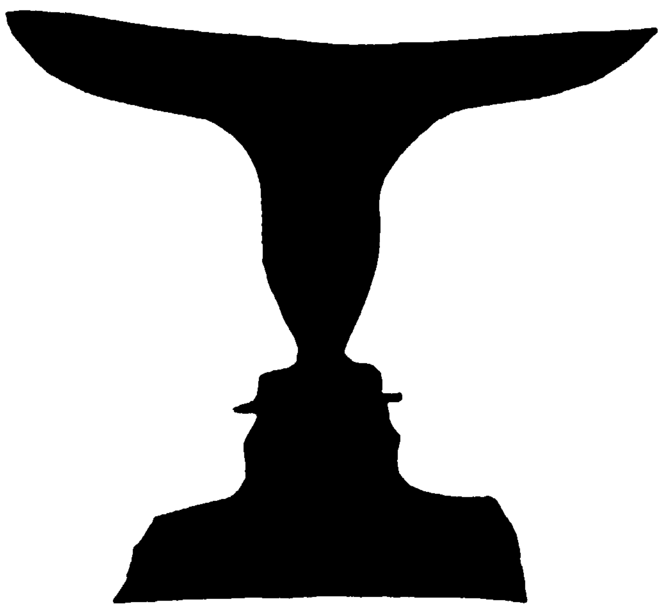
TEKST NR 360 1999

SYMMETRI I FYSIK



En Meta-projektrapport af:
Frederik Resen Steenstrup, Martin Niss
Bo Jakobsen & Tune Bjarke Bonné

Vejleder: Peder Voetmann Christiansen

TEKSTER fra

IMFUFA **ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER**
INSTITUT FOR STUDIET AF MATEMATIK OG FYSIK SAMT DERES FUNKTIONER I UNDERVISNING, FORSKNING OG ANVENDELSER

IMFUFA, Roskilde Universitetscenter, Postbox 260, 4000 Roskilde

Symmetri i fysik

En fysik Meta-projektrapport af:
Frederik Resen Steenstrup, Martin Niss, Bo Jakobsen & Tune Bjarke Bonné

Vejleder: Peder Voetmann Christiansen

IMFUFA tekst nr. 360/99, RUC. 102 sider. ISSN 0106-6242

ABSTRACT

Dette projekt omhandler brugen af symmetribetragtninger i fysik. Det har været vores mål at redegøre for baggrunden for, symmetribetragtningers vigtige rolle i fysik.

Dette har vi forsøgt at gøre ved to forskellige metoder.

Vi har for det første inddraget, hvad der er blevet skrevet om den videnskabelige metode af C.S. Peirce, og hvad der er blevet sagt om symmetri i fysik af E.P. Wigner. Derudover har vi foretaget to interviews, med B. Lautrup og E. Præstgaard, som begge er teoretikere. Det sidste har vi gjort, for at få en beskrivelse af symmetribetragtningers betydning for moderne fysik.

Dernæst har vi se på brugen af symmetribetragtninger i fire specifikke eksempler. Disse fire eksempler er klassisk mekanik (Lagrange-formalismen), kvantemekanik (bevarelse af impulsmomentet), molekylespektroskopi og brudt symmetri. Disse eksempler skal illustrere, hvordan man rent praktisk benytter symmetri i fysik.

Der bliver på baggrund heraf diskuteret forskellige aspekter af fysikeres adfærd og af fysikkens natur.

Konklusionen på projektet er, at fysikere har det med at generalisere fænomenbeskrivelsen, og symmetribetragtninger er én, blandt flere generaliseringsmetoder. Symmetri kan også bruges til at afgøre, om en størrelse er bevaret, hvilket bruges meget indenfor fysikken.

Vi konkluderer, at årsagen til symmetribetragtningers centrale placering i fysikken både findes i fysikkens arbejdsmetode og i fysikkens genstandsområde.

Forside:
Billedet er en illustration af Rubins vase. Scannet og inverteret fra original hentet i Rubin (1915).

Forord

Denne tekst er skrevet på baggrund af et fysikprojekt udarbejdet i efteråret 1998. Projektet gik ind under meta-modulbindingen, som ifølge "Studieordning af 1. september 1996 for fysik" lyder:

> META-projektet: ("Om fysik") - Projektet skal eksemplarisk behandle en problemstilling inden for teknologiteori, videnskabsteori eller erkendelsesteori, som angår faget fysik. Dette kan gøres i et historisk perspektiv eller på anden måde analytisk.

Efter evalueringen af projektforløbet blev vi enige om, at de tanker og diskussioner som er sammenfattet i rapporten med fordel kunne blive spredt til et større publikum.

Undervejs er der nogle personer som har hjulpet os, og som fortjener at blive takket, fordi de to sig tid til at tale med os:

Johnny Ottesen (IMFUFA, RUC)

Benny Lautrup (NBI, KU)

Eigil Præstgaard (Inst.I, RUC)

Indhold

Forord i

1 Indledning 1

1.1 Motivation 1
1.2 Eksempler på symmetri fra andre fag 1
1.2.1 Eksempel fra matematikken 1
1.2.2 Eksempler fra biologien 2
1.2.3 Eksempel fra kemien 2
1.2.4 Eksempel fra geologien 2
1.2.5 Hvad er særligt for fysik? 2
1.3 Problemformulering 3
1.4 Metode 3
1.5 Målgruppe 4
1.6 Læservejledning 5

2 Generel teori 7

2.1 Symmetridefinition 7
2.1.1 Forskellige forfatteres definition af symmetri 7
2.1.2 Vores definition 8
2.1.3 Gruppeteori 10
2.1.4 Symmetrioperationer 10
2.2 Klassifikation af symmetribetragtninger 11
2.2.1 Symmetriiagttagelser 11
2.2.2 Symmetriantagelser 12
2.2.3 Symmetripostulater 12
2.2.4 Oversigt over symmetribetragtninger i fysikken 13
2.3 Symmetri og bevarede størrelser 15

3 Udvalgte naturvidenskabsmænd om symmetri **19**
3.1 Charles Sanders Peirce 19
3.2 Eugene P. Wigner 22
3.2.1 Klassisk invarians & dynamisk invarians 22
3.2.2 Symmetris historiske rolle 23
3.2.3 Om grundlaget for fysik som videnskab 24
3.2.4 Symmetris status 25
3.3 Benny Lautrup 28
3.3.1 Symmetri, fysik og naturen 28
3.3.2 Symmetris anvendelser 29
3.3.3 Egen brug af symmetri 29
3.3.4 Lautrups filosofiske ståsted 29
3.4 Eigil Præstgaard 30
3.4.1 Anvendelser af symmetri 30
3.4.2 Symmetris status 30
3.4.3 Opdaget eller opfundet? 31

4 Cases **33**
4.1 Symmetri og bevarede størrelser i klassisk mekanik 33
4.1.1 Generaliserede koordinater 33
4.1.2 Lagranges ligning 35
4.1.3 Konstanter og symmetri 36
4.1.4 Eksempler 37
4.1.5 Opsamling 38
4.2 Rotationel symmetri i kvantemekanikken 40
4.2.1 Introduktion til kvantemekanikken 40
4.2.2 Impulsmomentet 40
4.2.3 Hamiltonoperatoren 41
4.2.4 Operatoren for rotation om z-aksen 41
4.2.5 H og L_z kommuterer 42
4.2.6 Impulsmomentet er bevaret, fordi $[H, S_z] = 0$ 43
4.2.7 Opsamling og anvendelser 44

4.3 Molekylespektroskopi 45
4.3.1 Ethylen 45
4.3.2 Normalvibrationer 45
4.3.3 Molekylets symmetri bestemmer normalvibrationernes symmetri 46
4.3.4 Udvalgsregler 52
4.3.5 Hvilke C-H strækninger for ethylen vil være IR-aktive? . . 53
4.3.6 Opsamling 53
4.4 Symmetribrud 54
4.4.1 Symmetribrud set historisk 56
4.4.2 Faseovergange 56

5 Case-analyse **59**
5.1 Symmetribetragtninger som er fælles for de fire cases 59
5.2 Symmetri og bevarede størrelser i klassisk mekanik 59
5.2.1 Hvilke typer symmetribetragtninger benytter casen sig af? 60
5.2.2 Hvilken rolle spiller symmetribetragtningerne i denne case? 60
5.3 Rotationel symmetri i kvantemekanikken 60
5.3.1 Hvilke typer symmetribetragtninger benytter casen sig af? 60
5.3.2 Hvilken rolle spiller symmetribetragtningerne i denne case? 61
5.4 Molekylespektroskopi 61
5.4.1 Hvilke typer symmetribetragtninger benytter casen sig af? 61
5.4.2 Hvilken rolle spiller symmetribetragtningerne i denne case? 62
5.5 Symmetribrud 62
5.5.1 Hvilke typer symmetribetragtninger benytter casen sig af? 62
5.5.2 Hvilken rolle spiller symmetribetragtningerne i denne case? 63

6 Diskussion **65**
6.1 Diskussion på baggrund af cases 65
6.1.1 Forbehold i diskussionen 67
6.2 Bredere diskussion 68
6.2.1 Beskrivelse af fysikernes adfærd 68
6.2.2 Fysikkens måder at opnå erkendelse og fysikkens verdenssyn 72
6.2.3 Fysikkens ontologi 73
6.2.4 Forskelle mellem fysik og andre naturvidenskaber 74

7 Konklusion **77**

7.1 Kan vi sige noget nyt om fysikeres adfærd? 77

7.2 Kan symmetribetragtningernes vigtighed have årsag i genstandsområdet? 77

8 Perspektivering **79**

8.1 Hvad har vi lært? 79

8.2 Hvad kunne man undersøge videre 79

Litteratur **81**

A Gruppeteori **83**

A.1 Gruppeteori 83

A.1.1 Grundlaget 83

A.1.2 Regneregler 84

A.1.3 Matrix-repræsentation 84

Kapitel 1

Indledning

1.1 Motivation

I fysikundervisningen, hører man tit et argument der hedder; "...af symmetrigrunde ses det...". Dette virker som om, det er et meget slående argument, men det bliver sjældent uddybet. Dette er grunden til, at vi fandt sammen for at finde ud af, hvad disse *symmetrigrunde* egentlig dækker over.

Men det man studser mest over med symmetribetragtninger er, at det ikke kun er i én gren af fysikken de bliver brugt. De bliver brugt i de fleste grene af fysikken, og må derfor være noget *gennemgående* ved fysikken. Det viser sig, at de ikke kun bliver brugt i fysikken, men også indenfor flere andre videnskaber, f.eks. kemi, matematik, biologi etc. Dette vil der komme mere om straks.

Symmetribetragtninger er således ikke noget, der alene benyttes i fysik. Men det er vores klare opfattelse af det bliver brugt langt mere, og på mere vidtgående måder i fysik, end i andre fag. Vi vil derfor gerne undersøge, hvilken rolle symmetri spiller i fysikken, og hvorfor symmetribetragtninger er så vigtige i netop fysik.

For at sætte brugen af symmetri i perspektiv vil vi starte med at vende blikket bort fra fysikken, og finde nogle eksempler på brug af symmetri i andre fag.

1.2 Eksempler på symmetri fra andre fag

1.2.1 Eksempel fra matematikken

Et eksempel på en symmetribetragtning i matematikken kunne være bestemmelse af middelværdien for en normalfordeling. Kurven for en normalfordeling er symmetrisk omkring det punkt hvor fordelingen har maksimum. Dette punkt er derfor lig med middelværdien for fordelingen.

1.2.2 Eksempler fra biologien

Et eksempel på symmetribetragtninger i biologien, kunne være tvillinger. Tvillinger er "opstået" ved, at ægget i et tidligt stadium har delt sig (énæggede tvillinger). Dette betyder, at de har samme gen-masse, selvom de ikke er eksakt ens. Man oplever herved, at tvillinger er meget ens, så man kan antage at tvillinger er symmetriske overfor "miljø-ombytning". Dette udnytter man i tvillingeundersøgelser, typisk i forbindelse med undersøgelser af arv og miljø.

Et andet eksempel, er iagttagelsen af en radial-symmetrien af visse dyr (f.eks. gopler) og spejlsymmetrien af mange andre dyr. Disse symmetrier kan måske sige noget om den måde, som dyret udvikler sig på.

1.2.3 Eksempel fra kemien

Et eksempel fra kemien, kunne være spektroskopi. Man undersøger et systems (f.eks. et stofs) karakteristika og undersøger hvilken indflydelse variation af systemet har på dets karakteristika. Eksempelvis kunne en kemiker undersøge absorptionsspektra af forskellige salte hvis fællestræk er, at de er jern(III)-komplekser. Det kunne f.eks. være a) Na_3 $FeCl_6$, b) K_3 $FeCl_6$, c) K_3 $Fe(CN)_6$, d) Na_3 $Fe(CN)_6$ Hvis en kemiker finder, at absorptionsspektrummet for (a) og (b) er ens ligesom absorptionsspektrummet for (c) og (d) er ens, samt at stofgrupperne (a,b) og (c,d) har forskellige absorptionsspektra, så kan man slutte at det må være dem, der er 6 af (CN^-- vs. Cl^--gruppen), der gør forskellen. Dette er en anvendelse af, hvad vi betegner som symmetribetragtninger.

1.2.4 Eksempel fra geologien

Inden for geologien benytter man en meget grundlæggende symmetribetragtning. Man antager at måden som bjerge dannes på er symmetrisk med hensyn til tidstranslation, dvs. at bjerge dannes på sammen måde i dag som i fortiden (*Aschehougs Konversasjons Leksikon*, 1974).

1.2.5 Hvad er særligt for fysik?

Efter at have kikket lidt ud i *verden* er det nu på tide at se på fysikken, og diskutere hvad der er særligt ved fysikkens brug af symmetri.

For at svare på dette spørgsmål, vil vi først diskutere svaret på det omvendte spørgsmål: hvad er ikke nødvendigvis særligt for fysik? Måske var det Storm P, der fortalte historien om en mand, der på sin vej hjem en aften så en anden mand gå og lede efter noget på gaden. Han spørger den ledende: "Hvad leder De efter?" Og han svarer: "Jeg har tabt min Tegnebog." "Jeg vil gerne hjælpe. Hvorhenne tabte De den?" "Et Stykke herfra skulle jeg mene," er den ledendes svar, hvortil manden spørger: "Hvorfor leder De så her?" "Det er fordi her er bedre Lys." Meningen med denne lille historie er at illustrere at videnskabeligt arbejde kan være begrænset til at løse de problemer, der kan løses. At gøre antagelser i almindelighed og symmetriantagelser i særdeleshed er med andre ord ikke noget særligt for fysik.

Måske har vor måde at opfatte forsøgsresultater på en indbygget fejl, som det kan være svært at kompensere for. Hvis vi f.eks. ser noget der med god tilnærmelse er en cirkel, så kalder vi det for en cirkel, og ikke for en stykvis lineær parameterfremstilling sammensat af 117 forskellige funktionsudtryk. Måske søger vi den enkle (evt. enkleste) forklaring uanset om vi arbejder med den ene eller den anden type problemer. Ej heller denne anvendelse af symmetribetragtninger i forenklingsøjemed er særlig for fysik.

Alle som har beskæftiget sig med fysik på universitetsniveau har oplevet, at man bruger symmetribetragtninger på en helt afgørende måde i fysik. Dette er i modsætning til den undervisning man modtager på gymansielt niveau. En foreløbig iagttagelse er derfor, at symmetri spiller en vigtig rolle når man skal dybere ned i stoffet, og have en forståelse af grundlaget. Samtidig skal man ikke tale med ret mange *professionelle* fysikere, før man får den opfattelse at symmetri er helt afgørende for fysikken som fag, og for nogle grene af fysikken i særdeleshed.

Vi kan foreløbigt konkludere, at symmetribetragtninger anvendes som værktøjer i de eksakte videnskaber. Det der er særligt for fysik er omfanget af anvendelsen.

Dette leder så frem til følgende problemformulering.

1.3 Problemformulering

> Hvorfor er symmetribetragtninger så vigtige for fysikken?
>
> - Er det en egenskab ved fysikere eller det, de studerer?

Vi mener, at dette kræver en nærmere præcisering. Når vi siger, at symmetribetragtninger er *vigtige*, mener vi omfanget og bredden af brugen, samt den gennemslagskraft de har. Svaret på underspørgsmålet, om det er en egenskab ved fysikere eller genstandsområdet, behøver ikke være "enten eller". Vi vil gerne lægge op til, at det kan være et "både og". Det behøver derfor ikke være entydigt, hvad det er en egenskab ved.

1.4 Metode

For at belyse symmetris status vil vi først finde en præcis definition af symmetri. Vi vil både komme med vores egen definition og nogle som er fundet i litteraturen.

Herefter vil vi foretage en teoretisk gennemgang af symmetris overordnede betydning for fysik. Dette vil vi gøre både ud fra egne opfattelser og ud fra dele af litteraturen. Vi vil derudover referere nogle interviews vi har foretaget for at få et bredere billede af brugen af symmetri.

Derefter vil vi beskrive fire cases, som skal illustrerer brugen af symmetri. De fire cases vil omhandle:

1. Klassisk mekanik og bevarede størrelser.
2. Molekyle-spektroskopi.
3. Bevarelse af impulsmomentet i kvantemekanik.
4. Brudt symmetri.

Gennem vores arbejde er symmetri dukket op i flere og flere dele af fysikken og på mange forskellige måder. Vi er derfor ikke i stand til at dække alle former for symmetribetragtninger. Det vigtigste for os er at få afdækket de grundlæggende strukturer ved brugen af symmetri, og at få belyst disse gennem nogle cases. Vi har valgt en del stof fra. Fravalget er både gjort på baggrund af teoretiske overvejelser, men vi har også måtte sande at vi ikke er i stand til at sætte os ind i alle de forskellige dele af fysikken som bruger symmetri, og derfor bærer vores udvalg præg af hvilke dele af fysikken som var fagligt overkommeligt. Dette ser vi dog ikke som noget stort problem i forhold til det overordnede plot, fordi det er vores indtryk at disse dele er eksemplariske for et stort område af fysikken.

1.5 Målgruppe

Oprindeligt var rapporten henvendt til medstuderende på RUCs fysikoverbygning. Det generelle teoriafsnit kræver ikke særlige forudsætninger, pånær visse dele, der forudsætter en vis matematisk indsigt. Man vil sagtens kunne få udbytte af det overordnede plot, selv om man ikke forstår alle teknikaliteterne.

Casene er en mere tekniske, og man vil få det største udbytte af dem, hvis man har en vis fysisk indsigt. Der vil blive trukket på grundlæggende viden inden for kvantemekanik og klassisk mekanik. Men generelt vil man forhåbentlig kunne have udbytte af dem, selv om man måske ikke forstår alle teoretiske aspekter.

Samlet kan man sige, at denne rapport burde kunne læses af alle, som har arbejdet lidt med fysik på universitetsplan, og at de gennemgående pointer bør kunne forstås af fysikere med mange forskellige baggrunde.

1.6 Læservejledning

Vi vil her give en kort oversigt over rapportens opbygning og de enkelte afsnits indhold.

Generel Teori indeholder forskellige teoretiske overvejelser omkring symmetri i fysik, herunder en symmetridefinition. Symmetribegrebet bliver diskuteret, og vi opdeler symmetribetragtningerne i tre typer. Kapitlet sluttes af med en introduktion til Noethers sætning, der knytter et bånd imellem kontinuerte symmetrier og bevarede størrelser.

Udvalgte naturvidenskabsmænd om symmetri refererer dels fra C.S. Peirces diskussion af den videnskabelige metode, dels fra E.P. Wigners generelle påstande om symmetri i fysik. Desuden er der refereret fra interviews med B. Lautrup og E. Præstgaard.

Cases indeholder de fire eksempler på brug af symmetri i fysik.

- Sammenhængen mellem symmetri og bevarelseslove inden for klassisk mekanik, her i Lagranges formalisme.
- Sammenhængen mellem rotationel symmetri og impulsmomentbevarelse inden for kvantemekanik.
- Brug af symmetri i molekyle-spektroskopi.
- Beskrivelse af faseovergange ved hjælp af brudt symmetri.

Case-analyse ser på, hvilke typer symmetribetragtninger de forskellige cases benytter sig af, samt hvordan de bliver brugt.

Diskussion og konklusion. Teksten afsluttes med en diskussion af symmetris rolle i fysik og en konklusion med reference til problemformuleringen.

Perspektivering indeholder bl.a. et afsnit om, hvad vi har lært i løbet af projektarbejdet.

Til sidst nogle generelle oplysninger. Gennem hele rapporten er alle citater oversat af os selv. Dertil kommer, at vi ikke har benyttet en typografisk fremhævelse af vektorer og operatorer.

Kapitel 2

Generel teori

2.1 Symmetridefinition

Symmetri associerer de fleste nok med geometrisk symmetri, i form af et vist mål af regularitet i opbygning af en genstand. Eksempelvis er de fleste dyr spejlingssymmetriske, hvormed menes at deres venstre halvdels spejlbillede (tilnærmelsesvist) ligner deres højre halvdel til forveksling. Fysikkens opfattelse af symmetri tager udgangspunkt i dette vante begreb, men generaliserer det til at gælde tilfælde, som ikke er geometriske, som f.eks. skift af den kvantemekaniske fase.

2.1.1 Forskellige forfatteres definition af symmetri

Før vi giver vores egen definition af symmetri, skal vi se på, hvordan et lille udvalg af andre forfattere definerer symmetri. Efter en mere generel diskussion af symmetri præciserer H.C. Ohanian i en generel fysiklærebog, at en genstands symmetri er enhver geometrisk operation, der efterlader genstanden uændret (Ohanian, 1989, side I-1). Denne geometriske operation kan f.eks. være en spejling. Ohanians symmetridefinition afspejler noget typisk for fysikeres symmetridefinitioner. For det første at man taler om operationer som udføres på objektet, for det andet at objekterne skal være uforandret under disse operationer, hvilket betegnes invarians. I en lærebog i fysisk kemi kommer P.W.Atkins med en definition, der ikke alene angår *geometriske* symmetrier, idet han beskriver en symmetrioperation som en vilkårlig operation, der efterlader objektet uforandret (Atkins, 1994, side 512).

Det er karakteristisk for disse definitioner af symmetri, at de kan formuleres i dagligsproget uden brug af matematik. Af denne grund er de en anelse upræcise, fordi det ikke er oplagt, hvad man nærmere skal forstå ved at genstanden er uforandret ved en symmetrioperation. Andre mere præcise definitioner kræver, at det symmetriske fænomen eller objekt skal være beskrevet i matematik.

Dette gør dem samtidig mere tekniske og mindre umiddelbart forståelige, men den moderne fysiks symmetribegreb omfatter genstande og fænomener, som i forvejen ikke er umiddelbart forståelige, så skaden er måske ikke så stor.

Forfatteren H.Callen er i en termodynamikbog (Callen, 1985, side 459) inden på en noget mere teknisk definition af symmetri end Ohanian og Atkins. Han opfatter en symmetrioperation for et system som et skift af de variable for de ligninger, som beskriver systemet. Systemet er symmetrisk med hensyn til denne symmetrioperation, hvis ligningernes form er uændret. Problemet med Callens definition er, at det ikke er klart hvad man mere præcist skal forstå ved at ligningernes form er uændret.

Man kan skelne mellem to typer symmetrioperationer, nemlig dem der opererer på objektet og dem, der opererer på observatøren af objektets synspunkt (Arfken & Weber, 1995). Formuleret i matematik ville det svare til en skelnen imellem at rotere en vektor i et givent koordinatsystem eller foretage et koordinatskift på vektoren. De transformationsformler der skal bruges til den ene og den anden type symmetrioperation, adskiller sig blot ved et fortegn, og man kan hævde, at eksempelvis en ternings *fysik* ændres på samme måde om vi går (90^0) rundt om den, eller roterer den 90^0.

2.1.2 Vores definition

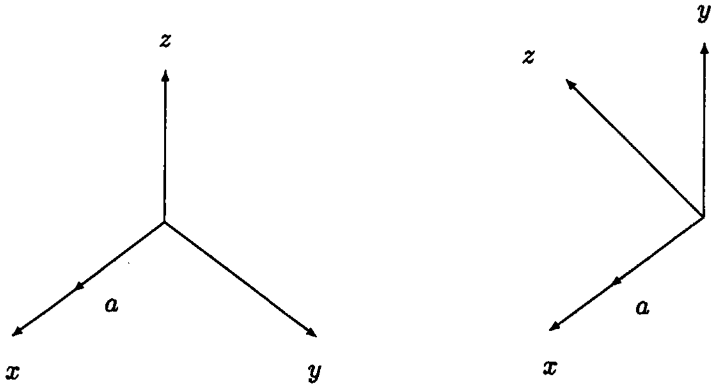
Selvom det pædagogisk set er lettest at forholde sig til objekter, som man kan rotere og se, at de ligner sig selv før og efter (f.eks. kugler eller krystaller), så er det undtagelsen snarere end reglen, at vi har mulighed for at operere på genstandene — langt oftere har observatøren kun mulighed for at gå rundt om genstanden, og betragte den fra forskellige synspunkter. Derfor mener vi, at følgende definition af et objekts symmetri er funktionel:

Hvis et objekts (O) symbolske fremstilling (S) er invariant under et skift i observatørens synspunkt, beskrevet ved en operation (R) siges objektet (O) at være symmetrisk med hensyn til operationen R.

Det er vigtigt at skelne mellem det fysiske objekt i sig selv, hvordan det fremtræder for os og vores repræsentation af det. Den sidste skelnen begrundes i det forhold, at de to *ikke er* det samme, omend de af og til forveksles. En anden grund til at inddrage disse semiotiske betegnelser er, at fysikken ikke er i stand til at skelne mellem de to beskrivelser af samme symmetrioperation, som Arfken ovenfor blev refereret for. Når vi skriver, at et system har en given symmetri, mener vi i virkeligheden at de talskemaer, der beskriver systemet er invariante under operationen, der svarer til den omtalte symmetri.

Eksempel

Vi ser på en vektor a (se figur 2.1), der er den symbolske fremstilling af et fysisk objekt, f.eks. en partikel i bevægelse.



Figur 2.1 En vektor a kan bruges til at beskrive impulsen af en partikel i bevægelse. Skifter vi koordinatsystem, svarer det til et skift i observatørens synspunkt

Roterer vi koordinatsystemet (svarende til en rotation af vores synspunkt) omkring x-aksen, vil det nye koordinatsæt, som vi må bruge til at beskrive a i det ændrede koordinatsystem, være uskelnelige fra det gamle koordinatsæt:

$$a = \{x_0, 0, 0\}\ , R_x a = \{x_0, 0, 0\}$$

Eksempel

For en virkelig billardkugle vil den symbolske fremstilling være kuglens påvirkning af vores bevidsthed, så den symbolske fremstilling behøver med andre ord ikke nødvendigvis at være i form af én eller flere ligninger. Uafhængigt af en eventuel matematiske beskrivelse af kuglen er den symmetrisk i sig selv. Men vi kan lægge et koordinatsystem i centrum af kuglen og derefter opstille en matematisk ligning for kuglens overflade, således at kuglen er den mængde af vektorer r som opfylder $|r| \leq R$, hvor R er kuglens radius. Denne matematiske beskrivelse af kuglen er både invariant overfor rotationer af kuglen og rotation af koordinatsystemet gennem en vilkårlig akse som går gennem centrum. Derfor er den matematiske kugle rotationssymmetrisk, og vi vil sige at den fysiske kugle deler denne symmetri.

Symmetribegreber

Førnævnte P. W. Atkins opdeler symmetribegrebet i symmetrioperationer og -elementer. Vi finder det hensigtsmæssigt at tilføje symmetriske systemer, således at vi skelner mellem et symmetrisk system, symmetrioperationer, og symmetrielementer.

- *Symmetriske systemer* er systemer, der kan beskrives ved hjælp af ligninger, eller andre symboler, der udviser invarians under én eller flere symmetrioperationer.

- *Symmetrioperationer* er den type operation, som svarer til netop det koordinatskift (eller til andet skift i synspunkt), som gør, at systemets symbolske fremstilling er uskelnelig fra systemets gamle symbolske fremstilling.
- *Symmetrielementer* kan være den linie, det punkt, eller det plan med hensyn til hvilket en operation bliver til en symmetrioperation. f.eks. et spejlplan.

2.1.3 Gruppeteori

Gruppeteori er en matematisk teori, som beskriver helt abstrakte samlinger af matematiske objekter, såkaldte grupper. Denne teori har en meget stor betydning i forbindelse med symmetri, da man kan samle symmetrioperationer i såkaldte grupper. Dernæst kan man beskrive et objekts symmetrier, som en invarians under operationerne hørende til en gruppe. Én af de vigtige betydninger af gruppeteori er den navngivningskonvention for symmetrigrupper, som betyder, at man på en enkel måde kan give en éntydig beskrivelse af alle symmetrigrupper, man støder på. Der er mange, som tænker på symmetribetragtninger og gruppeteoretiske argumenter, som værende det samme. Dette er også rigtigt, hvis ens arbejdsområde udelukkende er grupper bestående af symmetrioperationer, men man skal have for øje, at gruppeteori er en langt bredere teori som dækker mange andre objekter.

Vi har i rapporten valgt at nedtone brugen af gruppeteori, da det er et meget stort og uoverskueligt område at forklare kort. I appendiks A har vi samlet nogle af de grundlæggende gruppeteoretiske begreber af hensyn til vores målgruppe.

2.1.4 Symmetrioperationer

Inspireret af Feynman et al. (1963) har vi udformet følgende liste over nogle af de operationer, som optræder i fysikken og som i nogle tilfælde vil være symmetrioperationer

1. Skift i den kvantemekaniske fase. Det vil sige at bølgefunktionen ændres med en fasefaktor.
2. Translation i rum.
3. Translation i tid.
4. Rotation gennem en vinkel.
5. Jævn hastighed langs en ret linie (Lorentz transformationen).
6. Tidsvending, hvor tiden skifter fortegn.
7. Rumvending, hvor alle koordinaterne skifter fortegn (paritet).
8. Ombytning af identiske partikler

9. Partikel-antipartikel, hvor en partikels ladning og paritet bliver det omvendte (mens eksempelvis massen og spinnet forbliver uændrede).

Hertil kan man føje kombinationer af ovenstående, f.eks. drejespejling (Boardman et al., 1973) som er en operation, der består af en spejling efterfulgt af en drejning. Der er en væsentlig forskel på de første 5 operationerne på listen og de øvrige operationer. Symmetrioperationer som er spejlinger (af typen 6-9), betegnes med S, og vil ved gentagen brug give enhedsoperationen:

$$S^2 = E$$

For translationsoperationer (af typen 1-5) gælder dette ikke. Man skelner mellem kontinuerte symmetrier og diskrete symmetrier. Tydeligvis er en kugle symmetrisk på en anden måde end en kasse, idet kuglen kan roteres gennem kontinuerte vinkler og stadig se ens ud, mens en (kvadratisk) kasse kun vil være invariant under rotation på 90 grader rundt om en akse, der går gennem centrum. Andre vinkler vil gøre, at kassen ser forskellige ud før og efter rotation, så kassen har en diskret symmetri, mens kuglen har en kontinuert symmetri. Systemer der besidder en kontinuert symmetri påkalder sig særlig interesse, fordi der er — som vi skal se senere — en tæt sammenhæng imellem kontinuerte symmetrier og bevarede størrelser.

2.2 Klassifikation af symmetribetragtninger

Vores opfattelse af hvad en symmetribetragtning er, startede med at være en broget skare af argumenter, hvor ordet "symmetri" indgik. Vi har fundet det hensigtsmæssigt at opdele symmetribetragtningerne i nedenstående tre grupper.

2.2.1 Symmetriiagttagelser

Hvis vi i arbejdet med et system udnytter, at vi har opdaget, at der i systemet findes en *indbygget* symmetri, er der tale om en symmetriiagttagelse. Opdagelsen af symmetri kan enten ske i det virkelige system, eller i de ligninger som beskriver det. Det kan være lettere eller sværere at erkende en indbygget symmetri, og nogle gange skal der særlige matematiske omskrivninger til, for at symmetrien i problemet kan erkendes.

Eksempel

Hvad er værdien af $< x >$ for en elektron i hydrogen, når dette system befinder sig i sin grundtilstand? I løsningen af dette problem udnytter vi, at grundtilstanden for hydrogen er sfærisk symmetrisk, og at elektronen ligeså ofte er i afstanden $-x'$ fra kernen som i afstanden $+x'$ fra kernen, hvoraf vi slutter, at $< x > = 0$ (Griffiths, 1995).

2.2.2 Symmetriantagelser

En symmetriantagelse er, når man i et system antager, at der er eksisterer en bestemt symmetri, oftest for at lette eller muliggøre en løsning. I nogle situationer ved man ikke, om antagelsen er korrekt, eller man ved at den ikke er, men går ud fra at den ikke er fuldstændig forkert. Antagelsen kan derfor være mere eller mindre velbegrundet, spændende fra at man ved, at der begås en ubetydelig fejl til, at man ikke ved i hvor høj grad fejlen er negligeabel.

Eksempel

Det drejer sig om at løse Schrödingerligningen for valenselektroner i et fast, krystallinsk stof. Her er man nødt til at gøre antagelser, da det er umuligt at løse i størrelsesorden 10^{23} Schrödingerligninger samtidigt. Man benytter sig af Blochs sætning, der handler om periodiske potentialer (Griffiths, 1995). I én dimension kan et periodisk potential beskrives som:

$$V(x+a) = V(x)$$

Hvis et potential af denne type indgår i Schrödingerligningen, her opskrevet i én dimension

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

siger Blochs sætning, at løsningerne ($\psi(x)$) skal opfylde følgende bibetingelse:

$$\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x)$$

Her er K en reel konstant. Blochs sætning gør, at vi kan nøjes med at løse Schrödingerligningen for en enkelt krystalcelle frem for hele krystallen. Ud af disse betingelser fremkommer eksistensen af energibånd og energibåndgab, hvormed menes bånd af energitilstande afløst af bånd af forbudte energitilstande.

2.2.3 Symmetripostulater

I nogle situationer kræver man tilstedeværelsen af særlige typer symmetrier i opbygningen af en teori, hvilket vi vil kalde et symmetripostulat. Oftest vil disse postulater være helt grundlæggende for opbygningen af teorien og spille en rolle analog til aksiomernes i matematikken. Der udledes konsekvenser af teorien, som så undersøges i forhold til virkeligheden, og evt. forkastes symmetripostulatet.

Eksempel

Astrofysikere benytter sig af Det kosmologiske Princip, hvis indhold er, at universets indhold af stof (masse og energi) er fordelt isotropt og homogent — at universet i stor målestok er ens overalt i alle retninger (Akselbo, 1996). Man kan benytte Det kosmologiske Princip som *Ansatz* til udledning af Newtons love, hvilket er skitseret nedenfor (Akselbo, 1996). Hvis universet principielt er homogent og isotropt fordelt, vil det modsætte sig ethvert forsøg på symmetribrud, hvilket får den konsekvens, at man ikke kan forskyde noget enkeltobjekt i universet, da det uanset hvor det befandt sig, ville bryde homogeniteten. Hvis et legme forekommer os at være flyttet, må et andet legme være flyttet i modsat retning, på en sådan måde, at den globale fordeling ikke er ændret, dvs. således, at de to legemers fælles massemidtpunkt er forblevet ubevægeligt, og summen af de to legemers impulser er forblevet nul. Ønsker vi at bevæge de to legemers massemidtpunkt, må vi på tilsvarende vis flytte et tredje legme. Dette betyder, at et sammensat legemes massemidtpunkt kun kan ændres, under indflydelse af ydre kræfter, hvilket er indholdet af massemidtpunktssætningen (Christiansen et al., 1990) (Anvendt på hele universet siger massemidtpunktssætningen, at universets samlede impuls er nul). Videre kan vi slutte, at indre kræfter må ophæve hinanden, da der ellers ville være noget til overs, der kunne virke som en "ydre" kraft, så aktion er lig reaktion. Til sidst ser vi på et objekt der består af to masser m og M. Ønsker vi at flytte M, kan det kun gøres ved at flytte m i modsat retning — kraften til at flytte M får vi ved at støde fra på m, med andre ord er der samme kraft på m og M. Da de to massers fælles massemidtpunkt ikke flyttes, vil de accelerationer, vi herved giver de to objekter være omvendt proportionale med deres masser og vi har udledt Newtons 2. lov. På lignende vis udleder Akselbo (1996) tillige gravitationsloven.

Dette er et eksempel på en efterrationalisering. Ifølge vores interview med Benny Lautrup bruges symmetripostulater rent faktisk af højenergifysikere til at udvikle ny teori. Man bestemmer sig for, hvilke symmetrier et system skal indeholde, og ser på, hvordan dette system tager sig ud (Lautrup, 1998).

2.2.4 Oversigt over symmetribetragtninger i fysikken

For at skabe et overblik over anvendelsen af symmetribetragtninger i fysikken, skelner vi mellem den fysiske virkelighed, som er naturen vi ønsker at beskrive og fysikkens beskrivelse af naturen. Fysikkens beskrivelse af virkeligheden opdeles nogle gange i teoribygninger og fænomenteorier, hvor teoribygningerne er overordnede formalismer, som kan benyttes til beskrivelse af flere forskellige fænomener, mens fænomenteorier er mindre generelle teorier, der angår specifikke fænomener. Teoribygninger kan f.eks. være kvantemekanik eller elektrodynamik, mens eksempler på fænomenteorier er faststoffysik og elementarpartikelfysik. Denne skelnen er dog ikke så skarp, som det kunne lyde, f.eks. nævner Zee (1986) at Einstein udledte Newtons gravitationslov, som engang blev opfattet som fundamental, som en fænomenologisk manifestation af sin gravitationsteori. Men på det seneste har nogle teoretiske fysikere demonstreret, at Einsteins teori måske kan udledes udfra en dybere teori. Hvad enten skelnen mellem teoribygninger og fænomenteorier er fuldstændig skarp eller ej, mener vi at den siger noget om fysikkens struktur.

Vi mener ikke, at det er alle typer symmetribetragtninger, som bruges alle steder i fysikken, hvilket er angivet i skemaet nedenfor

Område	Sym-iagttagelse	Sym-antagelser	Sym-postulater
Fysisk virkelighed	findes	findes ej	findes ej
Teoribygning	findes	findes ej	findes
Fænomen-teori	findes	findes	findes ej

Rækkerne angiver det område, hvor symmetribetragtningerne optræder, mens søjlerne angiver, hvorvidt symmetribetragtningerne findes. Den fysiske virkelighed er naturen, vi ønsker at beskrive.

Hvad angår symmetriiagttagelser, kan man enten opdage en symmetri i et fænomen i naturen, som så kan genfindes i teorien, hvis det er en god teori. Man kan også opdage, at en teori indeholder en symmetri som så kan udnyttes, som i eksemplet med elektronen, hvor det er en fænomenteori, som har en indbygget symmetri. Teoribygninger kan ligeledes indeholde en symmetri, f.eks. gaugeinvarians af Maxwells ligninger. I vores beskrivelse af symmetriantagelser, nævner vi Blochs sætning som eksempel, så der findes altså symmetriantagelser indenfor fænomen-teorier. Man kan diskutere om antagelsen i Blochs sætning snarere er en antagelse om den fysiske virkelighed, end om fænomenteorien. Vi mener, at symmetriantagelsen først bliver formuleret i det øjeblik virkeligheden beskrives, og derfor har vi valgt at henføre denne type til fænomenteorierne. Der findes ikke egentlige symmetriantagelser i teoribygningerne, fordi vi benævner eventuelle krav som teorien skal opfylde for postulater, og approximationer optræder ikke i teoribygninger kun i fænomenteorier. Man kan vel godt forestille sig teoribygninger, hvor der optræder en åbenlys approximation. Når dette ikke stemmer overens med ovenstående skema, kan det skyldes uenighed om, hvad man kalder en teoribygning eller det forhold, at skemaer giver overblik men aldrig hele sandheden.

Symmetripostulater angående den fysiske virkelighed har vi valgt at henføre til teoribygninger, af samme grund som der ikke er symmetriantagelser om den fysiske virkelighed. Postulater i fænomenteorierne er nærmere antagelser end postulater om verden, så disse findes ikke i denne søjle. Nogle teoribygninger såsom Einsteins relativitetsteorier er opbygget udfra et postulat, som f.eks. at verden er Lorentz-invariant, så derfor findes disse i overensstemmelse med skemaet.

Afslutningsvis kan vi tilføje, at en symmetribetragtning i én sammenhæng kan fungere som symmetriantagelse, og i en anden sammenhæng som symmetriiagttagelse alt efter detaljeringsgrad. Vi mener dog, at opdelingen giver mening for en konkret analyse.

2.3 Symmetri og bevarede størrelser

Matematikeren Emmy Noether (1882-1935) har i to artikler fra 1918, formuleret en generel sætning, som nu går under navnet Noethers sætning. Lidt løst siger den, at hver gang et system har en kontinuert symmetri, eksisterer der en bevaret størrelse. Som vi skal se, giver rotationssymmetri f.eks. anledning til bevarelse af impulsmomentet. På trods af, at Noether formulerede sætningen inden fremkomsten af kvantemekanikken, for slet ikke at tale om de nyere kvantefelt-teorier, spiller sætningen en vigtigt rolle i moderne fysik, idet den kan udvides til også at gælde disse tilfælde. I introduktionen til Noethers samlede værker (Jacobsen, 1983) citeres Feza Gursey for at skrive følgende om Noethers sætning:

> Sætningen er meget generel, idet den kan anvendes både til diskrete og kontinuerte, klassiske og kvantemekaniske systemer, selvom den oprindeligt blev udledt i det klassiske tilfælde. (Jacobsen, 1983, side 23)

Hvad angår omfanget af anvendelsen af Noethers sætning, skriver Gursey, at alle fysikkens fundamentale love kan udtrykkes som kvantefelter, som er associeret med symmetrigrupper i ethvert punkt og opfylder differentialligninger, som er afledt af et virkningsprincip. Derfor kan alle fysikkens bevarelseslove udledes af Noethers sætning. Ifølge Gursey er de eneste bevarede størrelser, som ikke kan udledes udfra Noethers sætning de såkaldte topologiske invarianter, som er relateret til et felts globale egenskaber. Bortset fra denne undtagelse er Noethers sætning af afgørende betydning for fysikken og fortolkningen af fundamentale love udfra gruppeteori (Jacobsen, 1983).

Vi vil i dette afsnit give et resumé af Goldsteins udledning (Goldstein, 1980) af Noethers sætning, som den er formuleret i Lagranges formalisme, som også vil blive brugt i en senere case, se evt. afsnit 4.1.

Vi introducerer Lagrangefunktionen, L, som er forskellen mellem den kinetiske og den potentielle energi,

$$L = T - V$$

Derudover benytter vi virkningsintegralet, I, defineret ved

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L dt \tag{2.3.1}$$

Hamiltons princip siger, at bevægelsen af et system fra t_1 til t_2 er sådan, at virkningsintegralet har en stationær værdi for den korrekte bevægelse (Goldstein, 1980).

I beskrivelsen af kontinuerte systemer er det en fordel at arbejde med Lagranges tæthedsfunktion, $\mathcal{L}$, som er en funktion, hvis integral med hensyn til rummet giver Lagrangefunktionen

$$\int\int\int \mathcal{L} dx dy dz = L \tag{2.3.2}$$

Virkningsintegralet bliver for kontinuerte systemer til følgende integral over tiden og rummet:

$$I = \int \int \int \int \mathcal{L} dx dy dz dt \tag{2.3.3}$$

Til den generelle beskrivelse af kontinuerte systemer er der udviklet en mere kortfattet notation. Eksempelvis angives kun ét integraletegn, og man benytter én koordinatvektor frem for tre eller fire koordinater.

En koordinatvektor som kun består af de rumlige koordinater betegnes med et latinsk fodtegn, f.eks. x_k:

$$x_k = \{x, y, z\}$$

Hvis en koordinatvektor består af tre rumlige koordinater og af tiden, betegnes den med et græsk fodtegn, f.eks. x_μ:

$$x_\mu = \{x_0, x_1, x_2, x_3\} \tag{2.3.4}$$

Sædvanligvis svarer x_0 til tiden. Felter betegnes som regel η, og de kan afhænge af alle fire parametre i ligning 2.3.4:

$$\eta = \eta(x_\mu)$$

Desuden anvendes en forkortet måde at angive den afledte af feltet:

$$\eta_{i,j} = \frac{\partial \eta_i}{\partial x_j} \tag{2.3.5}$$

Ovenstående ligning 2.3.5 skal læses på følgende måde: Differentialkvotienten af den i'te komposant med hensyn x_j (hvor både i og j kan være latinske eller græske bogstaver) betegnes med $\eta_{i,j}$.

Noethers sætning handler om bevarede størrelser for systemer, der udviser kontinuert symmetri. Kontinuert symmetri kan formuleres som invarians under en transformation af de variable, som beskriver systemet. I udledningen af Noethers sætning gør man brug af tre typer transformationer (Goldstein, 1980).

Vi definerer en koordinat-transformation som

$$x_\mu \rightarrow x'_\mu = x_\mu + \delta x_\mu \tag{2.3.6}$$

Vi definerer felt-transformation som

$$\eta_\rho(x_\mu) \rightarrow \eta'_\rho(x'_\mu) = \eta_\rho(x_\mu) + \delta\eta_\rho(x_\mu) \tag{2.3.7}$$

Her måler $\delta\eta_\rho(x_\mu)$ effekten af ændringer både i x_μ og i η_ρ.

Den sidste type transformation er en ændring af feltvariablerne i et bestemt punkt x_μ, som vi vil betegne med

$$\eta_\rho(x_\mu) \rightarrow \eta'_\rho(x_\mu) = \eta_\rho(x_\mu) + \bar{\delta}\eta_\rho(x_\mu) \tag{2.3.8}$$

Vi kan udregne $\bar{\delta}\eta_\rho(x_\mu)$ til at være

$$\bar{\delta}\eta_\rho(x_\mu) = \eta'_\rho(x_\mu) - \eta_\rho(x_\mu) \tag{2.3.9}$$

I det generelle tilfælde vil en ændring af koordinaterne og af feltstørrelserne medføre at Lagranges tæthedsfunktion ændrer funktionel form

$$\mathcal{L}(\eta_\rho, \eta_{\rho,\lambda}, x_\rho) \rightarrow \mathcal{L}'(\eta'_\rho, \eta'_{\rho,\lambda}, x'_\rho) \tag{2.3.10}$$

I udledningen af Noethers sætning tages udgangspunkt i tre betingelser

1. Fire-rummet er euklidisk (Goldstein, 1980).

2. Lagranges tæthedsfunktion har den samme funktionelle form, selvom de variable, som den afhænger af bliver transformerede. Dette kan skrives

$$\mathcal{L}(\eta_\rho(x_\mu), \eta_{\rho,v}(x_\mu), x_\mu) = \mathcal{L}(\eta'_\rho(x'_\mu), \eta'_{\rho,v}(x'_\mu), x'_\mu) \tag{2.3.11}$$

Betingelsen indeholdt i ligning 2.3.11 betegnes form-invarians, fordi Lagranges tæthedsfunktion ikke ændrer form ved et skift i både koordinaterne og i feltstørrelserne (Goldstein, 1980).

3. Størrelsen af det transformerede virkningsintegral, I', defineret ved

$$I' \equiv \int_{\Omega'} \mathcal{L}'(\eta'_\rho(x'_\mu), \eta'_{\rho,v}(x'_\mu), x'_\mu)(dx'_\mu)$$

er invariant under samtidig transformation af koordinaterne og feltstørrelserne, hvilket kan skrives som

$$I' = \int_{\Omega} \mathcal{L}(\eta_\rho(x_\mu), \eta_{\rho,v}(x_\mu), x_\mu)(dx_\mu) \tag{2.3.12}$$

Betingelsen i ligning 2.3.12 kaldes for skala-invarians (Goldstein, 1980).

Man kan indse, at det svarer til en kontinuert symmetri, at $\mathcal{L}$ er forminvariant, og I er skalainvariant; det er udfra disse betingelser, at Goldstein (1980) kommer frem til en kontinuitetsligning:

$$0 = \frac{d}{dt}\int_{\Omega}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\eta_{\rho,\lambda}}\bar{\delta}\eta_\rho + \mathcal{L}\delta x_\lambda\right)(dV) + \int_{\Omega}\frac{d}{dx_k}\left\{\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\eta_{\rho,k}}\bar{\delta}\eta_\rho + \mathcal{L}\delta x_k\right\}dV \tag{2.3.13}$$

At ovenstående ligning 2.3.13 *er* en kontinuitetsligning analogt med f.eks. hydrodynamikkens kontinuitetsligning, vil vi sandsynliggøre nedenfor.

I ligning 2.3.13 er en summationskonvention benyttet, således at integranden i det sidste udtryk kan identificeres som divergensen af $\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\eta_{\rho,k}}\bar{\delta}\eta_\rho + \mathcal{L}\delta x_k$. Vi vil nu benytte divergenssætningen (Edwards & Penney, 1998), som siger, at

$$\int_{\Omega}\nabla\cdot f(x)dV = \int_{\delta\Omega} f(x)\cdot n(dA) \tag{2.3.14}$$

hvor $\delta\Omega$ er overfladen af Ω og f, x og n er vektorer. Benytter vi denne sætning, kan vi omskrive ligning 2.3.13 til

$$0 = \frac{d}{dt}\int_{\Omega}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\eta_{\rho,\lambda}}\bar{\delta}\eta_\rho + \mathcal{L}\delta x_\lambda\right)(dV) + \int_{\delta\Omega}\left\{\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\eta_{\rho,k}}\bar{\delta}\eta_\rho + \mathcal{L}\delta x_k\right\}\cdot\mathbf{n}(dA) \tag{2.3.15}$$

Orienteringen af n er i dette tilfælde *ud* af overfladen. Vi kan indse, at ligning 2.3.15 er en kontinuitetsligning, ved at identificere første led som flowet igennem voluminet, Ω, og andet led som mængden af det, der strømmer ud igennem overfladen af voluminet.

Det der der strømmer, er størrelsen $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_{\rho,\lambda}} \bar{\delta}\eta_\rho + \mathcal{L}\delta x_\lambda$, og vi har herved konstateret, at der gælder en bevarelsessætning for denne størrelse.

En symmetri medfører altså at en størrelse er bevaret, men fordi man har en bevaret størrelse, behøver det ikke betyde, at man har en kontinuert symmetri. Som eksempel på et bevarelsesfænomen uden en tilknyttet kontinuert symmetri kan solitonbølger nævnes. Solitonbølger er enkeltbølger, som forplanter sig igennem et medium næsten uden tab af energi. To solitonbølger mødes og går gennem hinanden uden at ændre form eller hastighed. Mere konkret kunne man forestille sig en samling penduler der alle er ophængt på samme snor, og hver især forbundet til sine to naboer med en fjeder. Ligevægtssituationen vil være den, hvor alle penduler hænger nedad og er i ro. Man kan nu skabe en solitonbølge ved eksempelvis at vende et af pendulerne 360^0 i én hurtig bevægelse. Denne forstyrrelse af ligevægtssituationen vil forplante sig som en solitonbølge. Eksemplet ovenfor beskriver en situation med visse symmetrier, men det er ikke på grund af symmetrierne, at solitonbølger bevarer deres egenskaber som beskrevet i (Goldstein, 1980).

Kapitel 3

Udvalgte naturvidenskabsmænd om symmetri

Vi vil i det følgende beskrive hvad fire forskellige naturvidenskabsmænd mener om symmetribetragtninger.

Først vil vi se på videnskaben fra et videnskabsteoretisk perspektiv; man kunne vælge mange forskellige videnskabsteoretikere, men vi har valgt Peirce da han har nogle beskrivelser af selve *videnskaben*, som vi mener kan bidrage til diskussionen.

Derefter vil vi, beskrive hvad Wigner overordnet har sagt om symmetri. Som det vil fremgå er Wigner en meget fremtrædende person i diskussionen af symmetri, og har bl.a. fået Nobelprisen for et symmetrirelateret arbejde.

For at få en tættere kontakt til moderne fysik har vi foretaget nogle interviews med personer, som arbejder med fysik. Vi har først et interview med Benny Lautrup, som er teoretisk fysiker, og som har arbejdet en del med symmetri bl.a. gennem sit arbejde med elementarpartikelfysik.

Det andet interview er med Eigil Præstgaard, som er teoretisk kemiker, men hans arbejdsområde er meget fysisk, og da han arbejder inden for statistisk mekanik, har han nogle erfaringer med symmetri i fysik.

Vi håber gennem beskrivelse af disse personers meninger at kunne belyse både måden som fysikere arbejder på, og tillige fysikkens genstandsområde.

3.1 Charles Sanders Peirce

Charles Sanders Peirce (1839-1914) har gennem sit arbejde med tegnteori og naturvidenskabens grundlag afklaret nogle begreber, som vi mener kan være nyttige.

Peirce var kemiker af uddannelse, men arbejdede inden for flere forskellige naturvidenskabelige discipliner, bl.a. med at måle tyngdekraft-forskellene i Nordamerika.

Peirces store lidenskab var dog logik og videnskabsteori, og det er også fra denne del af hans arbejde, vi vil benytte nogle af hans tanker. Peirce arbejdede bl.a. med forskellige måder som tro kan skabes på, og tvivl fordrives, og argumenterer for, at den videnskabelige metode er den af flere metoder, som skaber færrest problemer. I forbindelse med dette beskriver han den videnskabelige metode, og det er denne beskrivelse som vi vil tage fat i. Specifikt er det artiklen "Hvordan tro bliver fast" (Gullvåg, 1972, side 134-151).

Han kommer med følgende beskrivelse af den videnskabelige metode:

> For at standse tvivlen er det derfor nødvendigt at der bliver fundet en metode som ikke lader vores konklusioner forårsages af noget menneskeligt, men af noget varigt udenfor os — noget som vores tænkning ikke har nogen indflydelse på. Nogle mystikere bilder sig ind at de i inspiration fra det høje, har en sådan metode. Men det er bare en form for stædighedsmetode[1], hvor forestillingen om sandheden som noget offentligt endnu ikke er udviklet. Det varige uden for os ville ikke være uden for os, i vor forstand, hvis dets indflydelse begrænser sig til et enkelt individ. Det må være noget som påvirker, eller kan påvirke, alle mennesker. Og selvom disse påvirkninger nødvendigvis er lige så forskellige som de enkelte individers vilkår, skal metoden være således, at ethvert menneskes endelige konklusion er den samme, eller vil blive det hvis bare undersøgelsen fortsættes længe nok. Videnskabens metode er en sådan metode. Dens grundlæggende hypotese er, omformuleret til hverdagssprog: Der findes virkelige ting hvis egenskaber er helt uafhængige af vores mening om dem, disse realiteter påvirker vores sanser efter regelmæssige love, og selvom vores sanseindtryk er lige så forskellige som vores forhold til genstandene, kan vi alligevel ved hjælp af perceptionslovene slutte os til hvordan tingene er i virkeligheden, og alle som har tilstrækkelige erfaring og tænker nok over det, vil komme til den eneste sande konklusion. (Gullvåg, 1972, Side 146-147)

Herefter diskuteres det, om man kan vide, at der findes virkelige objekter, og Peirce noterer, at den videnskabelige metode i hvert fald ikke kommer til modstridende konklusioner — noget som kan tages som udtryk for, at vi i hvert fald ikke er helt på et galt spor ved at antage, at der findes virkelige objekter.

Vi finder at ovenstående definition af den videnskabelige metode relaterer sig symmetri og invarians på to måder. For det første beskriver Peirce en metode, hvor det skal være lige meget, hvor og hvornår det, som er uden for os påvirker

[1] Peirce opererer med flere metoder til at undgå tvivl, stædighedsmetoden går ud på at man vælger en tro som man så ophøjer til noget guddommeligt, som der ikke kan sættes spørgsmålstegn ved.

os, da man ellers ikke vil være i stand til at skelne kontekst, fra det som man ønsker undersøgt. Perceptionslovene er det, som gør os i stand til at vælge de rette hændelser fra en kompleks virkelighed, og derudfra finde passende sammenhænge. Ved læsning af afsnit 3.2.3 kan man iagttage at Peirce således tager de af Wigner fremsatte påstande om symmetri for givne.

Den anden sammenhæng med symmetri, handler om den måde, man opdager symmetri på. En symmetri er noget, som eksisterer helt uafhængigt af vores tanker om den, så hvis man ønsker at finde en symmetri, er man nødt til at undersøge objektet på forskellige måder. Ved at ændre synsvinkel i forhold til et symmetrisk objekt opdager man, at objektet ser ens ud, hvis man ser det fra forskellige synsvinkler, og ud fra ens viden om hvordan man opfatter den aktuelle type objekt, er man i stand til at beskrive objektets symmetri. Enhver som giver sig til at undersøge et objekt, og gør det grundigt nok, vil komme frem til de samme symmetrier, netop fordi symmetri er en "virkelig ting" i verden, og det symmetriske ved et objekt påvirker vores sanser ens.

Man kan derfor konkludere, at metoden til at opdage symmetri og den videnskabelige metode er den samme, så det er ikke så mærkeligt, hvis den videnskabelige metode finder symmetrier ved de objekter, som bliver undersøgt.

3.2 Eugene P. Wigner

Eugene P. Wigner (1902-1995) fik i 1963 Nobelprisen i fysik. Denne pris blev tildelt for hans arbejde med kvantemekanik, specielt hans arbejde med vekselvirkningerne mellem protoner og neutroner i atomkernen. Wigner brugte abstrakt gruppeteori i sit arbejde og fokuserede mere på symmetrier, end på de dynamiske egenskaber.

Wigner har udover sit arbejde inden for specifikke fysiske områder beskæftiget sig en del med symmetris betydning i fysikken. Han har i den forbindelse skrevet en del artikler om dette emne og vi har her forsøgt at give et resumé af hans meninger.

Vi har primært brugt følgende artikler

1 Invariance in Physical Theory (s. 3-13)
2 Symmetry and Conservation Laws (s. 14-27)
3 The Role of Invariance Principles in Natural Philosophy (s. 28-37)
4 Events, Laws of Nature, and Invariance principles (s. 38-50)

Alle er fundet i samlingen "Symmetries and reflections", (Wigner, 1967), hvor sidetallene også refererer til.

Vores gennemgang af de udtalelser som vi mener er vigtige, har vi inddelt efter emne. Vi har valgt kun at medtage den del af Wigners meninger om symmetri som handler om symmetri på et meget grundlæggende niveau. Det vil sige hans behandling af symmetri som grundlag for fysikken som videnskab. Dette retter sig mest mod den del af fysikken som arbejder med teoribygninger.

I det som vi har valgt ud, beskæftiger Wigner sig mest med symmetri i klassisk forstand, symmetri i tid og rum, og ikke abstrakt symmetri som f.eks. gaugesymmetri. Hans mål er at vise at vi ikke ville kunne have fysikken som den ser ud i dag, hvis der ikke havde været visse symmetrier i verden.

3.2.1 Klassisk invarians & dynamisk invarians

Wigner skelner mellem to typer af invarians, den klassiske/geometriske og den dynamiske.

De klassiske symmetrier er karakteriseret ved at kunne formuleres direkte i termer angående hændelser. Tidsinvarians kan f.eks. formuleres på følgende måde: "Sammenhængen mellem hændelser afhænger kun af tidsintervallet mellem disse, de afhænger ikke af på hvilket tidspunkt den første finder sted." (Wigner, 1967, side 17-18)

På den anden side er de dynamiske invariansprincipper formuleret i termer af naturlove, og de angår specifikke typer af vekselvirkning, ikke sammenhængen mellem hændelser. Vi siger f.eks. at den elektromagnetiske vekselvirkning er gauge-invariant og refererer til den specifikke naturlov som regulerer elektromagnetiske felter (Wigner, 1967, side 17-18). De dynamiske invariansprincipper er baseret på eksistensen af specifikke vekselvirkninger (Wigner, 1967, side 17-18). Gauge-invarians er ikke en invarians som et fysisk objekt kan have, og den har heller ikke noget at gøre med de direkte hændelser i naturen, men den er derimod en invarians som en fysisk teori kan indeholde.

I det følgende vil vi som sagt mest koncentrere os om de grundlæggende egenskaber ved naturen, og derfor også mest med de klassiske symmetrier, så det er på sin plads at ridse op, hvilke symmetrier der er tale om. Wigner kalder denne gruppe af symmetrioperationer for Lorentz-gruppen (Wigner, 1967, side 5)[2].

Gruppen består af følgende symmetrier

- Invarians over for absolut tid og sted.
- Invarians over for retning.
- Invarians over for jævn bevægelse.

Den sidste blev dog sat i tvivl af nogle elektromagnetiske fænomener, men siden genindførte Einstein den i en modificeret form. De nærmere konsekvenser af disse symmetrier vil i nogen grad blive diskuteret i det følgende.

3.2.2 Symmetris historiske rolle

Wigner mener, at symmetri historisk set altid har spillet en rolle, men at der er stor forskel på hvordan man har brugt symmetribegrebet. Der har gennem lang tid været en uartikuleret viden om de grundlæggende symmetrier og bevarelseslove. Newton beskrev f.eks. ikke sine love i noget specielt koordinatsystem. Derved kan de bruges i alle retninger og punkter. De grundlæggende bevarelseslove har også været kendt, men ikke beskrevet i det generelle tilfælde og de blev kun nedskrevet som indlysende kendsgerninger når de skulle anvendes til praktiske formål, (Wigner, 1967, side 15).

Dette ændredes med starten af det tyvende århundrede

> Situationen for invarians af ligningerne ændrede sig drastisk på grund af Einsteins teorier. Einstein formulerede postulaterne om rummets symmetri, dvs ækvivalensen af retninger og punkter i rummet. Han genindførte også, i en modificeret form, ækvivalensen af koordinatsystemer i bevægelse og i stilstand.
>
> Hvad angår bevarelseslove, blev deres vigtighed åbenlys, som et resultat af interessen for Bohrs atom-model, hvor bevarelsen af impulsmoment er uundværligt. (Wigner, 1967, side 15)

Wigner mener at dette ændrede vores forhold til symmetri og bevarelseslove næsten fuldstændigt. På tidspunktet for Wigners artikel (dvs omkring 1960'erne) er

[2] I en anden artikel omtaler han den dog som Poincaré-gruppen (Wigner, 1967, side 18).

det svært at finde en artikel som omhandler de grundlæggende fysiske spørgsmål, men som ikke referer til postulater om invarians. Dertil kommer at sammenhængen mellem invarians og bevarelseslove er blevet bredt accepteret (Wigner, 1967, side 15).

3.2.3 Om grundlaget for fysik som videnskab

Wigner mener, at symmetri er meget grundlæggende for fysikken, faktisk mener han, at fysikken ikke ville kunne eksistere hvis ikke der var nogle grundlæggende symmetrier til stede i verden. Dette synspunkt udtrykker han således:

> Verden er kompliceret og det er klart umuligt for den menneskelige hjerne at forstå den fuldstændigt. Mennesket har derfor udtænkt et kneb som gør det muligt at give tilfældigheder skylden for verdens komplicerede natur og således gør det muligt at udvinde et domæne, hvor man kan finde simple love. Det komplicerede kaldes for begyndelsesbetingelser; domænet af regulariteter for naturlove. (Wigner, 1967, side 3-4)
>
> At man kan opbygge abstrakte bevægelseslove ud fra de kaotiske hændelser omkring os, bygger på to omstændigheder. For det første kan man i mange tilfælde isolere en ikke alt for stor del af begyndelsesbetingelserne, og som, på trods af dette, indeholder alle de betingelser som er relevante for de hændelser man fokuserer på. (Wigner, 1967, side 3-4)
>
> Muligheden for at isolere de relevante begyndelsesbetingelser ville i sig selv ikke gøre det muligt at opdage naturlove. Det er essentielt at givet de samme essentielle begyndelsesbetingelser, skal resultatet være det samme lige meget hvor og hvornår vi "skaber" disse. Dette princip kan udtrykkes ved at absolut tid og sted aldrig må være essentielle begyndelsesbetingelser. Konstateringen af at absolut tid og sted aldrig er essentielle begyndelsesbetingelser, er den første og måske den vigtigste sætning om invarians i fysikken. (Wigner, 1967, side 3-4)

Inden for al naturvidenskab tales om reproducerbarhed af eksperimenter, som en nødvendighed for at man vil godtage eksperimentets almengyldighed. Men for at et eksperiment kan gentages skal man kunne skelne essentielle fra ikke-essentielle begyndelsesbetingelser, hvilket ikke altid er trivielt. Samtidig ville det være umuligt at have reproducerbarhed i bredeste forstand (dvs. eksperimentet skal kunne gentages overalt og til enhver tid) hvis et eksperiment kun kan udføres på ét bestemt sted. Det ville være endnu værre hvis et eksperiment kun kan udføres til én bestemt absolut tid, for så ville man aldrig være i stand til at gentage det. Wigners lidt abstrakte diskussion kan gøres konkret i forhold til vilkårene f.eks. for den eksperimentelle fysik. Inden for teoretisk fysik vil man på tilsvarende måde komme i problemer hvis ens forudsigelser, kun passede til én bestemt tid og på ét bestemt sted.

Wigner uddyber sine udtagelser på følgende måde

> Hvis sammenhængen mellem hændelser ændrede sig fra dag til dag og var forskellige for forskellige punkter af rummet, ville det ikke være mulige at opdage dem. (Wigner, 1967, side 29)

Bemærk at han ikke siger noget om at naturlovene ikke kan eksistere hvis disse invarianser ikke eksisterede, men at vi i så fald ikke ville være i stand til at opdage dem.

De klassiske invarianser bruges ikke så ofte til at forudse fremtiden direkte, som til at teste om nye teorier er konsistente med disse invarianser, hvilket som ovenfor forklaret er en nødvendighed for fysiske teorier (Wigner, 1967, side 32).

For det enkelte menneske ville verden være meget forvirrende hvis alting ændrede sig med tid og sted, så det er ikke kun fysikken, men hele vores virkelighedsbillede som bygger på denne grundlæggende symmetri.

3.2.4 Symmetris status

Wigner har nogle klare meninger om symmetris status i fysikken, f.eks. siger han

> Invarians-princippet spiller både i klassisk mekanik og kvantemekanik en dobbelt rolle. For det første giver det en nødvendig betingelse som alle grundlæggende ligninger skal opfylde: Irrelevante begyndelsesbetingelser [absolut tid, retning og sted] må ikke optræde i resultatet af teorien. Dernæst hjælper invariansprincippet, når grundlæggende ligninger er givet, til løsning af disse gennem bevarelseslove og andre metoder. (Wigner, 1967, side 8)

Det Wigner kalder resultatet af en teori er de ligninger som beskriver teorien, og det er disse ligninger som ikke må afhænge af absolut tid og sted. Symmetri kan hjælpe ved løsning af forskellige problemer, f.eks. er der mange problemer som det er meget let at løse, hvis man har visse bevarelsessætninger. Derudover kan symmetri i ligninger gøre det lettere at løse dem.

Wigner mener, at man kan sammenligne sammenhængen mellem fysikkens love og virkeligheden på den ene side og sammenhængen mellem symmetri principper og fysikkens love på den anden. Om relationerne mellem fysikkens love og virkeligheden skriver han

> Hvis vi havde en komplet viden om alle hændelser i verden, til alle steder og til alle tider, ville der ikke være brug for fysikkens love. De matematiske relationer mellem tid og hændelse ville ikke give nogen ny viden hvis vi allerede kendte alle hændelser, men de ville måske give os en vis glæde og forundring. De vil også kunne bruges, hvis nogen kom med modstridende oplysninger om hændelserne, til effektivt at modbevise disse — under antagelse af vi har tiltro til at lovene er rigtige. (Wigner, 1967, side 16)

Man kan f.eks. forestille sig at man havde en stor "bog" hvor alt hvad der sker i verden er beskrevet til alle tider. I en sådan deterministisk verden ville det ikke have nogen praktisk betydning at opstille love for fysikken, f.eks. en naturlov for frit fald, da hver gang man gerne ville vide hvornår et givet legeme var på en given position, blot kunne slå op i bogen. I en sådan verden, ville det at finde naturlove stadig være en intellektuel udfordring, og disse love ville stadig kunne forklare hvorfor verden er som den er. Antag nu at vi mødte en person fra en anden del af verden med en anden "bog" som indeholder oplysninger om hændelser i verden der ikke stemmer overens med vores oplysninger. Med naturlove ville vi mere effektivt være i stand til at kunne tilbagevise denne persons oplysninger, fordi de ikke stemmer overens med disse naturlove.

Hvad angår relationerne mellem symmetri og naturlovene, skriver Wigner

> Hvis vi kender naturlovene, giver viden om den indre struktur af disse ikke nogen ny viden. Det kan måske være af en vis interesse at vide, at sammenhængen mellem hændelser som loven forudser er den samme ligegyldigt om hændelsen er observeret af en stillestående observatør eller en observatør i jævn bevægelse. Men alle sammenhænge mellem hændelser er allerede givet af lovene. ... Mere generelt, hvis vi kendte alle naturlovene, eller den "ultimative" naturlov, ville invarians egenskaber ikke give os nogen ny information. Man kunne måske, hvis vi har tiltro til invarians egenskaberne, benytte dem til at overbevise andre med et sæt naturlove som ikke passer — under antagelse af at vi tror på invariansprincippet. (Wigner, 1967, side 16-17)

Symmetrier er dermed en indre struktur af naturlovene på samme måde som naturlovene er en indre struktur af hændelserne; symmetrierne er ikke mål i sig selv, men naturlovene må ikke være i uoverensstemmelse med dem. Følgende skema gør måske sammenhængen lidt mere klar

Naturlove	$\leftrightarrow$	Forudsigelser om hændelser
Symmetri	$\leftrightarrow$	Naturlove

Alle forudsigelser om hændelser i naturen skal stemme overens med vores opfattelse af naturens love. På sammen måde skal alle naturlove stemme overens med vores opfattelse af de grundlæggende symmetrier i naturen.

Det ses, at Wigner mener, at symmetri er det grundlag som naturlovene bygger på, men samtidig er symmetri en underordnet egenskab ved naturlovene på samme måde som naturlovene er en underordnet egenskab ved hændelserne i naturen. Det er ikke naturlovene vi er interesseret i men deres forudsigelser af hændelser; tilsvarende er det ikke symmetrierne i verden som vi er interesseret i, men deres forudsigelser af naturlove.

Alt i alt er symmetri efter Wigners mening hele grundlaget for den moderne fysik, for det er symmetriens skyld at vi er i stand til ikke blot at registre hvad der sker, men rent faktisk forudse hvad der kommer til at ske. Samtidig er den type symmetri, Wigner taler om en meget grundlæggende symmetri, og derfor giver den ikke direkte nogle resultater. Accepterer man, at alle naturlove skal opfylde disse symmetrier, kan de bruges til at tilbagevise teorier som bryder med dem, og måske også give inspiration til hvordan nye teorier skal opbygges.

3.3 Benny Lautrup

Dette afsnit bygger på et interview med Benny Lautrup (Lautrup, 1998).

B. Lautrup er teoretisk fysiker ved Niels Bohr Institutet (KU), og har i perioden 1965-85 arbejdet inden for højenergifysik, og derefter har han i en 10 års periode arbejdet med neurale netværk. Han er nu tilbage i teoretisk fysik, men denne gang i en bredere forstand; han arbejder bl.a. med naturfilosofiske emner, og har fornyligt skrevet 2 artikler inden for naturfilosofi.

Som teoretisk fysiker har han beskæftiget sig med symmetri på flere forskellige måder. I dette interview-referat vil vi dog gengive hans overordnede tanker om symmetri i fysik.

3.3.1 Symmetri, fysik og naturen

Lautrup anvender samme definition af symmetri som vi arbejder med, nemlig at et system er symmetrisk under en transformation, hvis transformationen fører til, at systemet er uskelneligt fra det originale system.

Lautrup betragter symmetrier som det mest fundamentale niveau, vi kan beskrive naturen på; næsten alle vores naturlove kan postuleres som symmetrier under én eller anden gruppe. Dermed er symmetri afgørende på alle planer, men han tilføjer, at brudte symmetrier og skjulte symmetrier af nogle betragtes som vigtigere. Skjulte symmetrier er ikke selv-evidente i modsætning til f.eks. symmetrier i kontinuumsfysik.

Der er efter Lautrups mening ingen tvivl om, at det er noget ved naturen, som får symmetrier til at spille en så afgørende rolle i fysikken — han siger "Det er en meddelse fra naturen til os". På det makroskopiske plan er der ikke mange virkelige genstande, der er perfekt symmetriske. I den snavsede verden vi lever i, er der ingen perfekte symmetrier at se og vi bliver nødt til at idealisere os frem til symmetri. Når vi undersøger naturen på et dybere niveau, og undersøger de fundamentale egenskaber, så finder vi symmetrier. Han nævner at neutronstjerner og atomer er tilnærmelsesvise kuglesymmetriske. Symmetrier er egenskaber ved naturen, men vi beskriver dem i fysikken med et socialkonstrueret system—matematikken.

Lautrup mener, at alt den matematik som fysikken bruger er sprunget ud af fysikken. Matematikken er et endnu dybere udsagn om naturen end fysikken, et udsagn som ikke er afhængig af begyndelsesbetingelser og stofansamlinger, men som stadig er et udsagn om hvordan vores verden er struktureret. Både matematikkens og fysikkens tegn og notationer kan ses som sociale konstruktioner, men Lautrup mener ikke, at det er en social konstruktion, at matematikken kan sige noget om, hvordan naturen er.

3.3.2 Symmetris anvendelser

Lautrup fortæller, at symmetri er ét vigtigt redskab mange steder f.eks. for krystallografer og for Wigners arbejde med kvantemekanikken. Det var dog først i højenergifysikken, at man så den rigtige anvendelse af gruppeteori.

Lautrup mener godt at man kan se symmetribetragtninger som approximationer, men der er forskellige typer af forsimpling i de forskellig dele af fysikken. I kontinuumsfysik bruger man for det meste symmetribetragtninger til at simplificere løsningen af et problem, her kommer symmetrien helt naturlige af systemet makroskopiske form.

Som modsætning hertil kan man se på højenergifysik, hvor gruppeteoretiske betragtninger står først. Man postulerer, at visse symmetrier eksisterer for at finde relationer mellem det man beskæftiger sig med. Det er ikke umidelbart oplagt at symmetrierne skal være der, eller hvad de skal være; de er *opdaget* gennem et langt arbejde.

Selvom der i begge tilfælde er tale om at symmetribetragtningerne er forenklinger, er Lautrups pointe at symmetribetragtningerne har forskellig status i de to discipliner.

3.3.3 Egen brug af symmetri

Lautrup bruger symmetri hyppigt i sit arbejde, og han er meget bevidst om denne brug, både som underviser, og i andet videnskabeligt arbejde.

I forbindelse med undervisning er Lautrup ved at skrive en lærebog, der skal være en introduktion til kontinuums fysik. I denne proces er han meget bevidst om, at udpege symmetrier, når de er der.

3.3.4 Lautrups filosofiske ståsted

Efter Lautrups overbevisning er den natur, som vi taler om, primært det billede som vi får af naturen gennem sanserne. Men som teoretisk fysiker mener han også, at den abstrakte bearbejdning af naturlovene fører til forståelse.

Overvejelser om en underliggende "virkelig" natur kan ikke bruges til noget, da vi aldrig kan komme i kontakt med den, men at modellerne for virkeligheden repræsenterer en brugbar virkelighedsopfattelse.

På spørgsmålet om, hvorvidt den kvantemekaniske bølgefunktion eksisterer eller ej, er svaret "Nej", bølgefunktionen og dens kollaps er noget, der sker i det enkelte menneske.

3.4 Eigil Præstgaard

Dette afsnit bygger på et interview med Eigil Præstgaard (Præstgaard, 1998).

Eigil Præstgaard er ansat som professor på institut I (institut for biologi og kemi) på RUC. Hans arbejdsområde er statistisk-mekanisk beskrivelse af uordnede systemers dynamiske og statiske struktur. Dette interview-referat gengiver nogle af hans udtalelser vedrørende symmetri i fysik og kemi.

3.4.1 Anvendelser af symmetri

Der er mange kemikere, der bruger symmetri, og kemien er i den grad præget af symmetri. I den måde molekyler er opbygget på, spiller symmetri en vigtig rolle, men det er måske kun kvantekemikere og spektroskopikere, der omtaler det som symmetri.

Præstgaard benytter ikke direkte symmetri i sit arbejde, men det spiller en meget stor rolle for det, han beskæftiger sig med, som f.eks. faseovergange og faseomdannelser, der er karakteriseret ved et symmetribrud. Så man kan sige, at i den underliggende teori spiller symmetri en rolle. Ofte beskrives faseomdannelse ved en ændring af en ordens-parameter. Den kan gå fra at være 0, til at have en fast værdi. Det der sker, er måske lettest at se, ved at betragte et simpelt magnetisk system bestående af en mængde magneter. Er systemet over en vis temperatur, vil ensretningen af de enkelte små magneter være ukoordineret. Hvis man sætter et ydre felt på, vil ensretningen være kontinuert afhængig af hvor stort felt man sætter på, og uden et felt, er der ikke nogen total magnetisering. Hvis systemet kommer under en vis temperatur, sker der en symmetri-ændring, og i stedet for et uordnet system, fremkommer der et ordnet system. Der er tale om et symmetribrud. Noget tilsvarende sker når en væske udkrystalliserer, men det kan det være vanskeligere at se, hvad der sker med symmetrien, fordi det er et kontinuert system.

På det mere operationelle niveau spiller symmetri også en rolle. Specielt hvis man beskæftiger sig med Ising-systemer. Er der eksempelvis i et Ising-system en tilstand, man har valgt at kalde spin up, skal der være en helt symmetrisk tilstand, man kalder spin down. Disse symmetriforhold kan man bruge i meget udstrakt grad.

3.4.2 Symmetris status

Ifølge Præstgaard er symmetri en betingelse, der skal opfyldes, for sådan *er* naturen. Det er den underliggende fysik, og fysikken er, i dag, i meget høj grad karakteriseret ved symmetribetragtninger. Meget af moderne fundamentalfysik består i, at til enhver symmetri, hører der en bevaret størrelse.

Det er karakteristisk, at beskrivelsen af faseovergange i de sidste 20 år er gået mod at blive en beskrivelse af symmetribrud. Man koncentrerer sig om symmetribrud som det underliggende og fundamentale. Der er situationer, hvor det er meget svært at se, hvordan symmetri spiller ind. Hvis man beskæftiger sig med meget komplicerede systemer, som f.eks. omdannelse i membraner og lignende, så prøver man mange gange at fremstille en simpel model ved brug af symmetriantagelser.

Symmetri er ikke en antagelse, der kan sammenlignes med f.eks. linearitet. Enten er der en symmetri eller også er der ikke en symmetri. For 20 år siden, var der en kvantekemiker, der regnede på molekyler, inden man havde de store regnemaskiner som man har i dag. Som udgangspunkt for beregningen gættede man dengang på bølgefunktioner. Der var så denne kvantekemiker, som foreslog en metode, der inddrog en bølgefunktion, der kun var symmetrisk til første orden. Det bragte vild opstandelse, fordi kolleger mente, at der er ikke nogen vej udenom, enten er en bestemt symmetri opfyldt, eller også er den ikke.

3.4.3 Opdaget eller opfundet?

Med den teoribygning der eksisterer i dag, fremkommer symmetri, og den er ikke startet med en symmetribetragtning. Man havde beskæftiget sig med faseovergange i mange år, før det blev klart, at der var tale om et symmetribrud. I dette tilfælde er symmetrien opdaget indenfor den eksisterende teori. Men der er en tilbøjelighed til, at når man i dag formulerer de fundamentale love, indbygger man symmetri i dem fra starten. Det kan da godt være, at man kunne starte med at sige, at symmetri var fundamental, og så bygge fysikken op på basis af det. Men udviklingen viser snarere, at det er en opdagelse.

Kapitel 4

Cases

Efter gennemgangen af forskellige naturvidenskabsmænds mening om symmetri i fysik er det blevet tid til at se på fire konkrete anvendelser af symmetribetragtninger i fysik.

4.1 Symmetri og bevarede størrelser i klassisk mekanik

I klassisk mekanik kan man i overensstemmelse med Noethers sætning (se afsnit 2.3) vise at en kontinuert symmetri svarer til, at en størrelse er bevaret.

Dette gøres lettest i Lagrange-formalismen, som vi vil starte med at give en indføring til. Efter dette giver vi tre konkrete eksempler på sætningens anvendelse.

Dette afsnit bygger, hvor ikke andet er opgivet, på Symon (1972).

4.1.1 Generaliserede koordinater

Generelt kan et system af N partikler beskrives ved $3N$ koordinater, normalt et sæt af x, y, z koordinater pr. partikel. I stedet for normale cartesiske koordinater kan man vælge $3N$ andre koordinater som kan udtrykkes ved følgende relationer

$$\begin{aligned}
q_1 &= q_1(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \ldots, x_N, y_N, z_N, t) \\
q_2 &= q_2(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \ldots, x_N, y_N, z_N, t) \\
&\vdots \\
q_{3N} &= q_{3N}(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \ldots, x_N, y_N, z_N, t)
\end{aligned} \tag{4.1.1}$$

De generaliserede koordinater betegnes typisk med $q_1, \ldots, q_k$; bemærk at de kan afhænge af tiden hvis koordinatsystemet bevæger sig.

Då de generaliserede koordinater beskriver hele systemet er det også muligt at beskrive de cartesiske ved de generaliserede koordinater

$$\begin{aligned} x_1 &= x_1(q_1, \ldots, q_{3N}, t) \\ y_1 &= y_1(q_1, \ldots, q_{3N}, t) \\ &\vdots \\ z_N &= z_N(q_1, \ldots, q_{3N}, t) \end{aligned} \tag{4.1.2}$$

Hvis man har er system hvor de enkelte partikler ikke kan bevæge sig frit i forhold til hinanden, kan man reducere antallet af koordinater. Er der f.eks. c uafhængige ***bånd*** på et givent system, kan man udtrykke disse bånd som c relationer mellem koordinaterne:

$$\begin{aligned} h_1(x_1, y_1, \ldots, z_N, t) &= a_1 \\ h_2(x_1, y_1, \ldots, z_N, t) &= a_2 \\ &\vdots \\ h_c(x_1, y_1, \ldots, z_N, t) &= a_c \end{aligned}$$

Man har da et system som siges at have $f = 3N - c$ frihedsgrader, og antallet af generaliserede koordinater kan reduceres til $3N - c$, da disse sammen med de c bånd i alt giver de $3N$ koordinater som der skal til en beskrivelse af hele systemet.

F.eks. kan et stift legeme beskrives ved 6 koordinater i stedet for 3 for hver partikel.

Man definerer derefter analogt til normal hastighed den generaliserede hastighed ($\dot{q}_k$) hørende til den k'te generaliserede koordinat som

$$\dot{q}_k = \frac{dq_k}{dt}$$

Herefter kan den kinetiske energi T beregnes som funktion af de generaliserede hastigheder. Dette gøres ved at beregne de cartesiske hastigheder som funktion af de generaliserede koordinater ved at differentiere ligningssystemet 4.1.2, og derefter benytte udtrykket

$$T = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m_i (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2 + \dot{z}_i^2) \tag{4.1.3}$$

for den kinetiske energi.

Symon (1972) viser at dette udtryk kan omskrives til

$$T = \sum_{k=1}^{3N} \sum_{l=1}^{3N} \frac{1}{2} A_{kl} \dot{q}_k \dot{q}_l + \sum_{k=1}^{3N} B_k \dot{q}_k + T_0$$

hvor A_{kl}, B_k, T_0 er funktioner af de generaliserede koordinater, og evt. også af tiden hvis der er tale om et koordinatsystem i bevægelse.

Hvis det generaliserede koordinatsystem ikke er tidsafhængigt, svarende til at t ikke indgår i ligning 4.1.1, vil B_k og T_0 være nul, og dermed vil T være på en kvadratisk form i de generaliserede hastigheder, hvilket vi senere skal udnytte.

Den generaliserede impuls kan derefter defineres som[1]

$$p_k = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} \tag{4.1.4}$$

Man skal bemærke at p_k både kan betegne impuls og impulsmoment, hvis q_k er en afstandskoordinat så er p_k impuls, og hvis q_k er en vinkelkoordinat så er p_k impulsmoment.

Hvis den potentielle energi, V, kan beskrives som en funktion af de generaliserede koordinater, kan man definere den generaliserede kraft som

$$Q_k = -\frac{\partial V}{\partial q_k} \tag{4.1.5}$$

Dette er igen analogt til den *normale* definition af potentiel energi i en dimension (Christiansen et al., 1990, side 4-7)

$$\begin{aligned} F dx &= -dE_{pot} \\ F &= \frac{-dE_{pot}}{dx} \end{aligned}$$

4.1.2 Lagranges ligning

For at kunne udnytte disse nye generaliserede koordinater, skal vi have en differentialligning som svarer til Newtons 2. lov. Ud fra ligning 4.1.4 fås et udtryk for ændringen af impuls pr. tid,

$$\frac{dp_k}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k}\right) \qquad k = 1, \ldots, f \tag{4.1.6}$$

Dette udtryk kan bruges til, gennem er lang række omskrivninger, at komme frem til

$$\frac{dp_k}{dt} = Q_k + \frac{\partial T}{\partial q_k}, \qquad k = 1, \ldots, f. \tag{4.1.7}$$

Dette udtryk ligner det normale udtryk for kraften i Newtons 2. lov i et almindeligt koordinatsystem, men der er et ekstra led — en "fiktiv" kraft.

Normalt omskrives ligning 4.1.6 og 4.1.7 til

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_k} = Q_k, \qquad k = 1, \ldots, f \tag{4.1.8}$$

[1] I et ét-partikelsystem beskrevet i cartesiske koordinater svarer ligning 4.1.4 til at $p = \frac{d\frac{1}{2}mv^2}{dv} = mv$

Hvis kraften kan afledes af en potentiel energi (ligning 4.1.5), defineres Lagrangefunktionen som

$$L(q_1, \ldots, q_{3N}; \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_{3N}; t) = T - V.$$

Husk at T afhænger både af $q_1, \ldots, q_f$ og $\dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_f$, mens V kun afhænger af $q_1, \ldots, q_f$, og evt. tiden. Differentieres Lagrangefunktionen med hensyn til en generaliseret hastighed, f.eks. $\dot{q}_k$, er det derfor kun T som giver et bidrag. Differentieres den derimod med hensyn til en generaliseret koordinat, giver både T og V et bidrag. Man får

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} \tag{4.1.9}$$

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} = \frac{\partial T}{\partial q_k} - \frac{\partial V}{\partial q_k} = \frac{\partial T}{\partial q_k} + Q_k \tag{4.1.10}$$

Dvs. ligning 4.1.8 kan skrives som,

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \qquad k = 1, \ldots, f \tag{4.1.11}$$

denne ligning er normalt den, der kaldes Lagranges ligning, og benyttes til at beskrive systemet.

4.1.3 Konstanter og symmetri

Hvis der er én af de generaliserede variable som L ikke afhænger af, lad os sige q_l, siges q_l at være en ignorabel koordinat eller en cyklisk koordinat. Den tilhørende Lagrange-ligning reduceres da til

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} = 0$$

hvilket umiddelbart kan løses til, (husk ligning 4.1.4 og 4.1.9)

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} = p_l = \text{en konstant.}$$

Dette kan bruges til at forenkle løsningen af det totale system af Lagrange-ligninger, hvilket dog ikke er vores mål.

Hvis en koordinat er cyklisk, afhænger ligningerne ikke af denne koordinat, så en vilkårlig ændring af koordinaten vil ikke ændre noget i ligningerne. Dette betyder, at ligningerne er invariante under transformationer af denne koordinat, og systemet er derfor symmetrisk med hensyn til denne koordinattransformation.

Som det fremgår, svarer en cyklisk koordinat q_l til en bevaret størrelse p_l, og da en cyklisk koordinat svarer til en symmetri, så er dette et eksempel på Noethers sætning. Vi vil nu komme med tre eksempler hvor man finder de klassiske bevarelseslove.

4.1.4 Eksempler

Impulsmoment

Det første eksempel på en anvendelse af sætningen om at en cyklisk koordinat giver en bevaret størrelse, angår en partikel som bevæger sig i et plan og er påvirket af en centralkraft. En centralkraft er en kraft som er rettet mod eller væk fra et fast punkt O og hvis størrelse kun er en funktion af afstanden til O, som betegnes r. Fordi bevægelsen foregår i et plan, kan vi udtrykke partiklens position ved afstanden til det faste punkt O, r, og en vinkel θ, dvs. i polære koordinater. Det kan vises at den potentielle energi, V, kun afhænger af r for en centralkraft. Ligning 4.1.3 kan benyttes til at vise at T ligeledes ikke afhænger af θ. Da bevægelsen foregår i et plan, er z konstant, og dermed er $\dot{z} = 0$. Der gælder følgende relationer mellem de cartesiske og de polære koordinater $x = r\cos\theta$ og $y = r\sin\theta$ og derfor kan T skrives som

$$
\begin{aligned}
T &= \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) && (4.1.12)\\
&= \frac{1}{2}m(\dot{r}^2\cos^2\theta + \dot{r}^2\sin^2\theta + r^2(\sin^2\theta)\dot{\theta}^2 + r^2(\cos^2\theta)\dot{\theta}^2) && (4.1.13)\\
&= \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 && (4.1.14)
\end{aligned}
$$

Så T er uafhængig af θ. Vi har da at

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} = 0$$

og dermed

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = p_\theta = \text{en konstant}$$

hvor p_θ er impulsmomentet omkring centrum, og dermed er der er impulsmomentbevarelse omkring den valgte akse.

En planet der bevæger sig omkring solen, er påvirket af en centralkraft og bevæger sig i et plan. Det falder derfor ind under dette eksempel, og vi ser at vi dermed har vist Keplers anden lov, som essentielt er impulsmomentbevarelse. Beviset for Keplers anden lov i Newtonsk mekanik er ikke helt så gennemskueligt som ovenstående bevis, men det kan dog gennemføres uden brug af Lagranges formalisme (Ohanian, 1989).

Impuls

Hvis man beskriver et system ved koordinaterne hørende til massemidtpunktet X, Y, Z, og de resterende koordinater relativt til massemidtpunktet, og antager at der ikke virker nogen ydre kraft. Da vil der ikke være nogen ændring i V

eller T hvis vi flytter hele systemet uden at ændre de relative positioner og hastigheder af partiklerne, får vi f.eks. i x-retningen at der gælder

$$\frac{\partial L}{\partial X} = 0$$

og dermed at p_X er en konstant. Her er p_X den totale impuls i x-retningen, tilsvarende for de resterende retninger, og den totale impuls er bevaret.

Energi

Første hovedsætning i termodynamik, og en vigtig sætning i klassisk mekanik, er energibevarelsessætningen. Denne kan ligeledes vises ud fra symmetribetragtninger, hvilket dog kræver at vi først har et udtryk for den samlede mekaniske energi (E_{mek}).

Hvis man benytter et fast koordinatsystem, ved vi fra før, at den kinetiske energi bliver en kvadratisk funktion af de generaliserede hastigheder. Ifølge Eulers sætning gælder følgende

$$\sum_{k=1}^{f} \dot{q}_k \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} = 2T$$

og da

$$L = T - V$$

og fordi V er uafhængig af tiden, har vi at

$$\sum_{k=1}^{f} \dot{q}_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - L = T + V = E_{mek}$$

Det kan ved differentiation vises at

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_{k=1}^{f} \dot{q}_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - L\right) = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

Så hvis L ikke afhænger af tiden, når vi alt i alt frem til at

$$\sum_{k=1}^{f} \dot{q}_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - L = E_{mek} = \text{en konstant}$$

Kort sagt har vi vist at der gælder energibevarelse, når L ikke afhænger af tiden.

4.1.5 Opsamling

Vi har set at hvis man på en eller anden måde er i stand til at levere en cyklisk koordinat for et system, dvs. en koordinat som Lagrangefunktionen ikke afhænger af, vil den tilhørende generaliserede impuls være en bevaret størrelse. At et system har en cyklisk koordinat, medfører at systemet er invariant med hensyn til denne koordinat, dvs. systemet besidder en symmetri.

Alt i alt kan man se, at symmetri spiller en vis rolle i den klassiske mekanik indenfor Lagranges formalisme. Man kan dog komme frem til de samme resultater uden brug af Lagranges ligninger, hvorved symmetri-argumenterne ikke fremkommer på samme måde. Når man først har set resultaterne bliver det forholdsvist let at forudsige bevarede størrelser ud fra det fysiske systems symmetriske egenskaber.

4.2 Rotationel symmetri i kvantemekanikken

Denne case beskæftiger sig med et eksempel på anvendelse af betragtninger vedrørende kontinuert symmetri og bevarede størrelser sådan som det formuleres i kvantemekanikken. Efter en kort introduktion til kvantemekanik finder vi et udtryk for den operator, der beskriver rotation af koordinater omkring z-aksen R_z. Vi anvender Baker-Hausdorffs formel til at vise, at Hamiltonoperatoren og operatoren for impulsmomentet kommuterer, hvilket er kvantemekanikkens måde at formulere det forhold, at en størrelse er bevaret.

4.2.1 Introduktion til kvantemekanikken

Kvantemekaniske problemer går f.eks. ud på at finde hvilke partikeltilstande der er stabile, givet at partiklen befinder sig i et givent potential. Potentialet beskrives i kvantemekanikken med Hamiltonoperatoren, H og problemet med at bestemme stabile tilstande kaldes at bestemme egentilstande for H. Andre kvantemekaniske problemer handler om at bestemme størrelsen af en bestemt parameter, f.eks. impulsen af en partikel. Dette problem løses ved at lade en operator virke på partiklens bølgefunktion, f.eks. er den operator, der svarer til impulsen p givet ved:

$$p = \frac{\hbar}{i}\nabla \tag{4.2.1}$$

Alle operatorer i kvantemekanikken er ifølge Griffiths (1995) lineære og hermitiske. Man opererer med *forventningsværdien* af disse parametre. En operator Q har en forventningsværdi, der symboliseres ved følgende:

$$< Q > = < \Psi \mid Q\Psi > \tag{4.2.2}$$

Der henvises til Griffiths (1995) for mere udførlig forklaring; dog gives et eksempel på, hvad forventningsværdien af impulsen af en éndimensionalbølgefunktion er:

$$< p_x > = < \Psi(x) | \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} >$$

Vi skal her dog ikke beskæftige os med en løsning af ovenstående type problemer — i stedet skal vi se, hvorledes man kan slutte, at impulsmomentet er en bevaret størrelse når det potential, partiklen befinder sig i, er rotationssymmetrisk.

4.2.2 Impulsmomentet

Impulsmomentet benævnt, L, kan i den klassiske mekanik opfattes som en rotationel analog til impulsen. Det defineres med hensyn til et omdrejningspunkt (f.eks. Origo), og som krydsproduktet af retningsvektoren fra omdrejningspunktet og impulsvektoren (Griffiths, 1995):

$$L_o = r_o \times p \tag{4.2.3}$$

I samme Griffiths (1995) er den kvantemekaniske operator, der svarer til z-komposanten af impulsmomentet angivet

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{4.2.4}$$

4.2.3 Hamiltonoperatoren

Hvor ovenstående impulsoperator måler impulsen af en partikel, og impulsmomentoperatoren måler en partikels impulsmoment, måler Hamiltonoperatoren partiklens totale energi. Hamiltonoperatoren består følgelig af to led, ét der måler kinetisk energi, og ét der måler potentiel energi: $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z)$. I første led indgår (x,y,z) symmetrisk, og under særlige omstændigheder indgår de også symmetrisk i det andet led. Man kunne f.eks. forestille sig, at dette var tilfældet hvis V var et Coulomb'sk potentiale, $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}$ Her indgår (x,y,z) symmetrisk, idet $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$. Under disse betingelser vil vi ikke kunne skelne virkningen af Hamiltonoperatoren før (benævnt H) fra Hamiltonoperatoren efter rotation (benævnt H_R). Hvad dette får af konsekvenser for impulsmomentet, skal vi se på i det efterfølgende.

4.2.4 Operatoren for rotation om z-aksen

Vi definerer en rotationsoperator R på følgende måde (Arfken & Weber, 1995):

$$Rf(x,y,z) = f'(x,y,z) = f(x',y',z') \tag{4.2.5}$$

Lader vi R virke på testfunktionen f, får vi en ny funktion, f', der er numerisk lig med funktionsværdien af de roterede koordinater, $f(x',y',z')$, hvilket er indholdet af ligning 4.2.5.

Vi vil i denne sammenhæng se nærmere på operatoren for den infinitesimale rotation om z-aksen kaldet $R_z(\delta\phi)$. Ifølge Arfken & Weber (1995) kan vi udtrykke virkningen af $R_z(\delta\phi)$ på testfunktionen f på nedenstående facon:

$$R_z(\delta\phi)f(x,y,z) = f(x + y\delta\phi, y - x\delta\phi, z) \tag{4.2.6}$$

Vi rækkeudvikler højresiden af ligning 4.2.6 til første orden i $\delta\phi$, og får:

$$R_z(\delta\phi)f(x,y,z) = f(x,y,z) - \delta\phi\left\{x\frac{\partial f}{\partial y} - y\frac{\partial f}{\partial x}\right\} \tag{4.2.7}$$

Vi identificerer indmaden af den krøllede parentes i ligning 4.2.7s højreside som et udtryk proportionalt med L_z defineret i ligning 4.2.4.

Sætter vi $\hbar = 1$ kan vi omskrive ligning 4.2.7 til:

$$R_z(\delta\phi)f(x,y,z) = (1 - iL_z\delta\phi)f(x,y,z) \tag{4.2.8}$$

Lader vi R_z virke to gange på testfunktionen f, er resultatet summen af de to koordinat-rotationer:

$$R_z(\delta\phi + \phi)f(x,y,z) = R_z(\delta\phi)R_z(\phi)f(x,y,z) = (1 - iL_z\delta\phi)R_z(\phi)f(x,y,z) \tag{4.2.9}$$

Vi ganger parentesen af ligning 4.2.9s højreside ud,

$$(R_z(\delta\phi + \phi) - R_z(\phi))\, f(x,y,z) = -iL_z\delta\phi R_z(\phi)f(x,y,z) \tag{4.2.10}$$

Dividerer vi højre og venstre side af ligning 4.2.10 med $\delta\phi$, og dropper vi testfunktionen, får vi følgende operatorligning for R_z:

$$\frac{(R_z(\delta\phi + \phi) - R_z(\phi))}{\delta\phi} = -iL_zR_z(\phi) \tag{4.2.11}$$

Ligning 4.2.11 er identisk med eksponentialfunktionens funktionalligning, for $\delta\phi$ gående mod nul. Vi kan indse, at $R_z(\phi)$ kan skrives på følgende eksponentielle form:

$$R_z(\phi) = \exp(-i\phi L_z) \tag{4.2.12}$$

4.2.5 H og L_z kommuterer

Vi skal herefter udnytte, at vi har kunnet omskrive R_z til et eksponentielt udtryk. Vi forestiller os at Hamiltonoperatoren er invariant under rotation om z-aksen, dette kan vi ifølge Arfken & Weber (1995) beskrive ved:

$$\begin{aligned} H &= H_R \Rightarrow \\ H &= R_zHR_z^{-1} \Rightarrow \\ H &= \exp(-iL_z\phi)H\exp(iL_z\phi) \end{aligned}$$

For at omskrive benyttes Baker-Hausdorffs formel (Arfken & Weber, 1995);

$$\exp(iG)A\exp(-iG) = A + [iG,A] + \frac{1}{2}[iG,[iG,A]] + \dots \tag{4.2.13}$$

I Baker-Hausdorffs formel 4.2.13 indgår kantede parenteser, der symboliserer kommutatorer som beregnes som $[G,A] = GA - AG$, hvis $[G,A] = 0$ siges A og G at kommuterer.

$$H = H + [-i\phi L_z, H] + \frac{1}{2}[i\phi L_z,[i\phi L_z,H]] + \dots \Rightarrow \tag{4.2.14}$$

$$H = H - i\phi[L_z,H] + \phi^2[L_z,\frac{[L_z,H]}{2}] + \dots \Rightarrow \tag{4.2.15}$$

$$0 = 0 - i\phi[L_z,H] + \phi^2[L_z,\frac{[L_z,H]}{2}] + \dots \tag{4.2.16}$$

Omskrivningen af 4.2.14 baserer sig på, at såvel H som L_z er lineære operatorer (Griffiths, 1995). I omskrivningen af ligning 4.2.15 har vi blot subtraheret H på begge sider af lighedstegnet. Dividerer vi højre og venstre side af ligning 4.2.16 med ϕ, fås:

$$0 = 0 - i[L_z, H] + \phi[L_z \frac{[L_z, H]}{2}] + \dots \qquad (4.2.17)$$

Ovenstående ligning 4.2.17 skal gælde for enhver værdi af ϕ. Det kan *kun* være opfyldt, såfremt kommutatoren $[L_z, H]$ er nul, hvilket betyder, at de to operatorer kommuterer.

4.2.6 Impulsmomentet er bevaret, fordi $[H, S_z] = 0$

I den foregående case så vi, at man i klassisk mekanik kan formulere at en størrelse —i form af en generaliseret impuls— er bevaret, hvis den tilhørende generaliserede koordinat er cyklisk. Kvantemekanikken formulerer noget tilsvarende ved brug af anden formalisme. Der gælder generelt i kvantemekanikken, at hvis en operator kommuterer med Hamiltonoperatoren, er den fysiske størrelse, der svarer til denne operator en bevaret størrelse. Dette vil vi vise i det følgende.

At en størrelse er bevaret, betyder at forventningsværdien af denne størrelse ikke ændrer sig i tid. Derfor kunne vi differentiere ligning 4.2.2 implicit med hensyn til tiden:

$$\frac{d}{dt} < Q > = \frac{d}{dt}\langle \Psi \mid Q\Psi \rangle \Rightarrow \qquad (4.2.18)$$

$$\frac{d}{dt} < Q > = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} \middle| Q\Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial Q}{\partial t}\Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| Q\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle \qquad (4.2.19)$$

Schrödingerligningen siger, at

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \qquad (4.2.20)$$

(Hvor H er Hamitonoperatoren, der er hermitisk). Dette kan vi indsætte i ligning 4.2.19:

$$\frac{d}{dt} < Q >= -\frac{1}{i\hbar}\langle H\Psi \mid Q\Psi \rangle + \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi \mid QH\Psi \rangle \qquad (4.2.21)$$

Vi udnytter nu, at H er hermitisk, hvilket vil sige at (Griffiths, 1995)

$$< H\Psi \mid Q\Psi >=< \Psi \mid HQ\Psi > \qquad (4.2.22)$$

og får:

$$\frac{d}{dt} < Q >= \frac{i}{\hbar}\langle [H, Q] \rangle + \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle \qquad (4.2.23)$$

Denne ligning 4.2.23 er vigtig, fordi i de fleste tilfælde afhænger operatorerne ikke eksplicit af t, hvorved sidste led forsvinder. Hvis kommutatoren $[H, Q] = 0$, er forventningsværdien $< [H, Q] >= 0$, og dermed må venstresiden af ligning 4.2.23 også være nul, hvilket svarer til, at forventningsværdien af Q ikke ændrer sig, og Q er følgelig en bevaret størrelse.

4.2.7 Opsamling og anvendelser

Vi har set, at operatoren for koordinatrotation om z-aksen er intimt knyttet til operatoren for z-kompossanten for impulsmomentet,

$$R_z(\phi) = \exp(-i\phi L_z)$$

Når Hamiltonoperatoren er invariant under R_z fandt vi, at $[H, L_z] = 0$, hvilket har to konsekvenser.

1. z-kompossanten af impulsmomentet er en bevaret størrelse,
2. De to operatorer har et fælles sæt af egentilstande.

Første punkt har som konsekvens at der findes metastabile tilstande f.eks. for hydrogenatomet (Griffiths, 1995) og udvalgsregler. Man kan vise, at Bohrs postulat om impulsmomentets kvantisering til dels er en følge af impulsmomentbevarelse (Christiansen, 1998). Andet punkt bruger man som hjælp i løsningen af Schrödingerligningen, idet egentilstande for H også skal være egentilstande for L_z.

4.3 Molekylespektroskopi

Denne case beskæftiger sig med en anvendelse af diskret symmetri i forbindelse med infrarød (IR) absorptionsspektroskopi på molekyler. Afsnittet baserer sig, hvor intet andet er angivet på en notesamling fra et kursus i "kemisk fysik" (Spanget-Larsen, 1996). Af hensyn til vores målgruppe har vi valgt at anvende mindre matematisk stringens, end eksempelvis Spanget-Larsen (1996) eller Boardman et al. (1973) benytter i deres symmetribetragtninger i forbindelse med IR-spektroskopi. Formålet med symmetribetragtningerne er, at forudsige nogle karakteristika ved gassen ethylens IR-absorptionsspektrum.

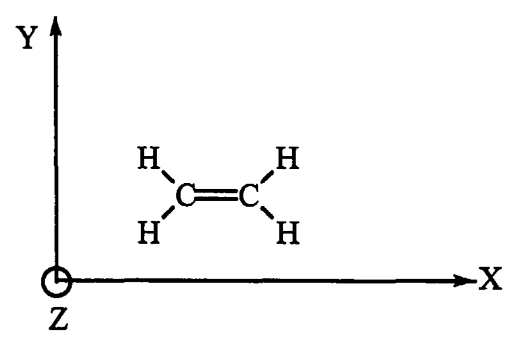
Som optakt introduceres begrebet normalvibrationer og punktgruppen D_{2h}s karaktertabel og symmetrioperationer. Dernæst følger nogle semi-klassiske overvejelser om molekylets dipolmoment, og afsnittet slutter med at svare på spørgsmålet om, hvor mange absorptionstoppe i ethylens IR-spektrum, der kan tilordnes C-H strækninger.

4.3.1 Ethylen

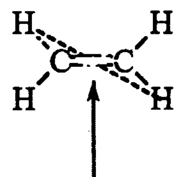
Molekylet ethylen er plant, og består af 4 hydrogen- og 2 carbonatomer forbundet som angivet på figur 4.1. Bindingerne imellem atomerne er fleksible (fjederagtige), og molekylet kan derfor svinge harmonisk.

4.3.2 Normalvibrationer

Ikke alle svingninger er mulige for ethylenmolekylet. Eksempelvis er den svingning som består i, at et enligt hydrogenatom "vinker", mens resten af molekylet er i ro, ikke en tilladt svingning, for den er ustabil. Man kan forestille sig, at ethylenmolekylet ved en kollision får sat et enligt hydrogenatom i gang med at



Figur 4.1 Figuren er en tegning af ethylenmolekylet.



Figur 4.2 Ethylenmolekylets inversionspunkt ligger midt mellem de to C-atomer.

"vinke", men svingningen vil hurtigt forplante sig til resten af molekylet, der herefter vil foretage en samordnet bevægelse. Sådan en samordnet bevægelse kaldes en normalvibration.

4.3.3 Molekylets symmetri bestemmer normalvibrationernes symmetri

Ved betragtning af figur 4.1 eller en molekylemodel kan man overbevise sig om, at ethylen ud over at være invariant under enhedsoperatoren også er invariant under tre rotationsakser, ét inversionspunkt, og tre spejlplaner.

Tre rotationsakser (C_2)

En rotationsakse er en akse, der går gennem molekylet, og ved passende rotation omkring denne akse går molekylet over i sig selv, hvormed menes, at molekylet er uskelneligt før og efter rotationen. Hvis man tager y-aksen i figur 4.1, og placerer den således, at den går igennem dobbeltbindingen mellem de to C-atomer, kan man ved rotation 180^o omkring y-aksen få molekylet til at gå over i sig selv. Dette kalder man en C_2-akse, hvor C er det generelle betegnelse for en diskret rotation og 2-tallet angiver, at man i løbet af en rotation på 360^o to gange opnår, at molekylet går over i sig selv.[2] Man kan gøre det samme med z- og x-aksen, og overbevise sig selv om, at de også er C_2-akser.

Ét inversionspunkt (i)

Et inversionspunkt er et punkt på molekylet, hvor man kan føre alle molekylets atomer igennem, og opnå, at molekylet går over i sig selv (se figur 4.2).

[2]For en uddybende beskrivelse af navngivningskonventionen henvises til (Boardman et al., 1973).

Tre spejlplaner (σ_v)

Et spejlplan betegnes σ_v, og udspændes af to akser, f.eks. udspænder x- og y-aksen molekyleplanet $\sigma_v(xy)$. Ved spejling af ethylenmolekylet i $\sigma_v(xy)$, går molekylet over i sig selv. Ved at flytte molekylets inversionspunkt ned til koordinatsystemets centrum, ville man kunne overbevise sig selv om, at $\sigma_v(xz)$ og $\sigma_v(yz)$ på lignende vis er spejlplaner.

Molekylets punktgruppe

Når man har fundet molekylets symmetrier, kan man finde den punktgruppe det tilhører, ved opslag i tabelværk (Atkins, 1994). En punktgruppe beskrives ved en relation mellem symmetrioperationer og symmetri-typer, og punktgruppen angives som regel på tabelform. For at forstå casens symmetribetragtning er det ikke nødvendigt at vide, hvad en karakter eller en karaktertabel er. En nærmere forklaring af hvad disse begreber dækker over, kræver en større indsigt i gruppeteori, og falder derfor uden for denne rapports rammer, men kan findes i de fleste grundbøger i gruppeteori, se f.eks. Boardman et al. (1973).

Nedenstående karaktertabel er gengivet fra Atkins (1994), side C34

	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma_v(xy)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	
A_g	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	(x^2),(y^2),(z^2)
B_{1g}	+1	+1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	(xy)
B_{2g}	+1	−1	+1	−1	+1	−1	+1	−1	(xz)
B_{3g}	+1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	(yz)
A_u	+1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	−1	
B_{1u}	+1	+1	−1	−1	−1	−1	+1	+1	(z)
B_{2u}	+1	−1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	(y)
B_{3u}	+1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	−1	(x)

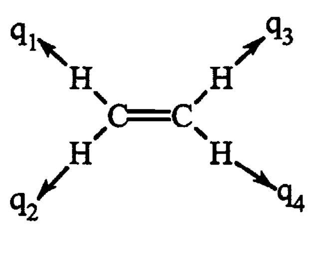
Tabel 1 Karaktertabellen for punktgruppen D_{2h} angiver, hvilken sammenhæng der er imellem symmetrioperationerne (øverste række) og symmetritypeme (første kolonne)

Første kolonne ($A_g, B_{1g} \ldots$) angiver de symmetrityper, der hører til punktgruppen kaldet D_{2h}, navngivningen er igen gruppeteoretisk, og derfor mindre vigtigt her. Øverste række angiver de symmetrioperationer, som hører til punktgruppen kaldet D_{2h}. Sidste kolonne angiver størrelser, der transformerer ligesom symmetritypeme. Selve skemaet angiver om en symmetritype er symmetrisk (+1) eller antisymmetrisk (−1) med hensyn til de til gruppen hørende symmetrioperationer (det er tallene, der kaldes karakterer). Som eksempel ser vi på symmetritypen B_{3u}. B_{3u} transformerer ligesom en vektor, der peger langs x-aksen (jvf. sidste kolonne). Lader vi enhedsoperationen operere på B_{3u}, er den uskelnelig før og efter,

$$EB_{3u} = B_{3u}$$

Roterer vi en vektor, der peger langs x 180° omkring z-aksen, vil vi få en vektor, der peger langs $-x$,

$$C_2(z)B_{3u} = -B_{3u}$$



Figur 4.3 Ethylenmolekylets C-H strækningskoordinater (q_1, q_2, q_3, q_4) har et positivt fortegn, når bindingen forlænges, og et negativt fortegn, når bindingen forkortes.

Tilsvarende for rotation omkring y, mens en rotation omkring x efterlader vektoren uændret,

$$C_2(x)B_{3u} = B_{3u}$$

Inverterer vi en vektor, der peger langs x, vil vi få en vektor, der peger langs $-x$,

$$iB_{3u} = -B_{3u}$$

Lader vi en vektor der peger langs x spejle i xy-planet, får vi den samme vektor,

$$\sigma(xy)B_{3u} = B_{3u}$$

Tilsvarende for en spejling i xz-planet, mens vektoren ved en spejling i yz-planet vil gå over i "minus" sig selv,

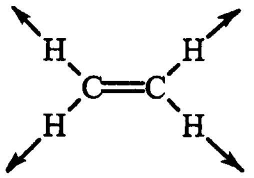
$$\sigma(yz)B_{3u} = -B_{3u}$$

Tabellen er en kortfattet form at angive relationerne mellem symmetritypeme og symmetrioperationerne.

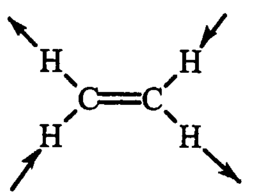
Strækninger af carbon-hydrogen bindinger

Molekylet kan bøje og strække på mange måder men vi vil her nøjes med at se på svingninger, der svarer til strækninger af bindinger mellem carbon og hydrogen. Til dette formål definerer vi nogle C-H strækningskoordinater, q_1, q_2, q_3 og q_4 som er angivet på figur 4.3. Det viser sig, at en normalvibration altid vil transformerer på samme måde som én af punktgruppens symmetrityper (Spanget-Larsen, 1996). Derfor er næste skridt at identificere normalvibrationerne, og at udlede hvordan de transformerer.

Man kan anskue C-H stræk kombinatorisk: Der er fire variable (q_1, q_2, q_3, q_4), der kan antage værdien $+1$ svarende til en strækning, eller -1 svarende til en forkortning, det giver som udgangspunkt $2^4 = 16$ muligheder. Flere af dem kan vi dog udelukke, eksempelvis den C-H strækningstype, som svarer til, at tre



Figur 4.4 Når alle C-H bindingerne forlænges og forkortes i takt, kaldes normalvibrationen for totalsymmetrisk, idet denne normalvibration transformerer som A_g.

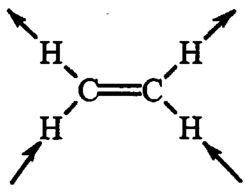


Figur 4.5 Figuren viser den normalvibration, der transformerer som B_{1g}.

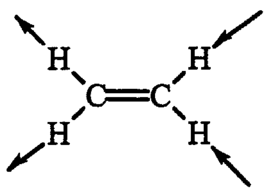
stræk er positive, og ét stræk er negativt, da disse er ustabile. Der findes ialt fire C-H strækningstyper der ikke transformerer som en eneste af symmetritypere i D_{2h}, og er derfor ikke normalvibrationer.

Vi finder, at der findes fire C-H strækningstyper, som er normalvibrationer. De har symmetrierne A_g, B_{1g}, B_{2u} og B_{3u}, og er angivet på figurerne 4.4, 4.5 og 4.6. Man gør som følger: På forhånd kan vi udelukke fire af symmetritypere, nemlig dem hvor der ændres fortegn i en spejling i xy-planet, fordi molekylet er symmetrisk i xy planet. Ifølge figur 4.3, kan der ikke være en spejling i xy-planet (se figur 4.1 for akserne), hvor strækningskoordinaterne ændrer fortegn.

Så skal vi kigge på, om strækningskoordinaterne går over i sig selv, når vi lader de forskellige symmetrioperationer virke på dem, idet vi tæller, hvor mange af strækningskoordinaterne, der bliver på samme plads efter operationen. Det betyder, at hvis vi f.eks. udfører en rotation, skal vi se hvor mange af strækningskoordinaterne, der ligger på samme position, som før vi udførte rotationen. Vi angiver følgende tabel for strækningskoordinaterne:



Figur 4.6 Denne normalvibration transformerer som B_{2u}, og svarer til, at molekylets dipolmoment oscillerer langs y-aksen på figur 4.1.



Figur 4.7 Illustration af den normalvibration, der svarer til symmetritypen B_{3u}, og får molekylets dipolmoment til at oscillere langs x-aksen på figur 4.1.

	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma_v(xy)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
A_g	4	0	0	0	0	4	0	0
B_{1g}	4	0	0	0	0	4	0	0
B_{2u}	4	0	0	0	0	4	0	0
B_{3u}	4	0	0	0	0	4	0	0

Tabel 2 Øverste række angiver som før symmetrioperationerne for punktgruppen D_{2h}, yderste venstre kolonne angiver den delmængde af D_{2h}-punktgruppens symmetrityper, som *ikke* skifter fortegn ved en spejling i xy-planet. Tallene i tabellen angiver, hvor mange strækningskoordinater der er invariante under de respektive symmetrioperationer.

I tabel 2 angiver første kolonne yderst til venstre en delmængde af D_{2h}-punktgruppens symmetrityper, nemlig dem som ikke skifter fortegn ved en spejling i xy-planet. Øverste række angiver alle symmetrioperationerne for punktgruppen D_{2h}. Tallene i tabellen angiver antallet af strækningskoordinater, som er invariante under de respektive symmetrioperationer.

Man kan så finde ud af hvilke normalvibrationer, der svarer til hvilke symmetrier. Fokusér eksempelvis[3] på q_1. Tabel 3 angiver, hvad strækningskoordinaten q_1 går over i når punktgruppens symmetrioperationer virker på den. Som fællesbetegnelse for den transformerede strækningskoordinat anvendes $R(q_1)$.

	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma_v(xy)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
$R(q_1)$	q_1	q_4	q_3	q_2	q_4	q_1	q_2	q_3

Tabel 3 En angivelse af, hvad strækningskoordinaten q_1 går over i, når D_{2h}-punktgruppens symmetrioperationer virker på q_1.

Det næste skridt er at finde strækningskoordinaterne for $R(q_1)$. Dette gøres ved at "gange" den netop fundne tabel (tabel 3), på karaktertabellen for punktgruppen (tabel 1). Resultatet er den såkaldte projektions-vektor, som er givet ved:

$$P_i = \frac{1}{8}\sum_R \{\chi(R_j)R(q_i)\} \tag{4.3.1}$$

Ligning 4.3.1 skal læses således: For hver af punktgruppens symmetrityper findes der en projektionsvektor, dvs. $i = \{A_g, B_{1g}, B_{2u}, B_{3u}\}$. Denne projektionsvektor fremkommer som en sum af en række produkter, der fremkommer ved følgende betragtning: Hver gang én af punktgruppens symmetrioperationer (R_j) virker på en strækningskoordinat, q_1, dannes den transformerede strækningskoordinat $(R_j(q_1))$. $R_j(q_1)$ ganges med den karakter $(\chi(R_j))$, som symmetritypen i har ifølge tabel 1. (Sammenlign eventuelt med eksemplet angivet nedenfor). Projektionsvektoren beskriver en normalsvingning (Spanget-Larsen, 1996).

Tabel 4 viser resultatet:

[3] Resultatet bliver det samme hvis en anden strækningskoordinat vælges.

	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma_v(xy)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
A_g	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
B_{1g}	+1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	−1
B_{2u}	+1	−1	−1	−1	−1	+1	−1	+1
B_{3u}	+1	−1	+1	−1	−1	+1	+1	−1
$R(q_1)$	q_1	q_4	q_3	q_2	q_4	q_1	q_2	q_3

$P_{A_g}(q_1)$	$\frac{1}{8}(q_1 + q_4 + q_3 + q_2 + q_4 + q_1 + q_2 + q_3) = \frac{1}{4}(q_1 + q_2 + q_3 + q_4)$
$P_{B_{1g}}(q_1)$	$\frac{1}{8}(q_1 + q_4 - q_3 - q_2 + q_4 + q_1 - q_2 - q_3) = \frac{1}{4}(q_1 - q_2 - q_3 + q_4)$
$P_{B_{2u}}(q_1)$	$\frac{1}{8}(q_1 - q_4 + q_3 - q_2 - q_4 + q_1 - q_2 + q_3) = \frac{1}{4}(q_1 - q_2 + q_3 - q_4)$
$P_{B_{3u}}(q_1)$	$\frac{1}{8}(q_1 - q_4 - q_3 + q_2 - q_4 + q_1 + q_2 - q_3) = \frac{1}{4}(q_1 + q_2 - q_3 - q_4)$

Eksempelvis kan vi finde projektionsvektoren $P_{B_{3u}}(q_1)$ til at være givet ved en sum af følgende:

$+1(q_1)$, fordi karakteren for enhedsoperationen E er $+1$.
$-1(q_1)$, fordi karakteren for rotation om z er -1.
$+1(q_1)$, fordi karakteren for rotation om y er $+1$.
$-1(q_1)$, fordi karakteren for rotation om x er -1.
$-1(q_1)$, fordi karakteren for inversionsoperationen er -1.
$+1(q_1)$, fordi karakteren for spejling i xy-planet er $+1$.
$+1(q_1)$, fordi karakteren for spejling i xz-planet er $+1$.
$-1(q_1)$, fordi karakteren for spejling i yz-planet er -1.
Ved summation af ovenstående opnås, at

$$P_{B_{3u}}(q_1) = \frac{1}{4}(q_1 + q_2 - q_3 - q_4)$$

Dette svarer til, at der findes en normalvibration, hvor følgende deformationer sker samtidigt: q_1 og q_2 forlænges, mens q_3 og q_4 forkortes.

4.3.4 Udvalgsregler

Nu hvor vi har fundet ud af hvilke normalvibrationer, der er mulige, er næste spørgsmål, hvilke normalvibrationer der giver anledning til absorption af IR-stråling. Ligesom for atomer findes der udvalgsregler for molekyler, når man bruger IR-spektroskopi. I IR-spektroskopi findes udvalgsreglen, at normalvibrationen skal få molekylets dipolmoment til at oscillere (Atkins, 1994). Hvis vibrationen ikke ændrer molekylets dipolmoment, vil vibrationen ikke vise sig i et IR-spektrum, og vibrationen siges at være IR-inaktiv.

Dipolmoment, klassisk set

Forklaringen af et dipolmoment sker gennem to eksempler. Gassen nitrogen består af to nitrogenatomer, der er bundet til hinanden (N_2). Da de to halvdele af molekylet er lige gode til at trække i de elektroner, der udgør bindingen imellem dem, har molekylet intet permanent dipolmoment. En svingningstype der svarer til strækning af bindingen mellem de to nitrogenatomer vil ikke give anledning til at dipolmomentet oscillerer i styrke, og svingningstypen vil derfor være IR-inaktiv. Gassen hydrogenchlorid består af ét hydrogenatom bundet til ét chloratom. Da chlor er væsentligt bedre til at trække i de elektroner, der udgør bindingen imellem de to atomer, vil molekylet have et permanent dipolmoment. En svingningstype der svarer til at bindingen mellem de to atomer forlænges (og forkortes rytmisk) vil give anledning til at molekylets dipolmoment oscillerer, og svingningstypen vil være IR-aktiv.

4.3.5 Hvilke C-H strækninger for ethylen vil være IR-aktive?

Hvad der ikke fremgik af ovenstående eksempler er, at et molekyle ikke behøver at have et permanent dipolmoment, for at kunne absorbere IR-stråling (Atkins, 1994). Ethylen har intet permanent dipolmoment. Selvom hydrogen- og carbonatomerne har forskellig evne til at trække i elektronerne, så udbalanceres disse forskelle på grund af molekylets plane struktur. Som vi skal se, skal man forvente to toppe i IR-spektret, som stammer fra C-H stræk (Spanget-Larsen, 1996). Figur 4.4 viser den totalsymmetriske normalvibration, som har symmetrien A_g. Denne normalvibration giver ikke anledning til en top i IR-spektret, fordi der ingen resulterende dipolmomentændring er. Figur 4.5 viser normalvibrationen, der har symmetrien B_{1g}. Denne normalvibration vil heller ikke give anledning til absorption af IR-stråling, fordi der ingen resulterende dipolmomentændring er. Figur 4.6 viser den normalvibration, som har symmetrien B_{2u}. Da denne normalvibration medfører et langs y oscillerende dipolmoment, vil denne vibration give anledning til en top i IR-spektret. På figur 4.7 er angivet den normalvibration, der har B_{3u}-symmetri. Da denne normalvibration svarer til et langs x oscillerende dipolmoment, vil normalvibrationen give anledning til absorption af IR-stråling, svarende til en top i IR-spektret.

4.3.6 Opsamling

Ud fra betragtninger omkring molekylers symmetri er det muligt at identificere de normalsvingninger, som opfylder de udvalgsregler der gælder for absorption af IR-stråling. Disse betragtninger kan anvendes i en analyse af den pågældende gas' IR-spektrum.

4.4 Symmetribrud

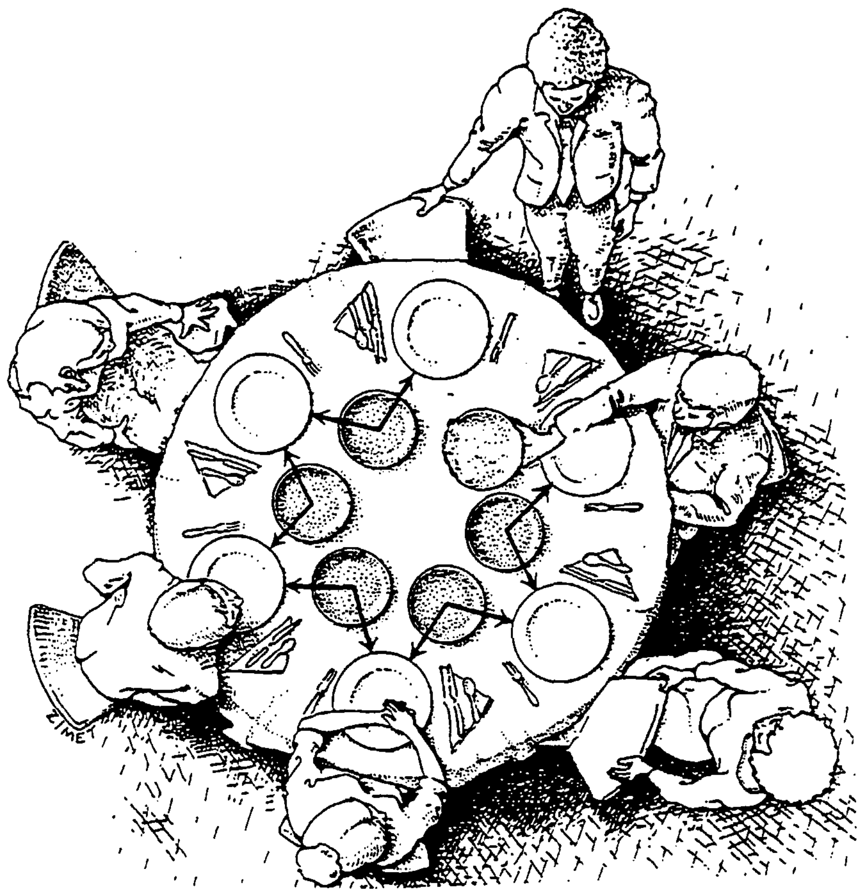
I modsætning til de andre cases er det ved symmetribrud ikke selve symmetrien som er det centrale, men derimod ændringen af *graden* af symmetri i et system.

Man taler om et symmetribrud, hvis systemet går fra en tilstand med en høj symmetri, til en med en lavere symmetri, f.eks. hvis et system går fra en tilstand med kontinuert translationssymmetri, til en tilstand med en diskret translationssymmetri. Man finder sådanne overgange beskrevet mange steder i fysikken; i nogle grene af fysikken er symmetribrud helt afgørende, mens de andre steder mere har karakter af supplerende beskrivelse.

Når man taler om symmetribrud for makroskopiske systemer, skal man være opmærksom på at den makroskopiske symmetri ikke er eksakt på et mikroskopisk niveau, som f.eks. i en gas. Hvis man betragter den makroskopisk er den bl.a. symmetrisk med hensyn til den kontinuerte translationsoperator, mens den på mikroskopisk niveau ikke er symmetrisk med hensyn til nogen translationsoperator. Denne tilnærmelse har dog ikke nogen umiddelbar betydning, så længe det makroskopiske system er stort nok.

Det er vigtigt at skelne mellem to typer af symmetribrud. I den ene er det en ydre agent som foretager symmetribruddet. Dette sker f.eks. ved den såkaldte Zeeman effekt, hvor et atom pålægges et konstant ydre magnetfelt. Atomets Hamiltonfunktion er rotationssymmetrisk, men hvis et ydre magnetfelt pålægges tilføjes et led til Hamiltonfunktionen som ikke er rotationssymmetrisk. Der sker et symmetribrud i Hamiltonfunktionen. Denne type symmetribrud kaldes nogle gange for et virkeligt symmetribrud. I modsætning til disse er der spontane symmetribrud som sker uden virkningen af en ydre agent. Weinberg beskriver disse brud på følgende måde (Aitchison & Hey, 1989). Ideen om brudt symmetri er, at Hamiltonfunktionen i kvantemekanik indeholder en eksakt symmetri, men at de fysiske tilstande ikke kan indeholde en pæn repræsentation af denne symmetri. Bruddet ligger ikke i, at lovene indeholder et asymmetrisk led, men i at man kan opnå en tilstand som er ikke-symmetrisk. En anden forfatter, Anthony Zee, giver en analog med en tom vinflaske med den sædvanlige bule i bunden. En sådan flaske er perfekt rotationssymmetrisk. Hvis vi nu taber en marmorkugle ned i flasken, vil den lægge sig på bunden. Men da bunden er bulet, vil den lægge sig ude i kanten af flasken. Herved er rotationssymmetrien er brudt. I stedet for en geometriske rotationssymmetri, skal man forestille sig at virkningen (i dette tilfælde flasken) er rotationssymmetrisk. Hvis vi betragter en eller anden genstand (svarende til marmorkuglen), det kan være en partikel eller universet, hvis historie vi skal bestemme, er det klart at den virkning som den er udsat for, spiller en rolle (Zee, 1986). Pointen med analogien er at selvom virkningen er symmetrisk, så vil genstandens historie ikke være det, svarende til at flasken er rotationssymmetrisk og den foretrækker ikke nogen retning frem for andre. Taber vi kuglen ned i flasken, brydes symmetrien.

En anden analog til spontan brud af symmtri i fysik, er beskrevet i Pagels bog om symmetri, hvor han refererer den pakistanske fysiker Abdus Salam for



Figur 4.8 Illustrationen af det symmetribrud, der sker, hvis en person vælger en salatskål (Pagels, 1985, side 202)

følgende eksempel omhandlende brud på en højre/venstre symmetri, dvs. en diskret symmetri (Pagels, 1985).

Vi forestiller os et rundt middagsbord, hvor der er dækket op til seks personer — se figur 4.8. Salatskålene er placeret symmetrisk *mellem* tallerkenerne. Hvis den middagsgæst der først rækker ud efter en salatskål, ikke kender til højre/venstre salat-konventioner, vil gæsten tage skålen til venstre med lige så stor sandsynlighed som skålen til højre og dermed er systemet højre/venstre symmetrisk. De andre middagsgæster er tvunget til at følge ham (hende), da der ellers vil være én uden salat. Når skålen er taget, er den originale højre/venstre symmetri brudt, og vi har med andre ord i begge tilfælde en ikke-symmetrisk løsning til en symmetrisk udgangssituation.

4.4.1 Symmetribrud set historisk

Ifølge Steven Weinberg (citeret i Aitchison & Hey (1989)) startede ideen om brudt symmetri i faststoffysik, hvorfra den blev overført til partikelfysik.

Ifølge Zee var status af anvendelsen af symmetribetragtninger i partikelfysik omkring 1960 følgende: På den ene side havde man med succes indført tilnærmelsesvise symmetrier, så man f.eks. kunne opfatte protoner og neutroner som næsten ens partikler og de otte baryoner kunne relateres til hinanden gennem symmetribetragtninger. Hvad angår eksakte symmetrier, havde man på den anden side startet med paritets- og rotationsinvarians og endt med ikke-abelske symmetrier. Men udsigterne for anvendelsen af symmetribetragtninger i fysik var pessimistiske. En symmetri som er mere tilnærmelsesvis end den som relaterer de otte baryoner, ville relatere partikler med så forskellige masser, at vi ville have store vanskeligheder med at opdage dem. Hvad angår eksakte symmetrier, var problemet at eksakte symmetrier fordrer, at verden ser mindre forskelligartet ud end den gør. Zee nævner som eksempel en tæppevæver som vil fremstille et perfekt cirkelsymmetrisk tæppe. Det eneste mønster som opfylder dette er koncentriske cirkler, hvilket giver et temmelig kedeligt tæppe. Ved at lette på kravet om cirkelsymmetri kan tæppevæveren opnå mere spændende tæpper. Vores verden *svarer ikke* til det symmetriske og uinteressante tæppe, men til et mindre symmetrisk og mere forskelligartet tæppe. Hvis symmetribetragtninger fortsat skulle kunne bruges, krævede det et radikalt nyt begreb. Dette var begrebet om symmetribrud (Zee, 1986).

4.4.2 Faseovergange

En faseovergang i termodynamik karakteriseres i nogle fremstillinger udelukkende af makroskopiske betragtninger. F.eks. angiver Atkins (1994), at en faseovergang er en ændring af et stofs tilstand uden at dets kemiske sammensætning ændres, og at ændringen sker spontant ved en karakteristisk temperatur for et givent tryk (Atkins, 1994, side 183-184).

Man kan samtidig anse næsten alle faseovergange for at være en spontan overgang mellem en tilstand med høj symmetri og en tilstand med lavere symmetri, dvs. et symmetribrud.

For at illustrere dette gengives nedenfor eksempler beskrevet af henholdsvis Callen (1985) og Pagels (1985).

Dannelse af CO_2 krystaller

Vi forestiller os en (uendelig) stor beholder med gasformigt kuldioxid. Gassen afkøles langsomt. Ved en karakteristisk temperatur (bestemt af det pågældende CO_2-tryk), vil en krystal dannes et eller andet sted i gassen. Krystallen vil vokse, indtil trykket er faldet til damptrykket af fast kuldioxid ved den aktuelle temperatur.

Denne faseovergang kan som sagt beskrives ved et symmetribrud. Før kondensationen var gasfasen i den uendeligt store beholder symmetrisk med hensyn til bl.a. den kontinuerte translationsoperation. Krystallen er derimod *kun* symmetrisk med hensyn til translation, med visse diskrete skridt. Desuden er placeringen af krystallen fuldstændigt uforudsigelig. Der er med andre ord sket en spontan sænkning af systemets symmetri, fordi den mindre symmetriske tilstand er mere termodynamisk favorabel (dvs. stabil) ved den temperatur.

Heisenbergs ferromagnet

Vi forestiller os en ferromagnet som en samling små stangmagneter (kompasnåle), der kan rotere frit. Denne ferromagnet forestiller vi os skærmet fra ethvert ydre magnetfelt, således at den enkelte stangmagnet udelukkende er påvirket af sine naboers magnetfelt. Ved tilstrækkeligt høje temperaturer vil kompasnålenes retninger være ukorrellerede og tilfældige, og det samlede magnetiske moment vil følgeligt være nul. Systemet er karakteriseret ved at være rotationssymmetrisk; hvis kompasnålene er fordelt på et plan, vil systemet være rotationssymmetrisk med hensyn til dette plan. Under en karakteristisk temperatur (Curietemperaturen) vil der kunne ske en spontan ensretning af kompasnålene — man kunne forestille sig, at to kompasnåle tæt på hinanden tilfældigvis var orienteret således at de påvirkede naboerne til at rette ind. Denne ensretningsproces ville spontant brede sig ud fra dette centrum, og ferromagneten ville ende med at have et magnetisk moment forskelligt fra nul, og en lavere symmetri. Retningen af dette magnetiske moment vil være tilfældig. Den spontane sænkning af systemets symmetri vil ligesom i afnittet om CO_2 ske, fordi tilstanden med lavere symmetri er mere termodynamisk favorabel end tilstanden med højere symmetri.

Brud på en symmetri kan være udgangspunkt for beskrivelse af mange tilsyneladende urelaterede fænomener fra bl.a. termodynamik, over faststoffysik til højenergifysik.

Kapitel 5

Case-analyse

Vi skal i dette kapitel analysere de fire cases, for at se hvilke typer symmetribetragtninger (jævnfør afsnit 2.2) der benyttes, samt hvordan de benyttes.

5.1 Symmetribetragtninger som er fælles for de fire cases

Om kvantemekanikkens grundantagelser skriver Merzbacher, at de fundamentale antagelser bag alle kvantemekanikkens anvendelser er, at rummet er dels er euklidisk, dels er fysisk set homogent og dels er isotropt. Denne antagelse benævner han det euklidiske relativitetsprincip (Merzbacher, 1970). En tilsvarende antagelse ligger til grund for den newtonske mekanik (Ohanian, 1989). Men er det kun disse to cases, der har antagelser om uafhængighed af absolut tid, sted og retning? Selvom det ikke eksplicit fremgår af eksempelvis casen om molekylespektroskopi, så ville det ifølge Wigner (sammenlign med afsnit 3.2) være en mærkelig teori, dersom den forudsagde, at molekyler ikke vibrerer på samme måde uafhængigt af, hvordan de peger, hvor de befinder sig, eller tidspunktet, vi interesserer os for dem. Vi når derfor frem til, at alle fire cases bygger på et symmetripostulat om invarians overfor absolut tid, sted og retning.

5.2 Symmetri og bevarede størrelser i klassisk mekanik

Lagrangeformalismen er et uundværeligt redskab i analytisk mekanik jvf. Goldstein (1980).

5.2.1 Hvilke typer symmetribetragtninger benytter casen sig af?

Lagrangeformalismen bygger på samme symmetribetragtninger som den klassiske mekanik formuleret af Newton, og som er diskuteret ovenfor. Man kan diskutere, om Newton var opmærksom på disse forhold, da han formulerede lovene, men i dag ligger de fast.

Hvad angår hvilke symmetribetragtninger som anvendes i casen, afhænger det af den fysiske situation, Lagrange-formalismen skal beskrive. I nogle tilfælde observerer man at det fysiske system indeholder en cyklisk koordinat, og altså en symmetri, hvilket er et eksempel på det vi kalder en symmetriiagttagelse. I andre situationer iagttages, at et system er tilnærmelsesvist symmetrisk, og det antages at systemet har en cyklisk koordinat. Denne anvendelse af symmetri har vi klassificeret som en symmetriantagelse.

5.2.2 Hvilken rolle spiller symmetribetragtningerne i denne case?

Pointen med Lagranges formalisme er, at man i en systemanalyse kan udnytte tilstedeværelsen af symmetrier i et system, til at finde bevarede størrelser og dermed løse systemets bevægelsesligninger. For et konkret fysisk system skal man altså levere en symmetri, enten i form af en symmetriantagelse eller symmetriiagttagelse. Lagrange-formalisme er i sig selv ikke i stand til at komme med en bevaret størrelse, uafhængigt af antagelser om det fysiske system.

5.3 Rotationel symmetri i kvantemekanikken

I lærebøger om kvantemekanik fremhæves overvejelser vedrørende impulsmomentbevarelse som vigtige, f.eks. i arbejdet med atomers spektra.

5.3.1 Hvilke typer symmetribetragtninger benytter casen sig af?

Kvantemekanik i almindelighed gør brug af alle tre typer symmetribetragtninger: Det er en symmetriiagttagelse at indse, at en isoleret atomkerner (sådan som den beskrives i teorien) udgør et rotationssymmetrisk potential. Det er en symmetriantagelse at antage, at et atom som befinder sig i et svagt B-felt, har sfærisk symmetriske omgivelser. Symmetripostulatet om det euklidiske relativitetsprincip udgør, som allerede nævnt, et af de udgangspunkter, blandt andet kvantemekanikken er bygget op omkring.

Da denne case beskriver situationen, hvor potentialet er sfærisk symmetrisk uden at tage stilling til, om der er tale om en tilnærmet eller eksakt symmetri, må vi konkludere, at casen benytter sig af en symmetriiagttagelse. Her kan man dog diskutere om hydrogenatomet er sfærisk symmetrisk. Ifølge vores teorier er det sfærisk symmetrisk, men eftersom enhver naturbeskrivelse kun er approximativ, kunne man også kalde det en symmetriantagelse.

5.3.2 Hvilken rolle spiller symmetribetragtningerne i denne case?

I 1913 fremsatte Niels Bohr (1885-1962) sine fire postulater (Ohanian, 1989). Det fjerde af postulaterne ville vi i vore dage formulere som, at elektronens impulsmoment er kvantiseret. Dengang kendte man ikke kvantiseringen, men denne case leverer en del af grunden til, at impulsmomentet er en bevaret størrelse, hvis Hamiltonoperatoren er invariant under rotation. Symmetribetragtningerne spiller en *afgørende* rolle både i udledningen af bevarelsessætningen, og i understøttelsen af det fjerde Bohr-postulat, forstået således at det ikke ville være muligt at komme så langt uden brug af symmetribetragtninger.

Hvis man skal løse et problem i kvantemekanikken ved hjælp af symmetribetragtninger, skal man udfra det konkrete fysiske system angive en symmetri. Dette kan enten være en symmetriantagelse eller symmetriiagttagelse. Har man en sådan symmetri, giver kvantemekanikken en bevaret størrelse, som kan hjælpe til at løse det oprindelige problem. Symmetribetragtninger i kvantemekanik spiller således en analog rolle til symmetribetragtninger i klassisk mekanik.

5.4 Molekylespektroskopi

Overvejelser om symmetri i molekylespektroskopi er så indgroet, at *ingen* af de de lærebøger, vi har anvendt, har undladt at omtale symmetribetragtninger. Der findes lærebøger i anvendt IR-spektroskopi, som ikke benytter symmetribetragtninger, fordi de ikke har til formål at undervise i grundlaget for tolkning af spektra, som f.eks. Allinger (1976).

5.4.1 Hvilke typer symmetribetragtninger benytter casen sig af?

Hvis man skal sætte molekylespektroskopi i en "kasse", må man sige, at symmetribetragtningerne hører ind under symmetriantagelser. Når man ser på et molekyle som ethylen, er det ikke helt rigtigt, at det er symmetrisk. Eksempelvis er den tegning, vi har af molekylet (figur 4.1), idealiseret, idet der er tale om et ligevægtsudseende for molekylet. Bindingerne ser ikke helt sådan ud; de kan være deformeret, f.eks. hvis to molekyler støder sammen.

5.4.2 Hvilken rolle spiller symmetribetragtningerne i denne case?

Symmetribetragtninger var helt essentielle i tidligere tiders molekylespektroskopi. Som alternativ til symmetribetragtninger kan man nu udføre en såkaldt *ab inito*-beregning, som er en computerbaseret forudsigelse af molekylets absorptionsspektrum. Disse beregningstyper gør meget få antagelser, og det er derfor, de kaldes *ab initio*[1]. Teknikken er dog tidskrævende og meget mere besværlig sammenlignet med symmetribetragtningerne, der kan gøres på bagsiden af en konvolut. Forskellen mellem de to teknikker er også at *ab initio* kommer med forudsigelser om hvor toppene skal ligge, mens metoden baseret på symmetribetragtninger alene angiver antallet af toppe.

5.5 Symmetribrud

Ved at interviewe Benny Lautrup og Eigil Præstgaard erfarede vi, at brudt symmetri spiller en væsentlig rolle indenfor en række forskellige grene af fysikken.

5.5.1 Hvilke typer symmetribetragtninger benytter casen sig af?

Brudt symmetri adskiller sig fra de andre cases ved, at det er selve bruddet der er det interessante, ikke så meget selve symmetrien. Det er dog stadig relevant at bestemme typen af de symmetribetragtninger, som indgår. I tilfældet med overgangen fra gas til krystal for CO_2 vil der hverken før eller efter overgangen være tale om en perfekt symmetri. Gassen vil, som sagt tidligere, ikke være fuldstændig translationssymmetriske på mikroskopisk niveau, fordi molekylernes tilfældige placering vil betyde, at der vil være en vis forskel i, hvordan molekylerne er placeret i forhold til translationsretningen. På et højere niveau vil gassen kunne opfattes som næsten symmetrisk, fordi forskellene er så små. Tilsvarende vil krystallen på det mikroskopiske niveau ikke være fuldstændig symmetrisk med hensyn til diskret translation, fordi atomerne vil svinge omkring deres ligevægtsposition. Perfekt diskret translationssymmetri ville kræve, at atomernes udsving var lige stort til ethvert tidspunkt. I tilfældet med CO_2 overgangen er der derfor tale om en *symmetriantagelse*, fordi et system som ikke er fuldstændigt symmetrisk, antages at være det. Der sker således en idealisering. Situationen er tilsvarende med Heisenbergs ferromagnet: Makroskopisk set er symmetribruddet en iagttagelse, men ud fra et mikroskopisk synspunkt er der tale om en antagelse.

[1] latin: fra begyndelsen

5.5.2 Hvilken rolle spiller symmetribetragtningerne i denne case?

I de makroskopiske eksempler på brudt symmetri i forbindelse med faseovergange spiller symmetribetragtningerne rolle af en efterrationalisering, forstået således, at betragtningerne ikke indgik i den oprindelige teori, men senere har vist sig at kunne beskrive overgangene. Selvom disse eksempler er udtryk for en efterrationalisering, har man overført ideen til andre typer faseovergange, men ikke på en afgørende måde. Heroverfor står anvendelsen af betragtninger om brudte symmetrier i højenergifysik. Zees fremstilling (Zee, 1986) viser, at man ikke kunne have klaret sig uden introduktionen af dette begreb i denne gren af fysikken. Anvendelsen af både tilnærmelsesvise symmetrier og eksakte symmetrier, var nået til et punkt, hvor man ikke kunne komme videre af disse veje. Disse symmetrier havde spillet en rolle som heuristiske værktøjer til fremkomsten af nye teorier, dvs. som metoder til at opdage nye teorier. Denne rolle overtog eftersøgningen af brudte symmetrier. Man må konkludere, at det er svært at forestille sig, at begrebet om brudt symmetri kunne være erstattet af andre tænkemåder inden for højenergifysik og faststoffysik.

Kapitel 6

Diskussion

6.1 Diskussion på baggrund af cases

Vi vil i dette afsnit tage en overordnet diskussion af de fire cases med henblik på en diskussion af begrebet fysikeradfærd.

Fysikere idealiserer

Idealiseringer er uden tvivl en vigtig del af fysikeres tænkemåde. Det må skure i en zoologs øre at høre om tilnærmelsesvis kugleformede kalkuner, men efter en tilvendingstid lærer nye fysikstuderende at acceptere denne tænkemåde.

De problemer der optræder i kvantemekanikken, bliver meget hurtigt komplicerede, dersom der ikke gøres idealiseringer. Skal man tro lærebøgerne, er det næsten den eneste mulighed, man har for at komme igennem med en løsning, analytisk såvel som numerisk. Analogien om molekylet som en samling lodder og fjedre kan også ses som en idealisering. De omtalte cases repræsenterer ingen undtagelse fra reglen.

Hvad angår casen om brudt symmetri, er det svært ud fra casen at argumentere for eller i mod påstanden om, at symmetribetragtninger er en form for idealisering, eftersom det vigtige i beskrivelsen er selve bruddet, ikke den symmetri som indgår. I casen optræder der både eksempler på, at symmetrierne er tilnærmelsesvise og på at de er eksakte. For højenergifysikere og andre som beskæftiger sig med de grundlæggende mekanismer i naturen, er symmetrier en grundlæggende egenskab, og ikke bare noget menneskene har opfundet. Det er derfor naturligt, at forskerne indenfor disse felter opfatter symmetribrud som noget reelt. Forskere indenfor andre områder hvor de symmetrier som brydes, *ikke* er eksakte, opfatter ligeledes bruddet som noget eksakt. Der er derfor ikke tale om, at symmetribrud opfattes som en idealisering; enten sker der rent faktisk et brud, eller også gør der ikke, men der er ingen vej i mellem. Hvis man mener, at fysikken beskæftiger sig med idealiserede objekter af en tilpas ukompliceret natur, kan man hævde, at begrebet om symmetribrud gør fysikerne i stand til at beskrive mere komplicerede objekter, sammenlignet med den situation hvor begrebet om symmetribrud ikke var "opfundet".

Går fysikere med symmetribriller?

Det er muligt at fysikere går med en bestemt type "briller", nemlig symmetribriller. Disse briller gør enten at man bedre kan se en eventuel underliggende symmetristruktur, eller det forhold at man leder efter symmetrierne i problemet. Som sådan kan man se symmetriantagelser som en måde at gøre særlige idealiseringer ved at fokusere på de dele af problemet som er invariante. Eftersom vores cases er eksempler på brug af symmetri i fysik, kan man indvende, at vi ikke vil kunne svare andet end Ja til ovenstående spørgsmål. Vi er i løbet af projektarbejdet stødt på talrige eksempler, og svarer derfor ikke udelukkende på baggrund af de fire cases, vi har valgt at omtale. Dertil kommer det faktum, at fysikerne har opfundet en formalisme som Lagrange-formalismen, hvis berettigelse, til en vis grad bygger på, at der findes fysiske systemer med symmetrier. At fysikerne har fundet det bekvemt at opfinde en formalisme som på denne måde inddrager symmetrier, er en indikator på at fysikere går med symmetribriller.

Også casen der omhandler brudt symmetri tyder på en bredere anvendelse af symmetribriller. I 1960'erne var man ifølge Zee ved at nå grænserne for anvendelsen af symmetribetragtninger i partikelfysikken, enten i form af eksakte eller tilnærmelsesvise symmetrier, som indtil da havde været meget nyttige (Zee, 1986). Dette betyder dels, at (partikel)fysikerne havde set efter symmetrier i verden som en grundlæggende måde at undersøge den på, dels at denne arbejdsmetode havde vist sig frugtbar. Så i dobbelt forstand havde disse fysikere gået med symmetribriller; dels havde de i en vis udstrækning kun set efter symmetrier, dels forbedrede disse briller deres syn, således at de bedre er i stand til at observere grundlæggende strukturer. Indførelsen af begrebet om symmetribrud ligger i forlængelse af denne symmetriglæde, fordi man stadig undersøger situationer, hvor der optræder symmetri.

Fysikere interesserer sig især for bevarelseslove

Det forhold at en størrelse er bevaret, indgår ofte som en hjælp i en udregningssituation. Tillige er det vores erfaring, at bevarelseslove også kan vække interesse hos fysikere, som interesserer sig for fysikkens grundlag.

Inden for den klassiske mekanik, er bevarelseslove helt centrale, men man er dog i stand til at komme frem til bevarelseslovene ud fra argumenter, som ikke går omkring Lagranges formalisme. For en studerende uden kendskab til Lagranges formalisme kan den virke besværlig, men er man ferm til formalismen, er det i visse tilfælde en genvej. Casen er med andre ord et eksempel på, at fysikere interesserer sig for bevarede størrelser, og at de vil udvikle formalismer, som sætter brugen af bevarede størrelser i system. Tilsvarende med impulsmomentbevarelse i kvantemekanik. Det forhold at impulsmomentbevarelse har så fremtrædende plads i lærebøger i kvantemekanik, må antages at være en god indikation for at bevarelsessætninger *er* noget som fysikere især interesserer sig for. At bevarelsessætninger er interessante, betyder på den anden side at symmetrier er interessante, på grund af den kobling der ifølge Noethers sætning er mellem kontinerte symmetrier og bevarede størrelser.

Som et modeksempel kan nævnes casen om molekylespektroskopi. I analyse af et molekyles IR-spektrum er man *ikke* på udkig efter bevarede størrelser, så dette er ikke grunden til at benytte symmetribetragtninger i denne case. Man kan deraf slutte, at bevarelseslove ikke er den *eneste* grund til at fysikere interesserer sig for symmetri.

Ved nogle symmetribrud optræder der kontinuerte symmetrier, som brydes hvorved størrelser ikke længere er bevaret. Casen med brudt symmetri illustrerer således, at det ikke kun er for at finde bevarelsessætninger, at symmetri er et vigtigt begreb i fysikken. Man kan forestille sig situationer hvor et brud på en bevarelse af en størrelse, er lige så vigtigt for beskrivelsen af et system, som bevarelselove er i andre tilfælde. Casen med brudt symmetri betyder således ikke, at man kan afvise, at vigtigheden af symmetri i fysik hidrører fra interessen for bevarede størrelser.

Fysikere ønsker at samle flere fænomener under én hat

Vi vil diskutere om fysikere ønsker størst mulig almengyldighed i deres fænomenteorier.

Det har været en triumf for kvantemekanik, at den har kunnet udstrækkes til også at give forudsigelser for molekyler, og ikke kun de atomer den blev udviklet til at beskrive. Lagrangeformalismen er også en generalisering af Newtons mekanik med særligt henblik på at kunne beskrive flere systemer smartere. Man kan indvende, at casen om impulsmomentbevarelse i kvantemekanik har lille generalitet, da den "kun" omhandler én elektron i rotationssymmetriske potentialer. Men strukturen i beviset for impulsmomentbevarelse, kan bruges i situationer hvor Hamiltonoperatoren kommuterer med en anden operator, dermed kan man vise andre bevarelsessætningen, som f.eks. impulsbevarelse. Den case hvor generaliteten umiddelbart synes størst er casen om symmetribrud, der kan ses som et eksempel på at samle forskellige fænomener under én hat. Set fra en fysikers synspunkt har tilstrækkelig mange systemer alle en bestemt symmetri, hvilket gør det nyttigt at udlede resultater udfra denne symmetri, så disse resultater gælder for alle systemer med samme type symmetri. Vi mener derfor at der er baggrund for at slutte, at fysikere ønsker at samle flere fænomener under én hat.

6.1.1 Forbehold i diskussionen

Der kan være problemer med den metode, vi har anvendt. Vi har ikke beskæftiget os med historiske aspekter af symmetri i fysik; og de cases vi har beskrevet er fra lærebøger. Det aspekt, at det først er i vore dage, at *ab initio*-beregninger er fremkommet som egentligt alternativ til den symmetrihjulpne analyse af IR-spektra gør, at dette eksempel på symmetribetragtninger får en placering, som måske ikke er korrekt i et større tidsperspektiv. Da vi i projektarbejdet heller ikke har arbejdet med en formidlingsmæssig analyse af lærebogslitteratur må vi også tage forbehold overfor pædagogiske grunde til f.eks. at anvende Lagranges formalisme i udledningen af Keplers planetlove frem for eksempelvis Hamiltons formalisme.

6.2 Bredere diskussion

Vi har valgt at dele diskussionen af hvad symmetribetragtninger siger om fysikken i tre punkter. For det første kan man diskuterer hvad det siger om fysikernes adfærd. For det andet kan man undersøge spørgsmål af mere filosofisk karakter. Dette punkt har vi delt op 1) erkendelsesteoretiske og 2) ontologiske spørgsmål. De første drejer sig om fysikkens muligheder og måder at opnå erkendelse om verden på, mens de sidste angår verdens indretning. Den tredie deldiskussion går på hvad brugen af symmetri siger om fysik i forhold til andre naturvidenskaber.

6.2.1 Beskrivelse af fysikernes adfærd

Fysikkens genstandsområde er naturen, men ikke hele naturen, for fysikken deler arbejdet med andre naturvidenskaber som kemi, geologi og biologi. Grænserne for denne opdeling af genstandsområde er ikke skarp, men de fleste har vist en fornemmelse for hvornår noget er fysik og hvornår det ikke er.

Wigner om fysikkens mål

Wigner sagde i sin tale ved overrækkelsen af Nobelprisen, at det oftest siges at fysikkens formål er forklaringen af naturen, eller i det mindste den ubesjælede natur. Men hvad mener han med forklaring? Han fortsætter med at sige at en forklaring er fastlæggelsen af nogle få simple principper som beskriver de egenskaber, som det som skal forklares, har. Hvis vi forstår noget, skal dets opførsel — dvs. de hændelser det fremviser — ikke give os nogle overraskelser. Vi skal altid have indtryk af at det ikke kunne være anderledes (Wigner, 1967).

Wigner mener ikke at fysikken i denne forstand er i stand til at forklare naturen. Fysikkens succes skyldes en restriktion af dens mål: Fysikken stræber kun efter at forklare regulariteterne i objekternes opførsel. Denne opgivelse af det bredere mål, og specifikationen af domænet hvor der kan søges forklaringer, mener Wigner nu fremtræder som en åbenlys nødvendighed. Han mener at den specifikation af hvad der kan forklares, er fysikkens største opdagelse indtil nu.

Jeppe Dyre (fysiker på RUC) har tidligere givet udtryk for noget tilsvarende, idet han mener at kernen i teoretisk fysik er at søge efter den simplest mulige model, der reproducerer den/de makroskopiske effekter man undersøger (Hansen et al., 1992). Det er dog ikke altid muligt at komme med en forklaring som både er simpel og som reproducerer observationerne.

Symmetri er i stand til at forklare fænomener

Vi har i casen med impulsmomentbevarelse i kvantemekanikken set, at man kan udlede impulsmomentbevarelse ud fra en symmetri. På baggrund af impulsmomentbevarelse, kan man udlede nogle af aspekterne ved det periodiske system. Kort sagt kan vi ud fra et simpelt princip beskrive nogle af de regulariteter, som atomerne udviser. Dette er et eksempel på Wigners beskrivelse af fysikkens (begrænsede) mål, som en beskrivelse af fænomenernes regularitet ud fra et simpelt princip.

På denne baggrund er det ikke så mærkeligt at symmetri spiller en vigtig rolle i fysikken, hvis fysikkens mål er at beskrive regulariteter på baggrund af simple principper. For ifølge Noethers sætning hører der en bevaret størrelse til en kontinuert symmetri, og bevarede størrelser er i stand til, som i eksemplet med det periodiske system, at forklare regulariteter. Symmetribetragtninger bliver altså i stand til at levere den krævede forklaring.

Fysikkens mål og idealer

Man kan tro at fysikere forsøger at beskrive de fænomener, som optræder indenfor fysikkens genstandsområde, men sådan er det ikke. I stedet søger den bag om disse foranderlige fænomener, og prøver at beskrive de grundlæggende mekanismer som styrer fænomenernes fremtrædelsesform. Dertil kommer en stor grad af reduktionisme i fysikkens arbejdsmetode, idet man leder efter mekanismer, der er så generelle som muligt, og som dækker så mange fænomener som muligt. Derfor vil fysikken prøve at finde det karakteristiske for fænomener og derved klassificere dem så bredt som muligt. Et eksempel er bølger som beskrives i én matematisk teori, bølgelæren. Bølgelæren forener fænomener som f.eks. elektromagnetiske bølger, vandbølger, jordskælv og lydbølger. Bølgebegrebet siger ikke noget direkte om naturens forskelligartede fremtrædelser, men nærmere noget om et eller andet bagvedliggende, som kan bruges til en forenende beskrivelse. Tilsvarende forsøger man at henregne alle vekselvirkninger til fire fundamentale kræfter, som man igen forsøger at forene til én fundamental kraft, et projekt som endnu ikke (om nogensinde) er fuldendt.

Fysikkens mål er således at finde de fundamentale styrende mekanismer i naturen. Hvis denne opfattelse af fysikken er korrekt, er det ikke noget under, at symmetribetragtninger er så vigtige i fysikken, for de kan forene fænomener, der fremtræder forskelligt, men har de samme symmetrier.

Symmetri og generalisering

Vi har i nogle af casene set at man udleder resultater ud fra én eller anden form for symmetri, således at resultaterne gælder for fænomener, som har denne symmetri. Forskellige personer har diskuteret denne sammenhæng mellem generalitet og symmetri i forbindelse med de fysiske teoribygninger.

Halzen og Martin skriver i en elementarpartikelbog at en symmetri betyder at en størrelse ikke er målelig. Translationsinvarians har f.eks. som konsekvens at vi ikke kan bestemme en absolut position i rummet. I en bog om kvantefeltteoriens filosofiske grundlag er Auyang inde på noget af det samme. Hun skriver

> *Symmetritransformationer sletter særegenheder.* En verden med høj symmetri karakteriseret af en høj symmetrigruppe er uden mange særpræg; den beholder kun de vigtige træk.
> (Auyang, 1995, Side 34)

Hun bruger Einsteins relativitetsteorier som illustration af fysikernes higen efter generalisering. Einstein stræbte efter at formulere det mest generelle og fuldstændigt universelle begreb om rum-tid og i dette forsøg udvidede han symmetrigruppen for rum-tid. Dette er karakteristisk for fysikere som kontinuerligt søger større symmetrigrupper i deres stræben efter forening og en større gruppe leverer mere omfattende begreber (Auyang, 1995). Zee nævner sammenkobling af elektromagnetismen som et eksempel, hvor symmetri forener forskellige dele af fysikken. Dels blev det opdaget at elektricitet og magnetisme var to sider af samme sag, nemlig elektromagnetismen, dels blev optikken gjort til en del af denne (Zee, 1986). Dette betyder, at symmetri, på grund af dens evne til at forene tilsyneladende urelaterede aspekter af fysikken, er tæt forbundet til ideen om enhed (Auyang, 1995).

Symmetri er smukt

Historien siger om Albert Einstein at han var mere interesseret i skønhed end i sandhed og at han var overbevist om at skønhed er et vejledende princip i søgen efter vigtige resultater i teoretisk fysik (Zee, 1986). Zee som har beskæftiget sig med elementarpartikelfysik, kalder sig selv og andre i fundamentalfysik, for Einsteins intellektuelle efterkommere fordi de ligeledes søger efter skønhed. Men hvad menes med skønhed i fysik? Zee skriver, at det æstetiske system som fysikere bruger til at bedømme naturen er inspireret, ligesom klassisk arkitektur, af geometri og symmetri (Zee, 1986). Han kommer ikke med en mere skarp beskrivelse af skønhed i fysik end at han vil sætte lighedstegn mellem skønhed og symmetri. Hvis man sætter dette lighedstegn, er det klart at søgen efter skønhed bliver til en søgen efter symmetri, og derved bliver det en cirkelslutning.

Andre fysikere ville sætte lighedstegn mellem det, som er enkelt og det, som er smukt; atter andre ville betegne et tredie karakteristika som afgørende for det æstetiske. Vi ser os ude af stand til at gennemføre en selvstændig diskussion herom, fordi begrebet "smuk" er for upræcist.

Symmetri er løftestang til fremkomsten af nye teorier

Dette punkt hænger lidt sammen med punktet med at symmetri er smukt. Nobelpristageren Murray Gell-Mann citeres i Arfken for følgende udtalelse

> Disciplineret bedømmelse af hvad der er nydeligt og symmetrisk og elegant har gang efter gang vist sig som en fortræffelig guide til hvordan naturen virker (Arfken & Weber, 1995, side 223)

Ét af de vigtigste eksempler på dette er Einsteins generelle relativitetsteori, hvor Einstein ud fra et symmetripostulat opstillede sin teori. Dette står i modsætning til udvikling af den specielle relativitetsteori, som gradvist blev udviklet på følgende måde: Over et længere tidsrum var forskellige fænomener blevet beskrevet, vi tænker blandt andet på statisk elektricitet, dyrisk elektricitet og magnetisme. På baggrund af Maxwells ligninger, der forenede beskrivelsen af ovennævnte begreber, lykkedes det at vise en symmetri, nemlig Lorentz-invarians. Denne invarians blev brugt i opstillingen af den specielle relativitetsteori. Zee skelner mellem disse to udviklinger, ved at kalde udviklingen af den specielle relativitetsteori for en udvikling typisk for det nittende århundrede, mens han betegner udviklingen af den generelle relativitetsteori for specifik tyvende århundrede. Fundamental-fysik følger sidstnævnte udviklingsmodel, ved på baggrund af symmetrier at opstille teorier hvis konsekvenser så tjekkes med observationer (Zee, 1986).

Symmetri er et teoretisk værktøj

I en samtale med to eksperimentalfysikere her på stedet, Tage E. Christensen og Petr Viscor, var de lidt tøvende overfor påstanden om at symmetribetragtninger spiller en specielt vigtig rolle i fysik[1]. Da samtalen var temmelig uformel og de var uforberedte, er det svært at tage deres udtalelser til indtægt for at symmetribetragtninger ikke spiller en stor rolle for eksperimentalfysikere. De teoretiske fysikere vi har læst værker af eller interviewet, giver alle sammen udtryk for, at symmetri spiller en vigtig — ja afgørende, rolle i fysik. Vi vil på baggrund heraf konkludere, at der er forskel på teoretiske og eksperimentelle fysikeres opfattelse af hvor vigtig en rolle symmetri spiller. Det kan også være et spørgsmål om ord. Hvis en eksperimentalfysiker siger, at man kan se bort fra rand-effekter, og opfatte materialet som homogent, ville hun sandsynligvis selv betegne dette som en idealisering. En teoretisk fysiker ville derimod kategorisere idealiseringen som det, vi har kaldt en symmetriantagelse.

Efter at have slået dette fast, kan man spørge, hvad baggrunden for denne forskel er? En mulig forklaring kunne være, at teoretikere bliver nødt til at være mere bevidste om, hvad der i en eller anden forstand "virker", når teorier skal udvikles. Teoretikere som udvikler kvantefelt-teorier, har opdaget, at man kan nå langt

[1] Vi ville gerne have interviewet en eksperimentalfysiker mere indgående, men det blev der desværre ikke tid til.

med at postulere symmetrier og opbygge teorier på baggrund af disse postulater. Faststoffysikere har oplevet, at beskrivelsen af symmetrier eller symmetribrud er effektive til at beskrive faseovergange. Eksperimentalfysikere tænker måske mere i konkrete fænomener, altså mekanismer som er mere direkte knyttet til fænomenerne.

6.2.2 Fysikkens måder at opnå erkendelse og fysikkens verdenssyn

Kaskade-reaktion?

Vi har i projektarbejdet ikke beskæftiget os indgående med den historiske udvikling. Det er dog vores indtryk, at ideen om at bruge symmetribetragtninger har bredt sig, dels som følge af Einsteins succes med introduktionen af symmetribetragtninger i teorier for tid og rum, og dels i forbindelse med Wigners introduktion af symmetribetragtninger i kvantemekanik. Uanset det løse grundlag er vores opfattelse af udviklingen, at en betragtningsmåde kan komme "på mode"; i dette tilfælde at lede efter symmetrier. Dette forhold mener vi dog ikke er noget, som adskiller fysikere fra andre faggrupper: Det er trods alt menneskeligt at abe efter.

Er fysikkens erkendelsesmåde ensporet?

I det fjerde århundrede før vor tidsregning introducerede Aristoteles det geocentriske univers, hvor planetbanerne beskrives som cirkler. Denne model for planetbanerne fik stor succes i begyndelsen, men blev i det andet århundrede før vor tidsregning afløst af Ptolemaios' epicykelmodel. Vi forestiller os, at datidens naturvidenskabsfolk var så begejstrede for den symmetriske cirkel, at de ikke kunne forestille, sig at noget som guderne havde skabt, kunne være eliptisk; i stedet opfandt de epicykelmodellen. Måske kan den store succes, som symmetribetragtninger har haft indenfor teoretisk fysik ende med på samme måde at gøre fysikken blind for andre muligheder. Hvad der i begyndelsen var en effektiv "kickstarter", ender måske med at blive en klods om benet. For omkring 10 år siden var kaosforskning langt fremme i medierne, og man fik det indtryk, at nu skulle alt ses med "kaosbriller". Det er vores indtryk, at kaosforskningen nu har fundet et mere naturligt niveau. Er symmetribetragtninger på samme måde et modefænomen? Måske — men symmetribetragtninger har i hvert fald bevist deres levedygtighed i henved 100 år.

Er problemer som indeholder en symmetri de eneste som kan løses?

Eksperimentelle undersøgelser af amorfe stoffers fysik (eksempelvis deres elektriske og termiske egenskaber) viser, at nogle fysikere vælger genstandsområder, som ikke er specielt symmetriske. Som udgangspunkt er svaret på ovenstående spørgsmål Nej. Hvis man udvider begrebet symmetri til også at omfatte naturlovenes invarians overfor tid og sted, vil vi ikke svare lige så håndfast: Én eller anden form for symmetriantagelse er nok nødvendig. I den grænse hvor problemet absolut ingen symmetrier indeholder, kan man stille spørgsmålstegn ved om man i det hele taget kan tale om en naturlov. Denne diskussion følger nedenfor.

Verdensbillede og erkendelsesteori

Den måde fysikerne opfatter naturen på, har også betydning for deres måde at opnå erkendelse. Selvom fysik hører under naturvidenskab er det ikke givet, at direkte naturbeskrivelse er mål for fysikere. Meget ofte handler fysiske spørgsmål om meget isolerede fænomener, der er renset for den støj, som er fænomenernes naturlige omgivelser. Dette kan måske skyldes, at fysikerne anser naturen for at bestå af fundamentale strukturer (naturlove), der er forurenet med støj (sammenlign med afsnit 3.2). Som en del af arbejdsdelingen sætter fysikere fokus på de fundamentale strukturer.

Wigner refereres (i afsnit 3.2.4) i forlængelse af denne tanke, at de fundamentale strukturer — naturlovene — er invariante under translation af tid og sted, og på baggrund heraf kan man argumentere for, at symmetribetragtninger indgår i fysikkens erkendelsesteori.

Ingen symmetrier, ingen fysik?

Newtons anden lov er et eksempel på en naturlov som ville forekomme os mærkelig, dersom den afhang af absolut tid eller sted. Wigner (beskrevet i afsnit 3.2.3) går så langt som at påstå, at uden visse invarianser ville faget fysik ikke eksistere. I det scenario hvor naturlovene indeholder en afhængighed af absolut tid og/eller sted, ville de givetvis være mere komplicerede, men vi mener ikke, at fysikfaget nødvendigvis ville være reduceret til botanik. Forestiller vi os, som eksempel, at gravitationskonstanten afhang af absolut tid (siden det store brag) så ville der være mænd og kvinder som ikke ville stille sig tilfredse med at skrive gravitationsloven som $F = G(t)m_1m_2/r^2$. De ville undersøge hvilken funktion $G(t)$ var, og hvad der var den bagvedliggende årsag hertil. Muligvis ville udviklingen af fysikken gå langsommere, men vi tror på, at mennesker ville være nysgerrige, om det så gjaldt om at finde hvilken orden der er (eller ikke er) i Kaos.

6.2.3 Fysikkens ontologi

Realisme

Som vi før har givet udtryk for fremstiller Peirce den videnskabelige metode som realistisk, og vi har den opfattelse at de fleste videnskabsmænd tror på eksistensen af virkelige ting (se eventuelt afsnit 3.1). Man kan i denne forbindelse diskutere, om symmetrien er noget, som virkeligt eksisterer i verden, eller om det er noget, vi opfinder som en beskrivelse af verden.

Både Lautrup og Præstgaard giver udtryk for en realisme med hensyn til symmetri, dvs. de mener, at dele af fysikkens genstandsområde indeholder virkelige symmetrier. Ifølge Præstgaard er symmetri en betingelse som skal opfyldes for sådan er naturen. Lautrup mener, at det kun er få *objekter* i naturen som er fuldstændig symmetriske, f.eks. menes hydrogenatomer og neutronstjerner praktisk talt at være kugleformede, mens alle andre fysiske objekter kun er tilnærmelsesvist symmetriske. På den anden side har han i sit arbejde med elementarpartikelfysik brugt symmetrier, som for fysikere indenfor dette område både er virkelige og eksakte.

Præstgaard og Lautrup er måske uenige om hvilke fænomener som er symmetriske, men de er enige om at der eksisterer fænomener som *er* symmetriske. Denne realisme-holdning er helt i tråd med Peirces opfattelse af at den videnskabelige metode generelt er realistisk.

Gælder den realisme-holdning, der bliver præsenteret, ligeledes for de begreber, som indgår i vores teorier; eksisterer eksempelvis bølgefunktionen i kvantemekanikken på én eller anden måde uafhængigt af vores bevidsthed? Lautrup der som den eneste udtaler sig om dette, giver udtryk for at være anti-realist på dette punkt, idet han mener, at den kvantemekaniske bølgefunktion er opfundet — ikke opdaget (se eventuelt interviewet afsnit 3.3). Man kan diskutere om det er konsistent at være realist hvad angår symmetrier i naturen, men anti-realist med hensyn til bølgefunktionen. Denne diskussion handler ikke så meget om symmetri, som om en generel tilgang til verden, så den vil vi udelade.

6.2.4 Forskelle mellem fysik og andre naturvidenskaber

I indledningen var vi inde på, at symmetri også bliver brugt i andre naturvidenskaber, og således ikke er noget, der er specielt for fysik, men at forskellen er den status, som symmetribetragtningerne har. I fysik er de i nogle tilfælde helt afgørende, mens det er vores indtryk, at de i andre naturvidenskaber oftest blot er praktiske at bruge.

Der kan være flere årsager til denne forskel. Én af dem kunne være forskelle i det genstandsområde, som man forsøger at beskrive. I fysik forsøger man at beskrive ting, så de er helt generelle, mens det virker som om, andre naturvidenskaber mere interesserer sig for specifikke problemer, og udelukker den generalitet, som fysikere forsøger at indbygge i deres teorier. Tilsyneladende kan teorier, der udledes alene på baggrund af symmetribetragtninger dække flere områder.

Fysik spænder over ting fra de mindste dele, til at omfatte hele universet. Hvis man nu sammenligner dette med f.eks. kemi, kan man sige, at kemien ikke spænder over et lige så stort område. Her søger man at forklare et meget mere snævert område, og ofte er teorierne baseret direkte på observationer, f.eks. kemiske reaktioner. I organisk kemi gøres følgende generalisering: Hvis et molekyle indeholder en karakteristisk gruppe, reagerer molekylet ligesom andre molekyler med samme karakteristiske gruppe. Der foretages således også generaliseringer indenfor kemien, så resultaterne kan bruges i andre kemiske sammenhænge. Eksemplet illustrerer en forskel mellem fysik og kemi hvad angår generaliseringer, fordi flere af fysikkens teorier generaliseres så meget, at de kan anvendes på områder *udenfor* fysikken, hvilket de færreste kemiske teorier kan. Vi mener at denne forskel ikke blot gør sig gældende overfor kemi, men også overfor de andre naturvidenskaber, således at der findes generaliseringer indenfor andre naturvidenskaber, men at de sjældent peger uden for fagene.

En anden forskel kunne være tendensen til at foretage idealiseringer. I fysik gøres tit idealiseringer, herunder symmetriantagelser. Her kan man antage, at et objekt er symmetrisk, hvorved man gør opgaven lettere. I andre naturvidenskaber er der ikke samme tendens til at gøre denne type idealiseringer. Det kan hænge sammen med at det ikke er nødvendigt for at løse opgaven: I fysik er der ikke noget i vejen for at antage, at et objekt er rotationsinvariant, mens man i f.eks. biologi godt kan gøre den samme antagelse, men det er sjældent nødvendigt for løsning af problemet. Der findes dog eksempler på det modsatte. I embryologien indgår symmetrier og brud på disse, på en afgørende måde (Christiansen, 1998). Det er vores indtryk at disse eksempler er atypisk for biologien, og til en vis grad skyldes fysikeres mellemkomst.

Når alt kommer til alt, kan man sige, at fysikere stræber efter at finde fundamentale strukturer i verden, og at binde dem sammen, mens andre naturvidenskaber tager sig mere af de specifikke fænomener, som f.eks. molekylære reaktioner eller celledelinger.

Ser vi på naturen med symmetribriller, er der en tendens til, at der i forbindelse med samlingen af objekter til større objekter sker et symmetribrud. Dette skaber et hierarki blandt byggestenene, med de simple dele som indeholder højt symmetriske byggesten (f.eks. atomer) i toppen, og de mere komplekse byggesten med lavere symmetri (f.eks. molekyler) længere nede. Dette betyder, at jo mere fundamentalt et objekter man arbejder med, jo højere symmetri finder man. I nogle dele af fysikken arbejder man med fundamentale objekter, og derfor kan det ikke undre, hvis fysikerne finder mere symmetri end videnskabsmænd fra andre videnskaber.

Den høje grad af matematificering gør, at man kommer langt med symmetribetragtninger i fysik

Som vi har set leder fysikere efter så generelle ting som muligt, dette giver sig bl.a. udslag i at fysikkens sprog i meget høj grad er matematikken.

Da symmetri er et begreb som meget let kan beskrives generelt i matematiksprog, betyder det også at det bliver let at udpege symmetrier i noget som er beskrevet matematisk, og det bliver let at afprøve forskellige typer af symmetribetragtninger på et system som er beskrevet i matematik. Generaliteten i matematik giver en fælles basis, når man skal tale om symmetri i et fysisk system, hvor det kan være svært at beskrive en kompliceret symmetri uden brug af matematik; i et sprog hvor man bruger matematik er det let. Matematik hjælper dermed til at generalisere fysikken gennem lettere tilgang til beskrivelse i generelle (symmetri) termer.

Man kan have mange syn på om matematik er virkeligt eller ej, f.eks. udtalte Benny Lautrup under interviewet med ham, at matematikken og fysikkens tegn er en socialkonstruktion, men også at det forhold at matematiken kan udtale sig om virkelige ting *ikke* er en sådan konstruktion (Lautrup, 1998). Dette kan forstås på følgende måde: Vores notationer og konventioner inden for matematik og dermed fysik er skabt af os. De grundlæggende egenskaber inden for matematik er derimod universelle, og vi forestiller os at en "marsmand" også kender til de fundamentale gruppeteoretiske aksiomer (se appendiks A), og derudfra har konstrueret et matematisk værktøj som kan give de samme resultater om virkeligheden.

Kapitel 7

Konklusion

Her følger opsamlingen af de pointer fra diskussionen, vi har fundet væsentlige. Med reference til problemformuleringen har vi grupperet delkonklusionerne i to.

7.1 Kan vi sige noget nyt om fysikeres adfærd?

Vi vidste allerede inden vi gik i gang, at fysikere foretager idealiseringer, men vi vidste ikke at symmetriantagelser i så høj grad bruges som idealisering.

At der findes noget, man kunne kalde for symmetribriller, er nyt for os, og vi mener igennem projektarbejdet at have fundet evidens for eksistensen af sådanne briller i hvert fald inden for teoretisk fysik.

Vi har været mere eller mindre bevidste om, at fysikere går efter stor almengyldighed, men at der er en sammenhæng mellem symmetribetragtninger og generalitet er ny for os.

Det er trivielt for nogle, at forskellen på fysik og andre fag blandt andet består i forskelle i generalitet samt forskelle i genstandsområde. Det er dog gået op for os, at der også er forskel i graden af symmetri i de forskellige fags genstandsområder, og at dét kan være én af forklaringerne på at symmetri er så vigtige i fysik i forhold til andre fag.

7.2 Kan symmetribetragtningernes vigtighed have årsag i genstandsområdet?

Vi vil samle op på andre grunde til at symmetri optræder så ofte i fysik.

Der er forskel på anvendelsen af matematisk sprogbrug i de forskellige naturvidenskaber, men dét leverer ikke hele forklaringen på, at symmetribetragtninger er vigtigere for fysikere. Forskellen i beskrivelsesværktøjet skyldes en forskel i det, man ønsker at beskrive, hvilket fører os videre til næste delkonklusion.

Efter dette projektarbejde er det vores overbevisning, at der findes symmetri i naturen, især er den tydelig i den del af naturbeskrivelsen som fysikere beskæftiger sig med. Vi finder ikke grundlag for at tro på, at alt kan forklares ved hjælp af symmetribetragtninger, men forklaringer som afviser visse typer symmetrier (invarians overfor absolut tid, sted og retning) kan ikke opnå en særlig høj status i naturvidenskab hvor reproducerbarhed af et forsøg spiller en central rolle.

Vi har fundet mange eksempler på, at den ene eller anden type symmetribetragtning på en afgørende måde indgår i forklaringen eller opklaringen af et problem. Eftersom vi ikke har undersøgt den historiske udvikling af brugen af symmetribetragtninger må vores konklusioner herom tages med forbehold. Vi mener, at kunne iagttage en stigende brug af symmetribetragtninger i dette århundrede, og man kan måske tale om et modefænomen. Men det mener vi ikke er tilfældet og bredden i deres anvendelsesområdet er den bedste indikator herfor.

Vi kan hermed konkludere at årsagen til symmetribetragtningers centrale placering i fysikken både findes i fysikkens arbejdsmetode og i fysikkens genstandsområde.

Kapitel 8

Perspektivering

8.1 Hvad har vi lært?

I forbindelse med udarbejdelsen af dette projekt, synes vi at vi har lært noget generelt om fysikken, som det er vigtigt, om ikke for andre, så for os selv, kort at beskrive. For det første har vi fået vores fysikhorisont udvidet, idet vi fået indsigt i andre fysiske discipliner end dem vi kendte i forvejen. Graden af indsigt varierer fra, at vi har sat os ind i regulært lærebogsstof til at vi kort har snuset til avancerede emner. I den første kategori hører f.eks. principperne for Lagrange-formalisme for klassisk mekanik, mens vi i den anden ende af spektret har fået lidt større indblik i fx kvantefelteori og elementarpartikelfysik. Ind imellem disse to yderpunkter, har dem af os som ikke læser kemi ved siden af fysik, lært noget om anvendelsen af fysik i kemi.

Udover det rent faglige fysik, har dette projekt givet os en indsigt i nogle af de punkter man kan diskutere i forbindelse med fysikkens meta-aspekter. Vi har afprøvet symmetri som et eksempel på spørgsmål om fysikkens sociologi, erkendelsesteori og ontologi. Vi påstår ikke at vi er kommet rundt om alle punkter man kan diskuterere i denne forbindelse, men vi tror at vi har nævnt nogen af de vigtige. Inden vi gik i gang med projektet havde vi en forestilling om hvad disse diskussioner går ud på og hvad typiske svar er, så i den forstand har vi ikke lært så meget nyt. Det nye er nærmere, at vi har fået en skarpere opfattelse af hvad diskussionen går ud på, og at vi har set nogle eksemplariske illustrationer af de forskellige påstande i diskussion. Kort sagt har vi fået nogle af fysikkens meta-aspekter under huden, hvilket vel er meningen med et metaprojekt.

8.2 Hvad kunne man undersøge videre

Brugen af symmetri i fysik er et stort emne, som det aldrig har været intentionen at vi skulle dække, hverken i dybden eller i bredden. Det er også på disse to punkter, vi kan se undersøgelser som ligger umiddelbart i forlængelse af vores.

For det første har vi forsøgt at dække fire områder af fysikken, i stedet for at gå i dybden med et eller to områder. Dette har medført at vores cases ikke er behandlet så indgående, og vi kunne måske være nået frem til mere grundlæggende konklusioner hvis vi havde boret dybere i casene. Måske kunne symmetribrud med fordel have været undersøgt grundigere. Hvad angår bredden, har vi løbet af vores undersøgelse fundet ud af, at de symmetrier som optræder i elementarpartikelfysikken dels adskiller sig fra dem, vi har beskrevet, dels benyttes på en anden måde. Denne gren af fysikken vil det derfor være oplagt til at udspænde brugen af symmetri i fysikken. Af historiske årsager vil det være interessant at undersøge Einsteins relativitetsteorier, hvor symmetripostulater skiftede status i fysikken. Som det sidste eksempel på noget man kunne undersøge umiddelbart i forlængelse af vores projekt, er brugen af gruppeteori i fysikken. Det ville være interessant at undersøge, dels fordi det er så vigtigt i forbindelse med symmetri i moderne fysik, dels fordi det åbner for en diskussion af matematik i fysik.

Litteratur

Aitchison, I. J. R. & Hey, A. J. G. (1989). *Gauge Theories in Particle Physics*, 2 edn, IOP publishing ltd.

Akselbo, K. (1996). Kan naturlove begrundes?, *KVANT* pp. 9–14.

Allinger, N. L. (1976). *Organic Chemistry*, 2 edn, Worth.

Arfken, G. B. & Weber, H. J. (1995). *Mathematical methods for physicists*, fourth edn, Academic Press, Inc.

Aschehougs Konversasjons Leksikon (1974). 5 edn, H. Aschehoug og co., Oslo.

Atkins, P. (1994). *Physical Chemistry*, fifth edn, Oxford university press.

Auyang, S. Y. (1995). *How is Quantum Field Theory Possible?*, Oxford University Press.

Boardman, A., O'Connor, D. & Young, P. (1973). *Symmetry and its Applications in Science*, McGraw-Hill Book Company.

Callen, H. B. (1985). *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, second edn, John Wiley & sons.

Christiansen, G., Both, E. & Sørensen, P. Ø. (1990). *Mekanik*, Laboratoriet for Teknisk Fysik, DTH.

Christiansen, P. V. (1998). *Personlig Kommunikation.*

Edwards, C. H. & Penney, D. E. (1998). *Calculus*, 5 edn, Prentice Hall.

Feynman, Leighton & Sands (1963). *The Feynman Lectures on Physics*, Vol. I, Addison-Wesley.

Goldstein, H. (1980). *Classical Mechanics*, second edn, Addison-Wesley publishing company.

Griffiths, D. J. (1995). *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice-Hall, Inc.

Gullvåg, I. (ed.) (1972). *Charles Sanders Peirce*, Pax Forlag A/S, Oslo.

Hansen, P. M., Holm, S., Meibom, P., Petersen, M. K. D., Postgaard, P., Schrøder, T. B. & Zeck, I. P. (1992). *Computersimulering og Fysik*, IMFUFA, RUC.

Jacobsen, N. (ed.) (1983). *Gesammelte Abhandlungen (Collected Papers), Emmy Noether*, Springer-Verlag.

Lautrup, B. (1998). *Interview 17/11-98.*

Merzbacher, E. (1970). *Quantum Mechanics*, John Wiley & sons, INC.

Ohanian, H. C. (1989). *Physics*, second expanded edn, W. W. Norton & company.

Pagels, H. R. (1985). *Perfect Symmetry*, Penguin Books.

Præstgaard, E. L. (1998). *Interview 12/11-98.*

Rubin, E. (1915). *Synsoplevede Figurer*, Gyldendalske boghandel, Nordisk forlag.

Spanget-Larsen, J. (1996). *Opgaver Og Noter Til Kvantekemi Og Molekylspektroskopi*, RUC, Institut I.

Symon, K. R. (1972). *Mechanics*, third edn, Addison-Wesley publishing company.

Wigner, E. P. (1967). *Symmetries and reflections*, Indiana University Press.

Zee, A. (1986). *Fearful Symmetry*, Macmillan publishing company.

Appendiks A

Gruppeteori

A.1 Gruppeteori

Gruppeteori er det matematiske sprog som symmetribrugere betjener sig af. Derfor har vi udformet dette appendiks om gruppeteori, som giver et resumé af nogen af de vigtigste begreber indenfor denne matematiske disciplin.

A.1.1 Grundlaget

Den grundlæggende definition af en gruppe er *en samling af entiteter som er relaterede til hinanden på én bestemt måde.* Entiteterne som danner en gruppe kaldes "Gruppeelementer", og samlingen af gruppeelementer udgør en mængde. For at mængden skal danne en gruppe, skal der defineres en relation mellem elementerne som vi vil kalde et produkt. Hvis vi har en gruppe med elementerne $A, B, C, \ldots$ kan vi f.eks. definere et produkt som

$$AB = C$$

Betingelsen for, at en mængde er en gruppe er, at de fire nedenstående aksiomer (Boardman et al., 1973) skal gælde for alle elementerne i den mængde udstyret med et produkt (I det følgende er G en gruppe).

Mængden er lukket Det skal gælde, at $\forall A, B \in G : AB \in G$, eller med andre ord, funktionen $(a, b) \to ab$ afbilder $G \times G \to G$. Det vil sige at hvis man tager to vilkårlige elementer fra gruppen så skal produktet mellem disse elementer tilhøre gruppen.

Associativ $\forall A, B, C \in G : A(BC) = (AB)C$. Det er underordnet om vi danner produktet mellem A og B først og så tager produktet mellem dette produkt og C eller vi danner produktet mellem A og produktet mellem B og C.

Identitets element Der skal eksitere ét og kun et element (lad os kalde det E) $E \in G$ så at $\forall A \in G : EA = AE = A$. Der skal være et entydigt bestemt element E i gruppen som for et vilkårligt valgt element A i gruppen opfylder at produktet mellem E og A og mellem A og E giver A selv.

Invers element Det skal gælde, at $\forall A \in G$ eksisterer ét og kun et element, lad os kalde det A^{-1}, så at $AA^{-1} = A^{-1}A = E$. For ethvert element A i gruppen skal der eksistere et entydigt element A^{-1} så produktet mellem A og A^{-1} og mellem A^{-1} og A giver identitetselementet.

Man kan udtrykke egenskaberne ved en konkret gruppe gennem en multiplikationstabel. Som eksempel har vi nedenfor angivet multiplikationstabellen for gruppen bestående af 1 og -1, udstyret med den normale multiplikation som produkt.

$$\begin{array}{r|cc} & 1 & -1 \\ \hline 1 & 1(1) & 1(-1) \\ -1 & (-1)1 & (-1)(-1) \end{array} \quad = \quad \begin{array}{r|cc} & 1 & -1 \\ \hline 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \end{array}$$

A.1.2 Regneregler

Den kommutative lov gælder i almindelighed ikke for en gruppe:

$$AB \neq BA$$

Dette står i modsætning til gange-operationer med reelle tal (der ud fra det foregående kan betegnes som en gruppe). Her gælder det for alle elementerne i gruppen, at $AB = BA$; sådanne grupper kaldes for Abelske.

Hvis det om to gruppeelementer gælder, at

$$AB = BA$$

siges de to elementer at kommutere (Boardman et al., 1973). Dette er et vigtigt begreb, som vi stifter nærmere bekendtskab med i de kvantemekaniske cases. En kommutator skrives som:

$$[A, B] = AB - BA \tag{A.1.1}$$

og det er hvis dette giver 0, så kommuterer de.

A.1.3 Matrix-repræsentation

Elementerne i en gruppe kan repræsenteres på forskellig vis. Matrixrepræsentation af elementerne i en gruppe, har vist sig at være en kraftfuld teknik og er næsten universelt accepteret af fysikere. Brugen af matricer giver ikke nogen restriktioner af betydning, og det kan vises at elementerne for enhver endelig gruppe og flere af de kontinuerte grupper, kan repræsenteres ved matricer(Arfken & Weber, 1995). f.eks. kan rotationer om z-aksen gennem vinklen ϕ skrives som (Arfken & Weber, 1995)

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) & 0 \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{A.1.2}$$

Denne måde at beskrive sådanne rotationer på, er så velkendt at det er svært at forestille sig en anden repræsentation af rotationsgruppen end på matrixform. Men apriori kunne man forestille sig, at det er muligt.

Liste over tidligere udkomne tekster tilsendes gerne. Henvendelse herom kan ske til IMFUFA's sekretariat

tlf. 46 74 22 63

217/92 "Two papers on APPLICATIONS AND MODELLING IN THE MATHEMATICS CURRICULUM"
by: Mogens Niss

218/92 "A Three-Square Theorem"
by: Lars Kadison

219/92 "RUPNOK - stationær strømning i elastiske rør"
af: Anja Boisen, Karen Birkelund, Mette Olufsen
Vejleder: Jesper Larsen

220/92 "Automatisk diagnosticering i digitale kredsløb"
af: Bjørn Christensen, Ole Møller Nielsen
Vejleder: Stig Andur Pedersen

221/92 "A BUNDLE VALUED RADON TRANSFORM, WITH APPLICATIONS TO INVARIANT WAVE EQUATIONS"
by: Thomas P. Branson, Gestur Olafsson and Henrik Schlichtkrull

222/92 On the Representations of some Infinite Dimensional Groups and Algebras Related to Quantum Physics
by: Johnny T. Ottesen

223/92 *THE FUNCTIONAL DETERMINANT*
by: Thomas P. Branson

224/92 *UNIVERSAL AC CONDUCTIVITY OF NON-METALLIC SOLIDS AT LOW TEMPERATURES*
by: Jeppe C. Dyre

225/92 *"HATMODELLEN" Impedansspektroskopi i ultrarent en-krystallinsk silicium*
af: Anja Boisen, Anders Gorm Larsen, Jesper Varmer, Johannes K. Nielsen, Kit R. Hansen, Peter Bøggild og Thomas Hougaard
Vejleder: Petr Viscor

226/92 *"METHODS AND MODELS FOR ESTIMATING THE GLOBAL CIRCULATION OF SELECTED EMISSIONS FROM ENERGY CONVERSION"*
by: Bent Sørensen

227/92 "Computersimulering og fysik"
af: Per M.Hansen, Steffen Holm, Peter Maibom, Mads K. Dall Petersen, Pernille Postgaard, Thomas B.Schrøder, Ivar P. Zeck
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen

228/92 "Teknologi og historie"
Fire artikler af:
Mogens Niss, Jens Høyrup, Ib Thiersen, Hans Hedal

229/92 "Masser af information uden betydning"
En diskussion af informationsteorien i Tor Nørretranders' "Mærk Verden" og en skitse til et alternativ basseret på andenordens kybernetik og semiotik.
af: Søren Brier

230/92 "Vinklens tredeling - et klassisk problem"
et matematisk projekt af
Karen Birkelund, Bjørn Christensen
Vejleder: Johnny Ottesen

231A/92 "Elektrondiffusion i silicium - en matematisk model"
af: Jesper Voetmann, Karen Birkelund, Mette Olufsen, Ole Møller Nielsen
Vejledere: Johnny Ottesen, H.B.Hansen

231B/92 "Elektrondiffusion i silicium - en matematisk model" Kildetekster
af: Jesper Voetmann, Karen Birkelund, Mette Olufsen, Ole Møller Nielsen
Vejledere: Johnny Ottesen, H.B.Hansen

232/92 "Undersøgelse om den simultane opdagelse af energiens bevarelse og især deles om de af Mayer, Colding, Joule og Helmholtz udførte arbejder"
af: L.Arleth, G.I.Dybkjær, M.T.Østergård
Vejleder: Dorthe Posselt

233/92 "The effect of age-dependent host mortality on the dynamics of an endemic disease and Instability in an SIR-model with age-dependent susceptibility
by: Viggo Andreasen

234/92 "THE FUNCTIONAL DETERMINANT OF A FOUR-DIMENSIONAL BOUNDARY VALUE PROBLEM"
by: Thomas P. Branson and Peter B. Gilkey

235/92 OVERFLADESTRUKTUR OG POREUDVIKLING AF KOKS
- Modul 3 fysik projekt -
af: Thomas Jessen

236a/93 INTRODUKTION TIL KVANTE HALL EFFEKTEN

af: Anja Boisen, Peter Bøggild

Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
Erland Brun Hansen

236b/93 STRØMSSAMMENBRUD AF KVANTE HALL EFFEKTEN

af: Anja Boisen, Peter Bøggild

Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
Erland Brun Hansen

237/93 The Wedderburn principal theorem and Shukla cohomology

af: Lars Kadison

238/93 SEMIOTIK OG SYSTEMEGENSKABER (2)

Vektorbånd og tensorer

af: Peder Voetmann Christiansen

239/93 Valgsystemer - Modelbygning og analyse

Matematik 2. modul

af: Charlotte Gjerrild, Jane Hansen, Maria Hermannsson, Allan Jørgensen, Ragna Clauson-Kaas, Poul Lützen

Vejleder: Mogens Niss

240/93 Patologiske eksempler.
Om sære matematiske fisks betydning for den matematiske udvikling

af: Claus Dræby, Jørn Skov Hansen, Runa Ulsøe Johansen, Peter Meibom, Johannes Kristoffer Nielsen

Vejleder: Mogens Niss

241/93 FOTOVOLTAISK STATUSNOTAT 1

af: Bent Sørensen

242/93 Brovedligeholdelse - bevar mig vel

Analyse af Vejdirektoratets model for optimering af broreparationer

af: Linda Kyndlev, Kare Fundal, Kamma Tulinius, Ivar Zeck

Vejleder: Jesper Larsen

243/93 TANKEEKSPERIMENTER I FYSIKKEN

Et 1.modul fysikprojekt

af: Karen Birkelund, Stine Sofia Korremann

Vejleder: Dorthe Posselt

244/93 RADONTRANSFORMATIONEN og dens anvendelse i CT-scanning

Projektrapport

af: Trine Andreasen, Tine Guldager Christiansen, Nina Skov Hansen og Christine Iversen

Vejledere: Gestur Olafsson og Jesper Larsen

245a+b /93 Time-Of-Flight målinger på krystallinske halvledere
Specialerapport

af: Linda Szkotak Jensen og Lise Odgaard Gade

Vejledere: Petr Viscor og Niels Boye Olsen

246/93 HVERDAGSVIDEN OG MATEMATIK
- LÆREPROCESSER I SKOLEN

af: Lena Lindenskov, Statens Humanistiske Forskningsråd, RUC, IMFUFA

247/93 UNIVERSAL LOW TEMPERATURE AC CONDUCTIVITY OF MACROSCOPICALLY DISORDERED NON-METALS

by: Jeppe C. Dyre

248/93 DIRAC OPERATORS AND MANIFOLDS WITH BOUNDARY

by: B. Booss-Bavnbek, K.P.Wojciechowski

249/93 Perspectives on Teichmüller and the Jahresbericht Addendum to Schappacher, Scholz, et al.

by: B. Booss-Bavnbek

With comments by W.Abikoff, L.Ahlfors, J.Cerf, P.J.Davis, W.Fuchs, F.P.Gardiner, J.Jost, J.-P.Kahane, R.Lohan, L.Lorch, J.Radkau and T.Söderqvist

250/93 EULER OG BOLZANO - MATEMATISK ANALYSE SET I ET VIDENSKABSTEORETISK PERSPEKTIV

Projektrapport af: Anja Juul, Lone Michelsen, Tomas Højgård Jensen

Vejleder: Stig Andur Pedersen

251/93 Genotypic Proportions in Hybrid Zones

by: Freddy Bugge Christiansen, Viggo Andreasen and Ebbe Thue Poulsen

252/93 MODELLERING AF TILFÆLDIGE FÆNOMENER

Projektrapport af: Birthe Friis, Lisbeth Helmgaard, Kristina Charlotte Jakobsen, Marina Mosbæk Johannessen, Lotte Ludvigsen, Mette Hass Nielsen

253/93 Kuglepakning

Teori og model

af: Lise Arleth, Kåre Fundal, Nils Kruse

Vejleder: Mogens Niss

254/93 Regressionsanalyse

Materiale til et statistikkursus

af: Jørgen Larsen

255/93 TID & BETINGET UAFHÆNGIGHED

af: Peter Harremoës

256/93 Determination of the Frequency Dependent Bulk Modulus of Liquids Using a Piezoelectric Spherical Shell (Preprint)

by: T. Christensen and N.B.Olsen

257/93 Modellering af dispersion i piezoelektriske keramikker

af: Pernille Postgaard, Jannik Rasmussen, Christina Specht, Mikko Østergård

Vejleder: Tage Christensen

258/93 Supplerende kursusmateriale til "Lineære strukturer fra algebra og analyse"

af: Mogens Brun Heefelt

259/93 STUDIES OF AC HOPPING CONDUCTION AT LOW TEMPERATURES

by: Jeppe C. Dyre

260/93 PARTITIONED MANIFOLDS AND INVARIANTS IN DIMENSIONS 2, 3, AND 4

by: B. Booss-Bavnbek, K.P.Wojciechowski

261/93 OPGAVESAMLING
Bredde-kursus i Fysik
Eksamensopgaver fra 1976-93

262/93 Separability and the Jones Polynomial
by: Lars Kadison

263/93 Supplerende kursusmateriale til "Lineære strukturer fra algebra og analyse" II
af: Mogens Brun Heefelt

264/93 FOTOVOLTAISK STATUSNOTAT 2
af: Bent Sørensen

265/94 SPHERICAL FUNCTIONS ON ORDERED SYMMETRIC SPACES
To Sigurdur Helgason on his sixtyfifth birthday
by: Jacques Faraut, Joachim Hilgert and Gestur Olafsson

266/94 Kommensurabilitets-oscillationer i laterale supergitre
Fysikspeciale af: Anja Boisen, Peter Bøggild, Karen Birkelund
Vejledere: Rafael Taboryski, Poul Erik Lindelof, Peder Voetmann Christiansen

267/94 Kom til kort med matematik på Eksperimentarium - Et forslag til en opstilling
af: Charlotte Gjerrild, Jane Hansen
Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek

268/94 Life is like a sewer ...
Et projekt om modellering af aorta via en model for strømning i kloakrør
af: Anders Marcussen, Anne C. Nilsson, Lone Michelsen, Per M. Hansen
Vejleder: Jesper Larsen

269/94 Dimensionsanalyse en introduktion metaprojekt, fysik
af: Tine Guldager Christiansen, Ken Andersen, Nikolaj Hermann, Jannik Rasmussen
Vejleder: Jens Højgaard Jensen

270/94 THE IMAGE OF THE ENVELOPING ALGEBRA AND IRREDUCIBILITY OF INDUCED REPRESENTATIONS OF EXPONENTIAL LIE GROUPS
by: Jacob Jacobsen

271/94 Matematikken i Fysikken.
Opdaget eller opfundet
NAT-BAS-projekt
vejleder: Jens Højgaard Jensen

272/94 Tradition og fornyelse
Det praktiske elevarbejde i gymnasiets fysikundervisning, 1907-1988
af: Kristian Hoppe og Jeppe Guldager
Vejledning: Karin Beyer og Nils Hybel

273/94 Model for kort- og mellemdistanceløb
Verifikation af model
af: Lise Fabricius Christensen, Helle Pilemann, Bettina Sørensen
Vejleder: Mette Olufsen

274/94 MODEL 10 - en matematisk model af intravenøse anæstetikas farmakokinetik
3. modul matematik, forår 1994
af: Trine Andreasen, Bjørn Christensen, Christine Green, Anja Skjoldborg Hansen. Lisbeth Helmgaard
Vejledere: Viggo Andreasen & Jesper Larsen

275/94 Perspectives on Teichmüller and the Jahresbericht
2nd Edition
by: Bernhelm Booss-Bavnbek

276/94 Dispersionsmodellering
Projektrapport 1. modul
af: Gitte Andersen, Rehannah Borup, Lisbeth Friis, Per Gregersen, Kristina Vejrø
Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek

277/94 PROJEKTARBEJDSPÆDAGOGIK - Om tre tolkninger af problemorienteret projektarbejde
af: Claus Flensted Behrens, Frederik Voetmann Christiansen, Jørn Skov Hansen, Thomas Thingstrup
Vejleder: Jens Højgaard Jensen

278/94 The Models Underlying the Anaesthesia Simulator Sophus
by: Mette Olufsen(Math-Tech), Finn Nielsen (RISØ National Laboratory), Per Føge Jensen (Herlev University Hospital), Stig Andur Pedersen (Roskilde University)

279/94 Description of a method of measuring the shear modulus of supercooled liquids and a comparison of their thermal and mechanical response functions.
af: Tage Christensen

280/94 A Course in Projective Geometry
by Lars Kadison and Matthias T. Kromann

281/94 Modellering af Det Cardiovaskulære System med Neural Pulskontrol
Projektrapport udarbejdet af:
Stefan Frello, Runa Ulsøe Johansen, Michael Poul Curt Hansen, Klaus Dahl Jensen
Vejleder: Viggo Andreasen

282/94 Parallelle algoritmer
af: Erwin Dan Nielsen, Jan Danielsen, Niels Bo Johansen

283/94 Grænser for tilfældighed
(en kaotisk talgenerator)

af: Erwin Dan Nielsen og Niels Bo Johansen

284/94 Det er ikke til at se det, hvis man ikke lige ve' det!
Gymnasiematematikkens begrundelsesproblem

En specialerapport af Peter Hauge Jensen og Linda Kyndlev

Vejleder: Mogens Niss

285/94 Slow coevolution of a viral pathogen and its diploid host

by: Viggo Andreasen and Freddy B. Christiansen

286/94 The energy master equation: A low-temperature approximation to Bässler's random walk model

by: Jeppe C. Dyre

287/94 A Statistical Mechanical Approximation for the Calculation of Time Auto-Correlation Functions

by: Jeppe C. Dyre

288/95 PROGRESS IN WIND ENERGY UTILIZATION

by: Bent Sørensen

289/95 Universal Time-Dependence of the Mean-Square Displacement in Extremely Rugged Energy Landscapes with Equal Minima

by: Jeppe C. Dyre and Jacob Jacobsen

290/95 Modellering af uregelmæssige bølger
Et 3.modul matematik projekt

af: Anders Marcussen, Anne Charlotte Nilsson, Lone Michelsen, Per Mørkegaard Hansen

Vejleder: Jesper Larsen

291/95 1st Annual Report from the project
LIFE-CYCLE ANALYSIS OF THE TOTAL DANISH ENERGY SYSTEM

an example of using methods developed for the OECD/IEA and the US/EU fuel cycle externality study

by: Bent Sørensen

292/95 Fotovoltaisk Statusnotat 3

af: Bent Sørensen

293/95 Geometridiskussionen - hvor blev den af?

af: Lotte Ludvigsen & Jens Frandsen

Vejleder: Anders Madsen

294/95 Universets udvidelse - et metaprojekt

Af: Jesper Duelund og Birthe Friis

Vejleder: Ib Lundgaard Rasmussen

295/95 A Review of Mathematical Modeling of the Controled Cardiovascular System

By: Johnny T. Ottesen

296/95 RETIKULER den klassiske mekanik

af: Peder Voetmann Christiansen

297/95 A fluid-dynamical model of the aorta with bifurcations

by: Mette Olufsen and Johnny Ottesen

298/95 Mordet på Schrödingers kat - et metaprojekt om to fortolkninger af kvantemekanikken

af: Maria Hermannsson, Sebastian Horst, Christina Specht

Vejledere: Jeppe Dyre og Peder Voetmann Christiansen

299/95 ADAM under figenbladet - et kig på en samfundsvidenskabelig matematisk model

Et matematisk modelprojekt

af: Claus Dræby, Michael Hansen, Tomas Højgård Jensen

Vejleder: Jørgen Larsen

300/95 Scenarios for Greenhouse Warming Mitigation

by: Bent Sørensen

301/95 TOK Modellering af træers vækst under påvirkning af ozon

af: Glenn Møller-Holst, Marina Johannessen, Birthe Nielsen og Bettina Sørensen

Vejleder: Jesper Larsen

302/95 KOMPRESSORER - Analyse af en matematisk model for aksialkompressorer

Projektrapport sf: Stine Bøggild, Jakob Hilmer, Pernille Postgaard

Vejleder: Viggo Andreasen

303/95 Masterlignings-modeller af Glasovergangen
Termisk-Mekanisk Relaksation
Specialerapport udarbejdet af:

Johannes K. Nielsen, Klaus Dahl Jensen

Vejledere: Jeppe C. Dyre, Jørgen Larsen

304a/95 STATISTIKNOTER Simple binomialfordelingsmodeller

af: Jørgen Larsen

304b/95 STATISTIKNOTER Simple normalfordelingsmodeller

af: Jørgen Larsen

304c/95 STATISTIKNOTER Simple Poissonfordelingsmodeller

af: Jørgen Larsen

304d/95 STATISTIKNOTER Simple multinomialfordelingsmodeller

af: Jørgen Larsen

304e/95 STATISTIKNOTER Mindre matematisk-statistisk opslagsværk indeholdende bl.a. ordforklaringer, resuméer og tabeller

af: Jørgen Larsen

305/95 The Maslov Index:
A Functional Analytical Definition
And The Spectral Flow Formula

By: B. Booss-Bavnbek, K. Furutani

306/95 Goals of mathematics teaching

Preprint of a chapter for the forth-
comming International Handbook of
Mathematics Education (Alan J.Bishop, ed)

By: Mogens Niss

307/95 Habit Formation and the Thirdness of Signs

Presented at the semiotic symposium

The Emergence of Codes and Intensions as
a Basis of Sign Processes

By: Peder Voetmann Christiansen

308/95 Metaforer i Fysikken

af: Marianne Wilcken Bjerregaard,
Frederik Voetmann Christiansen,
Jørn Skov Hansen, Klaus Dahl Jensen
Ole Schmidt

Vejledere: Peder Voetmann Christiansen og
Petr Viscor

309/95 Tiden og Tanken
En undersøgelse af begrebsverdenen Matematik
udført ved hjælp af en analogi med tid

af: Anita Stark og Randi Petersen

Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek

310/96 Kursusmateriale til "Lineære strukturer fra
algebra og analyse" (E1)

af: Mogens Brun Heefelt

311/96 2nd Annual Report from the project
LIFE-CYCLE ANALYSIS OF THE TOTAL DANISH
ENERGY SYSTEM

by: Hélène Connor-Lajambe, Bernd Kuemmel,
Stefan Krüger Nielsen, Bent Sørensen

312/96 Grassmannian and Chiral Anomaly

by: B. Booss-Bavnbek, K.P.Wojciechowski

313/96 THE IRREDUCIBILITY OF CHANCE AND
THE OPENNESS OF THE FUTURE
The Logical Function of Idealism in Peirce's
Philosophy of Nature

By: Helmut Pape, University of Hannover

314/96 Feedback Regulation of Mammalian
Cardiovascular System

By: Johnny T. Ottesen

315/96 a + b "Rejsen til tidens indre" - Udarbejdelse af
et manuskript til en fjernsynsudsendelse
+ manuskript

af: Gunhild Hune og Karina Goyle

Vejledere: Peder Voetmann Christiansen og
Bruno Ingemann

316/96 Plasmaoscillation i natriumklynger

Specialerapport af: Peter Meibom, Mikko Østergård

Vejledere: Jeppe Dyre & Jørn Borggreen

317/96 Poincaré og symplektiske algoritmer

af: Ulla Rasmussen

Vejleder: Anders Madsen

318/96 Modelling the Respiratory System

by: Tine Guldager Christiansen, Claus Dræby

Supervisors: Viggo Andreasen, Michael Danielsen

319/96 Externality Estimation of Greenhouse Warming
Impacts

by: Bent Sørensen

320/96 Grassmannian and Boundary Contribution to the
-Determinant

by: K.P.Wojciechowski et al.

321/96 Modelkompetencer - udvikling og afprøvning
af et begrebsapparat

Specialerapport af: Nina Skov Hansen,
Christine Iversen, Kristin Troels-Smith

Vejleder: Morten Blomhøj

322/96 OPGAVESAMLING
Bredde-Kursus i Fysik 1976 - 1996

323/96 Structure and Dynamics of Symmetric Diblock
Copolymers
PhD Thesis

by: Christine Maria Papadakis

324/96 Non-linearity of Baroreceptor Nerves

by: Johnny T. Ottesen

325/96 Retorik eller realitet ?
Anvendelser af matematik i det danske
Gymnasiums matematikundervisning i
perioden 1903 - 88

Specialerapport af Helle Pilemann

Vejleder: Mogens Niss

326/96 Bevisteori
Eksemplificeret ved Gentzens bevis for
konsistensen af teorien om de naturlige tal

af: Gitte Andersen, Lise Mariane Jeppesen,
Klaus Frovin Jørgensen, Ivar Peter Zeck

Vejledere: Bernhelm Booss-Bavnbek og
Stig Andur Pedersen

327/96 NON-LINEAR MODELLING OF INTEGRATED ENERGY
SUPPLY AND DEMAND MATCHING SYSTEMS

by: Bent Sørensen

328/96 Calculating Fuel Transport Emissions

by: Bernd Kuemmel

329/96 The dynamics of cocirculating influenza strains conferring partial cross-immunity

and

A model of influenza A drift evolution

by: Viggo Andreasen, Juan Lin and Simon Levin

330/96 LONG-TERM INTEGRATION OF PHOTOVOLTAICS INTO THE GLOBAL ENERGY SYSTEM

by: Bent Sørensen

331/96 Viskøse fingre

Specialerapport af:

Vibeke Orlien og Christina Specht

Vejledere: Jacob M. Jacobsen og Jesper Larsen

332/97 ANOMAL SWELLING AF LIPIDE DOBBELTLAG

Specialerapport af:

Stine Sofia Korremann

Vejleder: Dorthe Posselt

333/97 Biodiversity Matters

an extension of methods found in the literature on monetisation of biodiversity

by: Bernd Kuemmel

334/97 LIFE-CYCLE ANALYSIS OF THE TOTAL DANISH ENERGY SYSTEM

by: Bernd Kuemmel and Bent Sørensen

335/97 Dynamics of Amorphous Solids and Viscous Liquids

by: Jeppe C. Dyre

336/97 PROBLEM-ORIENTATED GROUP PROJECT WORK AT ROSKILDE UNIVERSITY

by: Kathrine Legge

337/97 Verdensbankens globale befolkningsprognose

- et projekt om matematisk modellering

af: Jørn Chr. Bendtsen, Kurt Jensen, Per Pauli Petersen

Vejleder: Jørgen Larsen

338/97 Kvantisering af nanolederes elektriske ledningsevne

Første modul fysikprojekt

af: Søren Dam, Esben Danielsen, Martin Niss, Esben Friis Pedersen, Frederik Resen Steenstrup

Vejleder: Tage Christensen

339/97 Defining Discipline

by: Wolfgang Coy

340/97 Prime ends revisited - a geometric point of view -

by: Carsten Lunde Petersen

341/97 Two chapters on the teaching, learning and assessment of geometry

by Mogens Niss

342/97 LONG-TERM SCENARIOS FOR GLOBAL ENERGY DEMAND AND SUPPLY

A global clean fossil scenario discussion paper

prepared by Bernd Kuemmel

Project leader: Bent Sørensen

343/97 IMPORT/EKSPORT-POLITIK SOM REDSKAB TIL OPTIMERET UDNYTTELSE AF EL PRODUCERET PÅ VE-ANLÆG

af: Peter Meibom, Torben Svendsen, Bent Sørensen

344/97 Puzzles and Siegel disks

by Carsten Lunde Petersen

345/98 Modeling the Arterial System with Reference to an Anestesia Simulator

Ph.D. Thesis

by: Mette Sofie Olufsen

346/98 Klyngedannelse i en hulkatode-forstøvningsproces

af: Sebastian Horst

Vejledere: Jørn Borggren, NBI, Niels Boye Olsen

347/98 Verificering af Matematiske Modeller

- en analyse af Den Danske Eulerske Model

af: Jonas Blomqvist, Tom Pedersen, Karen Timmermann, Lisbet Øhlenschlæger

Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek

348/98 Case study of the environmental permission procedure and the environmental impact assessment for power plants in Denmark

by: Stefan Krüger Nielsen

Project leader: Bent Sørensen

349/98 Tre rapporter fra FAGMAT - et projekt om tal og faglig matematik i arbejdsmarkedsuddannelserne

af: Lena Lindenskov og Tine Wedege

350/98 OPGAVESAMLING - Bredde-Kursus i Fysik 1976 - 1998

Erstatter teksterne 3/78, 261/93 og 322/96

351/98 Aspects of the Nature and State of Research in Mathematics Education

by: Mogens Niss

352/98 The Herman-Swiatec Theorem with applications

by: Carsten Lunde Petersen

353/98 Problemløsning og modellering i en almendannende matematikundervisning

Specialerapport af: Per Gregersen og Tomas Højgaard Jensen

Vejleder: Morten Blomhøj

354/98 A GLOBAL RENEWABLE ENERGY SCENARIO

by: Bent Sørensen and Peter Meibom

355/98 Convergence of rational rays in parameter spaces

by: Carsten Lunde Petersen and Gustav Ryd

356/98 Terrænmodellering
Analyse af en matematisk model til konstruktion af terrænmodeller

Modelprojekt af: Thomas Frommelt, Hans Ravnkjær Larsen og Arnold Skimminge

Vejleder: Johnny Ottesen

357/98 Cayleys Problem
En historisk analyse af arbejdet med Cayley problem fra 1870 til 1918

Et matematisk videnskabsfagsprojekt af:
Rikke Degn, Bo Jakobsen, Bjarke K.W. Hansen, Jesper S. Hansen, Jesper Udesen, Peter C. Wulff

Vejleder: Jesper Larsen