$SU(n)$ Symmetrie des quantenmechanischen harmonischen Oszillators

Thomas Stör*

15. Juni 2010

Zusammenfassung

Aus der klassischen Mechanik ist die Methode zur Identifizierung von Symmetrien sowie der Berechnung der zugehörigen erhaltenen Ladungen gemäß dem Noether-Theorem bekannt. Insbs. die $SO(n)$ Symmetrien, d.h. die Rotationssymmetrie der n-dimensionalen Raumes spielt dabei eine zentrale Rolle.

Im folgenden soll an einem konkreten Beispiel gezeigt werden, dass es eine erweiterte Klasse von sogenannten dynamischen Symmetrien geben kann, die sich nicht aus dem Noether-Theorem ableiten lassen. Der bekannteste Fall ist der des $1/r$ Potentials in 3 Raumdimensionen; hier soll jedoch aufgrund der eleganteren Darstellunsgmöglichkeiten und der Verallgemeinerbarkeit das r^2 Potential, d.h. der sogenannte quantenmechanische harmonische Oszillator in n Dimensionen betrachtet werden. Dabei wird sich zeigen, dass eine sogenannte $SU(n)$ Symmetrie vorliegt, d.h. die Rotationssymmetrie des n-dimensionalen komplexen Raumes, die die $SO(n)$ Symmetrie als Untergruppe enthält.

1 Einführung

Im folgenden wird die Summenkonvention verwendet, d.h. über mehfach auftretende Indizes wird immer (ohne explizite Angabe eines Summenzeichens) summiert.

Der quantenmechanische harmonische Oszillator ist definiert durch kanonische Orte und Impulse q_i, p_k sowie den Hamiltonoperator H

$$[q_i, p_k] = -(-i\partial_k)q_i = i\delta_{ik} \tag{1.1}$$

$$H = \frac{1}{2}p_k^2 + \frac{1}{2}q_k^2 \tag{1.2}$$

Man führt die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gemäß

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_i + ip_i) \tag{1.3}$$

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}i}(q_i - ip_i) \tag{1.4}$$

mit

$$[a_i, a_k^\dagger] = \delta_{ik} \tag{1.5}$$

ein.

Mittels dieser Operatoren lässt sich der Hamiltonoperator umschreiben zu

$$H = a_k^\dagger a_k + \frac{n}{2} = N + \frac{n}{2} \tag{1.6}$$

$$N = a_k^\dagger a_k \tag{1.7}$$

Der $n/2$-Term ergibt sich dabei aus den Vertauschungsrelationen für n Operatoren beim Umsortieren aller Vernichtunsoperatoren nach rechts, d.h. er spiegelt die Dimensionalität des Raumes wieder.

*e-mail: tom.stoer@gmx.net

Die Eigenzustände des Hamiltonoperators bzw. die Wirkung der Operatoren sind definiert gemäß

$$a_i|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \sqrt{n_i}|n_1, n_2, \ldots, n_i - 1, \ldots\rangle \tag{1.8}$$

$$a_i^\dagger|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \sqrt{n_i + 1}|n_1, n_2, \ldots, n_i + 1, \ldots\rangle \tag{1.9}$$

mit

$$N|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \sum_i n_i|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle \tag{1.10}$$

2 Die $SU(n)$ Gruppe

Die $SU(n)$ Gruppe wird erzeugt durch $n^2 - 1$ sogenannte Generatoren $T^a = (T^a)_{ik}$ mit $a = 1 \ldots n^2 - 1$. Wir betrachten hier die sogenannte Fundamentaldarstellung, d.h. die $(T^a)_{ik}$ sind hermitesche $n \times n$ Matrizen mit $i, k = 1 \ldots n$, die auf n-dimensionalen komplexen Vektoren operieren. a ist dabei die Dimension der Gruppe, d.h. die Anzahl der unabhängig voneinander vorgebbarer Rotationsparameter $\dim SU(n) = n^2 - 1$. Interessant dabei ist, dass man offensichtlich in n komplexen Dimensionen eine wesentlich größere Freiheit bzgl. der Rotationen hat. Die Tatsache, dass die reellen Rotationen in drei Dimensionen durch ebenfalls drei Drehwinkel parametrisiert werden, ist eine Ausnahme.

Die Matrizen erfüllen dabei verschiedene algebraische Beziehungen, wovon wir insbs.die folgende benötigen

$$[T^a, T^b] = if^{abc}T^c \tag{2.11}$$

Diese ist eigentlich als Matrixgleichung; ausgeschrieben lautet diese mit Indizes i, k sowie dem Index l, über den summiert wird

$$(T^a)_{il}(T^b)_{lk} - (T^b)_{il}(T^a)_{lk} = if^{abc}(T^c)_{ik} \tag{2.12}$$

Die darin auftretenden Konstanten f^{abc} definieren die $SU(n)$ eindeutig. Insbs. erhält man mittels

$$^{\mathrm{adj}}(T^a)_{bc} = f^{abc} \tag{2.13}$$

eine weitere, die sogenannte adjungierte Darstellung. Hierbei ist die Dimension der Matrizen, d.h. $b, c = 1 \ldots n^2 - 1$ gleich der Dimension der Gruppe selbst. Im Spezialfall $n = 3$ handelt es sich um die Paulimatrizen $T^a = \sigma^a/2$ sowie um den vollständig antisymmetrischen Einheitstensor $f^{abc} = \epsilon^{abc}$.

3 Die quantenmechanische Darstellung der $SU(n)$ Gruppe

Man definiert ausgehend von den Generatoren T^a die quantenmechanischen Operatoren Q^a gemäß

$$Q^a = a_i^\dagger(T^a)_{ik}a_k \tag{3.14}$$

Ausgehend von den Vertauschungsrelationen für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sowie den algebraischen Vertauschungsrelationen der Generatoren der $SU(n)$ lässt sich zeigen, dass

$$[Q^a, Q^b] = if^{abc}Q^c \tag{3.15}$$

gilt. D.h. die algebraische Struktur der Generatoren T^a kann eins-zu-eins auf quantenmechanische Operatoren Q^a übertragen werden, die als Generatoren der $SU(n)$ angesehen werden können.

4 Anmerkungen zur $SU(n)$ in der Quantenemchanik

Zunächst ist festzustellen, dass die Rotationssymmetrie $SO(n)$ in n Dimensionen für $n = 3, 4, 5, \ldots$ die Dimension $\dim SO(n) = n(n-1)/2 = 3, 6, 10, \ldots$ hat. Demgegenüber ist die Dimension $\dim SU(n) = n^2-1 = (n+1)(n-1) = 8, 15, 24, \ldots$ deutlich größer. Die $SO(n)$ ist dabei immer in der $SU(n)$ als Untergruppe enthalten.

Um zu zeigen, dass in einem quantenmechansichen System eine Symmetrie vorliegt, sind zweierlei Dinge zu tun: Zum einen muss der gesamte Hilbertraum in irreduzible Darstellungen dieser Symmetriegruppe zerlegt werden. Dies ist von der Drehgruppe bekannt; die Darstellungen sind dabei durch die Drehimpulsquantenzahlen $l(l+1)$ sowie die Darstellungsvektoren $|l, m\rangle$ mit $m = -l, \ldots, +l$ definiert. Die Dimension einer Darstellung beträgt dabei $2l+1$ gemäß der erlaubten m-Werte je l-Wert, d.h. je Darstellung l. Im Falle des harmonischen Oszillators sind dazu die o.g. Eigenvektoren geeignet zu gruppieren.

$SO(3)$ sowie $SU(2)$ haben den Rang 1, d.h. es gibt eine zusätzliche Quantenzahl m, die die Eigenvektoren zu festem l numeriert. Dies entspricht einem zusätzlichen Operator, der gleichzeitig mit dem Drehimpulsoperator L^2 diagonalisierbar ist. Man wählt dafür üblicherweise L_z. Übertragen auf die o.g. Notation entspricht L^2 dem Matrixprodukt T^aT^a, wobei hier i.A. $d \times d$ Matrizen vorliegen, sowie der Matrix T^3. d ist dabei abhängig von der gewählten Darstellung. Wir haben bereits die Fundamentaldarstellung mit $d = n$ sowie die adjungierte Darstellung mit $d = n^2 - 1$ kennengelernt. Für $SU(n)$ ist der Rang der Gruppe

$$\mathrm{rank} SU(n) = n - 1 \tag{4.16}$$

d.h. es gibt insgs. $n-1$ gleichzeitig mit T^aT^a diagonalisierbare Generatoren ${}^{\mathrm{diag}}T^a$. Aufgrund der wachsenden Komplexität der Darstellungen wollen wir diese Klassifizierung nicht weiter betrachten.

Es sei noch angemerkt, dass die quantenmechanischen Generatoren sozusagen alle Darstellungen auf einmal umfassen, da sie eben auf dem gesamten (unendlich-dimensionalen) Hilbertraum operieren, der in genau diese Darstellungen zerfällt, während die algebraischen Generatoren je Darstellung neu ermittelt werden müssen, so z.B. im Falle der $SU(2)$ zu ${}^{\mathrm{fund}}(T^a)_{ik} = (\sigma^a/2)_{ik}$, ${}^{\mathrm{adj}}(T^a)_{bc} = \epsilon^{abc}$ usf. In diesem Spezialfall erhält man die $d = 2$-Darstellung mit $l = 1/2$, die $d = 3$-Darstellung für $l = 1$ usf.

5 Die $SU(n)$ Symmetrie des harmonischen Oszillators

Zum anderen muss neben der Klassifizierung des zugrundeliegenden Hilbertraumes der Hamiltonoperator des jeweiligen Systems auch die zu diskutierende Symmetrie aufweisen. Andernfalls hat man zwar die Symmetrie auf einem Hilbertraum implementiert, allerdings liegt keine Symmetrie des jeweiligen Systems vor. So könnte man die Symmetrie durch Einführung von Zusatztermen in H brechen, wobei die Darstellungen auf dem Hilbertraum jedoch weiterhin gültig bleiben.

Dabei sind folgende Aussagen im wesentlichen äquivalent:

Eine quantenmechanische Observable Q^a vertauscht mit dem Hamiltonoperator H, d.h. die Observable ist eine Erhaltungsgröße

$$\frac{dQ^a}{dt} = i[H, Q^a] = 0 \tag{5.17}$$

Ein quantenmechanischer Operator Q^a generiert eine Symmetrietransformation $U[\theta]$ (mit Transformationsparametern θ^a) des Hamiltonoperators

$$U[\theta] = e^{i\theta^a Q^a} \tag{5.18}$$

$$U[\theta]\, H\, U^\dagger[\theta] = H \tag{5.19}$$

Man zeigt die Äquivalenz über die sogenannte Baker-Campbell-Haussdorff-Formel, d.h. man entwickelt die e-Funktion in $U[\theta]$ in eine Potenzreihe und berechnet die auftretenden Kommutatoren. Wenn der Kommutator $[H, Q^a]$ verschwindet, vertauscht offensichtlich der unitäre Operator $U[\theta]$ mit H.

Da diese Rechnung etwas komplexer ist, sei hier ein kurzer Hinweis auf die Verwendung der Formel erlaubt. Es ist

$$U[\theta] = e^{i\theta^a Q^a} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(i\theta^a Q^a)^\nu}{\nu!} \tag{5.20}$$

Man schreibt diese Summe formal für $U[\theta]$ und $U^\dagger[\theta]$ aus und fasst paarweise zusammen. Die Kommutatoren berechnet man durch iterierte Anwendung der Identität

$$[Q^a Q^b, H] = Q^a[Q^b, H] + [Q^a, H]Q^b \tag{5.21}$$

Formal erhält man

$$U[\theta]\, H\, U^\dagger[\theta] = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \Big[(i\theta^{(a_0)}Q^{(a_0)}), \Big[(i\theta^{(a_1)}Q^{(a_1)}), \ldots, \Big[(i\theta^{(a_\nu)}Q^{(a_\nu)}), H\Big] \ldots\Big]\Big]_{\nu \text{ mal}} \tag{5.22}$$

Diese Formel gilt exakt. Im vorliegenden Fall bricht die unendliche Summe der Kommutatoren jedoch bereits nach dem Term (a_0) ab, da bereits der erste Kommutator $[Q^a, H]$ verschwindet.

Zum Nachweis dieser Symmetrie des Hamiltonoperators

$$H = N + \frac{n}{2} \tag{5.23}$$

$$N = a_k^\dagger a_k \tag{5.24}$$

sei zunächst darauf hingewiesen, dass der zweite Term als c-Zahl trivialerweise mit den Operatoren Q^a vertauscht. D.h. nicht-triviale Terme können ausschließlich vom Operator N stammen.

Führen wir nun noch die n-dimensionale Einheitsmatrix T^0 gemäß $(T^0)_{ik} = \delta_{ik}$ ein, so bemerkt man zunächst, dass der Operator N selbst ebenfalls als Generator

$$N = Q^0 = a_i^\dagger (T^a)_{ik} a_k \tag{5.25}$$

geschrieben werden kann. Damit erhalten wir aus der Gesamtheit der Generatoren $\{Q^0, Q^a\}$ die Symmetriegruppe $U(n) = U(1) \otimes SU(n)$.

Es verbleibt nun noch zu zeigen, dass H die entsprechende Symmetrie aufweist; dazu weist man unmittelbar nach, dass

$$[N, Q^a] = [Q^0, Q^a] = 0 \tag{5.26}$$

gilt.

Zur Berechnung derartiger Kommutatoren geht man i.A. wie folgt vor (im folgenden sei $a = 0, 1, \ldots, n^2 - 1$)

$$[Q^a, Q^b] = [a_i^\dagger (T^a)_{ik} a_k, a_l^\dagger (T^b)_{lm} a_m] = a_i^\dagger (T^a)_{ik} [a_k, a_l^\dagger] (T^b)_{lm} a_m + \ldots \tag{5.27}$$

Nur Kommutatoren mit jeweils einem Erzeuger und einem Vernichter tragen bei; zwei Erzeuger oder zwei Vernichter ergeben Null. Die beiden Kommutatoren selbst lassen sich elementar berechnen und man erhält

$$[Q^a, Q^b] = a_i^\dagger (T^a)_{ik} \delta_{kl} (T^b)_{lm} a_m + \ldots = a_i^\dagger (T^a_{ik} T^b_{km} - T^b_{ik} T^a_{km}) a_m \tag{5.28}$$

Dies lässt sich zusammenfassen zu

$$[Q^a, Q^b] = a_i^\dagger [T^a, T^b]_{im} a_m = a_i^\dagger i f^{abc} (T^c)_{im} a_m = i f^{abc} a_i^\dagger (T^c)_{im} a_m = i f^{abc} Q^c \tag{5.29}$$

Im Falle der o.g. Erweiterung auf $a = 0, 1, \ldots, n^2 - 1$ gilt speziell für $a = 0$ immer $if^{0bc} = 0$.

Damit sind sowohl die Vertauschungsrelationen der Operatoren Q^a untereinander als auch die von Q^a mit N bekannt.

6 Zusammenfassung

Ausgehend von algebraischen Generatoren T^a der $SU(n)$ in n Dimensionen lassen sich entsprechende quantenmechanische Generatoren Q^a konstruieren. Man zeigt, dass diese Generatoren wiederum Symmetrieoperationen des Hamiltonoperators des harmonischen Oszillators, also $n^2 - 1$ erhaltenen Ladungen, entsprechen. Damit ist nachgewiesen, dass der quantenmechanische harmonische Oszillator eine $SU(n)$ Symmetrie aufweist. Gemäß dieser lässt sich der Hilbertraum in Darstellungen (Multipletts) zerlegen, wobei von den $n^2 - 1$ erhaltenen Ladungen $n - 1$ gemeinsam mit dem Hamiltonoperator diagonalisierbar sind.

Anmerkung: Andere Symmetriegruppen mit n-dimensionaler Fundamentaldarstellung sind natürlich ebenfalls möglich.

Wichtig: diese Symmetrie wurde nicht aus dem Noether-Theorem abgeleitet! Dies ist auch nicht direkt möglich, da es sich um eine dynamische Symmetrie handelt, die Orte und Impulse mischt, während das Noether-Theorem für reine Ortsraum-Symmetrien abgeleitet wurde. Die Mischung ergibt sich direkt aus der Verwendung der Erzeuger und Vernichter, d.h. aus Linearkombinationen von Orten und Impulsen. Im Lagrangeformalismus entspräche dies einer verallgemeinerten Drehung mit Mischung von Orten und Geschwindigkeiten.