$ oder eine ihrer Überlagerungsgruppen eröffnet eine fast unüberschaubare Anzahl von nichtäquivalenten Modellen. Wir haben für den Spezialfall $k = \frac{1}{2}$ die Leiteroperatoren und den Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators konstruieren können, welche die gleichen algebraischen Eigenschaften und das selbe Spektrum wie der konventionelle Fall aufweisen. Demnach ist das Quantisierungsprogramm nach Christopher Isham im Einklang mit der etablierten Beschreibung mithilfe der Operatoren \hat{q} , \hat{p} und $\hat{\mathbb{1}}$. Ferner liefert es für $k \neq \frac{1}{2}$ eine größere Klasse von quantisierbaren Systemen, welche wir im Rahmen dieser Diplomarbeit leider nicht weiter beleuchten konnten.

Weiter ist der Grundzustand des harmonischen Oszillators noch immer Gegenstand kritischer Auseinandersetzung. Die nichtverschwindende Grundzustandsenergie kann im Fall des nichtrelativistischen Einteilchenmodells als endliche Energie des Vakuums interpretiert werden. Es gibt verschiedene Auffassungen, wie der explizite Wert $\frac{1}{2}\hbar\omega$ gewertet werden soll. In der konventionellen Rechnung entsteht der Vorfaktor $\frac{1}{2}$ schlichtweg aus dem Vorfaktor der kinetischen Energie. In der Quantisierung mithilfe der kanonischen Gruppe auf dem Phasenraum $S^1 \times \mathbb{R}^+$ fixiert die Wahl $k = \frac{1}{2}$ die Darstellungstheorie auf die Überlagerungsgruppe $SU(1, 1)$ der Lorentzgruppe $SO^\uparrow(1, 2)$. In dem Rahmen nimmt der Vorfaktor $k = \frac{1}{2}$ die Rolle des Parameters ein, welcher die Darstellung festlegt. Infolgedessen hat er den gleichen Charakter inne wie die Halbzahligkeit des Spins bei der Beschreibung von Darstellungen der eigentlichen unitären Gruppe $SU(2)$ als Überlagerungsgruppe der eigentlichen orthogonalen Gruppe $SO(3)$.

Im Anschluss dieser Erkenntnis eröffnet sich die Frage, wie sich die Existenz eines nichttrivialen Oszillators auf Naturphänomene auswirkt. Da sich das neue Modell hauptsächlich im Grundzustand und seines Energieerwartungswertes vom konventionellen Fall unterscheidet, haben wir eine Anwendung auf den Casimireffekt motiviert. Ziel weiterer Forschung könnte z. B. eine Formulierung des Quantisierungsprogramms mit der kanonischen Gruppe auf Stufe einer Feldtheorie sein, welches die Berechnung des Casimireffekts im Rahmen einer Quantenfeldtheorie ermöglicht. Auch das florierende Gebiet der Quantenoptik, wo man in der Regel Zustände mit Amplitude und Phase beschreibt, ermöglicht eine Vielzahl von Anwendungsmöglichkeiten. Diese Abwandlung des Oszillators kann somit über den Nutzen als theoretisches Modell hinaus, seine Daseinsberechtigung in der Zukunft unter Beweis stellen.

Abschließend wollen wir konstatieren, dass die nichtrelativistische Quantenmechanik mitnichten als abgeschlossenes Gebiet betrachten werden kann und trotz ihres stattlichen Alters noch eine Vielzahl neuer Phänomene und Strukturen aufzeigt. In dem Sinne sollte bei der Behandlung der nichtrelativistischen Quantenmechanik mehr Zeit auf das Verständnis dieses fundamentalen Bausteins physikalischer Theorien verwendet werden.

Literaturverzeichnis

- [1] Pauli, W.: Z. Physik 36, 336. (1926)
- [2] Broglie, L. de: The wave nature of the electron Nobel Lecture, 12. (1929)
- [3] Schrödinger, E.: Annalen der Physik, Vol. 384, No. 4 , 361-376. (1926)
- [4] Scheck, F.: Theoretische Physik 4 - Quantisierte Felder, Springer. (2007)
- [5] Amsler, C., et al. (Particle Data Group): PL B667, 1. (2008)
- [6] Yang, C. N., Mills, R.: Conservation of Isotopic Spin and Isotopic Gauge Invariance, Phys. Rev. 96, 191. (1954)
- [7] Higgs, P.W.: Phys. Rev. Lett. 13, 508. (1964)
- [8] Isham, C.J.: Relativity, Groups and Topology II (Les Houches Session XL). (1983)
- [9] Planck, M.: Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspektrum, Verhandlungen der Deutschen physikalischen Gesellschaft 2 Nr, 17, 245, Berlin. (1900)
- [10] Rayleigh, L.: Remarks upon the Law of Complete Radiation, Phil. Mag. 49, 539-540. (1900)
- [11] Jeans, J.H.: On the partition of energy between matter and Aether, Phil. Mag. 10, 91-98. (1905)
- [12] Einstein, A.: Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. In: Annalen der Physik, 322, Nr. 6, 132-148. (1905)
- [13] Scheck, F.: Theoretische Physik 2 - Nichtrelativistische Quantentheorie, Springer. (2005)
- [14] Bohr, N.: On the Constitution of Atoms and Molecules, Part I, Phil. Mag. 26, S. 1-25. (1913)
- [15] Tegmark, M.: The Interpretation of Quantum Mechanics: Many Worlds or Many Words?, Fortschr. Phys. 46. (1998)
- [16] Born, M.: Zur Quantenmechanik der Stoßvorgänge, Z. Physik 37, Nr. 12. (1926)
- [17] Robertson, H.P.: The Uncertainty Principle, Physical Review, 34, Nr. 1. (1929)
- [18] Keller, K.J.: Über die Rolle der Projektiven Geometrie in der Quantenmechanik, Mainz. (2006)
- [19] Keller, K.J., Papadopoulos, N.A., Reyes-Lega, A.F.: On the realization of symmetries in quantum mechanics, Mathematische Semesterberichte, Springer. (2008)
- [20] Gieres, F.: Mathematical surprises and Dirac's formalism in quantum mechanics, arXiv:quant-ph/9907069v2. (2001)
- [21] Reed, M., Simon, B.: Methods of Modern Mathematical Physics: Functional Analysis I, Revised and enlarged edition, Academic Press. (1980)
- [22] Ali, S.T., Engliš, M.: Quantization Methodes: A Guide for Physicists and Analysts, Rev. Math. Phys., 17. (2005)

- [23] Rosenberg, J.: A selective history of the Stone-von Neumann Theorem, Contemporary Mathematics. (2004)
- [24] Waldmann, S.: Poisson-Geometrie und Deformationsquantisierung, Springer. (2007)
- [25] Lee, J.M.: Introduction to Smooth Manifolds, Springer. (2002)
- [26] Jänich, K.: Vektoranalysis, Springer. (2005)
- [27] Fulton F., Harris J.: Representation Theory: A First Course, Graduate Texts in Mathematics, Springer. (1991)
- [28] Hilton, P.J., Stammach, U.: A Course in Homological Algebra, Graduate Texts in Mathematics, Springer. (1997)
- [29] Keller, J.B.: Semiclassical mechanics, SIAM Rev. 27. (1985)
- [30] Bojowald, M., Kastrup, H.A., Schramm, F., Strobl, T.: Group Theoretical Quantization of a Phase Space $\mathcal{S}^1 \times \mathbb{R}^+$ and the Mass Spectrum of Schwarzschild Black Holes in D Space-Time Dimensions, arXiv:gr-qc/9906105v3. (2000)
- [31] Kastrup, H.A.: Quantization of the Optical Phase Space $\mathcal{S}^2 = \{\varphi \bmod 2\pi, I > 0\}$ in Terms of the Group $SO^\uparrow(1, 2)$, arXiv:quant-ph/0307069. (2006)
- [32] Debnath, L., Mikusiński, P: Introduction to Hilbert Spaces with Applications, Academic Press. (1998)
- [33] Casimir, H.B.G.: On the attraction between two perfectly conducting plates, Proc. Kon. Nederland. Akad. Wetensch. B51. (1948)
- [34] Lifshitz, E.M.: J. Exp. Theor. Phys. 2, 73. (1956)
- [35] Lamoreaux, S.K.: Casimir forces: Still surprising after 60 years, Physics Today, February. (2007)
- [36] Sharian, A.A.: Generalized Abel-Plana formula as a renormalization tool in quantum field theory with boundaries. arXiv:hep-th/0609093. (2006)
- [37] Reuter, M., Dittrich, W.: Regularisation schemes for the Casimir effect. Eur. J. Phys. 6. (1985)
- [38] Kastrup, H.A.: A new look at the quantum mechanics of the harmonic oscillator, Ann. Phys. 16, No. 7–8. (2007)

Danksagung

AN dieser Stelle möchte ich mich bei allen Menschen bedanken, welche mir tatkräftig beim Erstellen dieser Diplomarbeit behilflich waren. Als erstes gilt mein Dank meinem betreuenden Professor Nikolaos Papadopoulos, welcher mir die Freude zur Geometrie näher brachte und mir stets während der Diplomarbeit zur Seite stand. Weiter möchte ich mich bei Florian Jung bedanken, der mir mit Geduld das Quantisierungsverfahren mit der kanonischen Gruppe erläuterte und mich, wann immer möglich, mit dem nötigen Wissen ausstattete, wenn es um die Darstellung von Texten und Graphiken ging. Meine Familie stand während des ganzen Studiums zu jeder Zeit hinter mir und unterstützte mich, wo immer es nur ging. Darum möchte ich mich auch bei Euch bedanken. Weiterer Dank gilt Hubert Spiesberger und Rainer Häußling, welche stets ein offenes Ohr hatten und unschätzbaren Rat zu geben vermochten. Ich möchte mich auch bei meinen Bürokollegen und Freunden bedanken, die insbesondere während der Diplomarbeit Rücksicht auf mich nahmen und mir eine Zeit voller Freude und Spaß neben der Arbeit bereiteten. Abschließend möchte ich meinen Physiklehrer aus der Oberstufe, Frank Dittmer, erwähnen, der mir das Geheimnis verriet, dass Physik vornehmlich aus der Integration von Bewegungsgleichungen besteht und mir damit eine Systematik aufzeigte, welche mich anschließend veranlasste, ein Studium der Physik aufzunehmen.

Ich bitte alle jene Menschen um Entschuldigung, die ich an dieser Stelle vergessen habe und mit Recht einen Platz in dieser Aufzählung verdient hätten.