

Von invarianten Variationsproblemen zu den idealen Wegen der Bewegung: Symmetrieerhaltung in Thermodynamik, Mechanik und Quantenmechanik

Gewidmet zum 100. jährlichen Weltfrauentag, in tiefer Verneigung, Emmy Noether, der ersten Apl. Professorin in Göttingen und Deutschland. Göttingen, den 08.03.2021.

Ausarbeitung zu meinem Vortrag mit dem Titel „Raum und Zeit in Chemie und Physik: Die Noetherschen kontinuierlichen Symmetrien im Lichte der statistischen Mechanik“, Mathematische Gesellschaft Göttingen am 11.02.2021

I. Thermodynamik

Integrale zeitliche und räumliche Symmetrie der Energieerhaltung und -wandlung

Die Energieerhaltung im abgeschlossenen System.

Standpunkt Noether-Gauß, innen: Innere zeitliche Euler-Lagrange-Fluktuationen erzeugen oder vernichten keine Energie (Noether-Theorem). Integralsatz von Gauß impliziert: Kein Fluss durch die Wand.

Standpunkt Grenzfläche/Wand: Ist sie über die Zeit hinweg immer dicht, kein Fluss. Energie innen muss dann konstant sein und sich außen wie innen an die Flussnullstelle der Grenzfläche anpassen.

Standpunkt außen: Es strömt in der Zeit nichts nach außen oder von außen nach innen: Auch das impliziert Energieerhaltung.

Das Fließgleichgewicht ist davon zu unterscheiden, es gehört zu geschlossenen und offenen Systemen.

Der dynamische Euler-Lagrange-Standpunkt des Noether-Theorems erfordert mikroskopische Energieerhaltung und damit bei mikroskopischen Übergängen den temporären Wechsel in die implizite Zeit-Energie-Lagrange-Bewegung, während die Hamilton-Bewegung die makroskopische Konstanz von Energie (mittlere zeitliche Energiefluktuationen löschen sich aus) und gemitteltem Impuls (mittlere räumliche Bewegung) beschreibt.

Differentielle räumliche und zeitliche Symmetrie der Energiewandlung

Der effektivste Weg der Energiewandlung ist der minimaler Entropiezunahme (Standpunkt Zustandsfunktion Entropie S), maximaler Arbeitsverrichtung (Räumlicher Standpunkt des Weges, Volumenarbeit) und minimaler Wärmeabgabe (Zeitlicher Standpunkt des Weges, Wärmeabgabe).

Je langsamer, desto leichter arbeitstechnisch optimierbar. Zielkonflikt Zeit/Effizienz!

Der ineffektivste Weg ist der maximaler Wärmefreisetzung, oder maximaler Entropiezunahme und ohne Arbeitsverrichtung, Stichwort Tauchsieder. Eine geschickte Kopplung der Wege führt zur Wärmepumpe/Klimaanlage.

(Sehr) Hypothetisches Fazit:

Diese jeweils dreifach äquivalenten Aussagen lassen sich eventuell als „Primideale“ einer Axiomatik im aus der Ringtheorie übertragenen noetherschen Sinne auffassen. Sie sind irreduzible Aussagen, Invarianten des axiomatischen Systems mit hoher Darstellungsvarianz, somit einer hohen „Symmetriedichte“, die bei der Formulierung einer physikalischen Axiomatik optimal ausgenutzt werden sollte. Aus mathematischer Perspektive erinnert das an die Gaußschen Beweisvarianten des quadratischen Reziprozitätsgesetzes.

II. Mechanik

Ideale Newton-Einstein-Bewegung

Körper im Gleichgewicht mit der Schwerkraft sind schwerelos, ihre Bahnen sind zwanglos, also frei von Zwangskräften.

Träge Masse und Gewicht kommen durch Zwangskräfte in die Welt: Das Gewicht als Gegenkraft zur Gravitation, kinematische Trägheit durch andere bremsende oder beschleunigende Kräfte (Reibung, Motor/Antrieb, etc.), algebraische Trägheit durch implizite Nebenbedingungen, die den kinematischen Bewegungsraum lokal explizit einschränken.

Kraft ist im Verhältnis zur idealen Bahn immer eine Zwangskraft, eine differentielle Erhaltungsgröße erzwungener Bewegungen, die die träge Masse erzeugen. Die schwere Masse ist eine differentielle Erhaltungsgröße der Bewegung allgemein, sie erzeugt die Schwerkraft. Das scheint der wesentliche Unterschied zwischen schwerer und träger Masse zu sein.

Bei idealisierter kräftefreier Bewegung ohne Gravitation bleibt der Impuls ohne Rückkopplung erhalten. Im Realfall sorgt immer $\text{actio} = \text{reactio}$ für die Schwerpunktimpulserhaltung, da die Schwerkraft überall bindend wirkt.

Natürliche Zwangskräfte erzeugen Linien und Kreise, die Gleichgewichtsbahnen der Schwerkraft, und beschreiben die lokale Schwerpunktimpulserhaltung und Drehimpulserhaltung.

Die natürliche Berechnung einer Nicht-Gleichgewichts-Bewegung geht über die zeitliche Relaxation von Bahnen zwischen zwei gewählten Zeitpunkten. Schwerkraft und kinematische Kraft überlagern sich und werden an jedem Ort und Zeitpunkt der Bahn auf den Geschwindigkeitsvektor (lokale Bahnrichtung definierend) und den Drehvektor (lokale Drehrichtung definierend, liegt in der zum Bahnvektor orthogonalen Hyperebene) projiziert. Vektorprojektion, -addition und -drehung sowie Kraftmultiplikation (analytische Kraftgleichungen) spielen orthogonal austariert zusammen, einzige Differentialoperation ist die iterative Verkürzung der Zeitschritte bei der Bahnrelaxation. Diese Operationen zeigen und erzeugen die natürlichen differentiellen Größen Kraft/Beschleunigung (lokale Linie) und Richtungsänderungsrate (lokaler Kreis).

Vermutung: Die gravitative Zeitdilatation gehört zu einer weiteren, relativistischen Drehachse. Die Überlagerung beider Drehungen erzeugt die lokale Raumzeitkrümmung, den natürlichen Weg der maximalen Zeitdehnung definierend.

III. Kinetische Mechanik und Quantenmechanik

Ein abgeschlossenes Gasphasensystem mit konstantem Volumen lässt sich makroskopisch in einen quasi-stationären Hamilton-Flugraum und einen transienten, dazu Legendre-transformierten Lagrange-Stoßraum zerlegen. Mikroskopisch lässt sich jedes Molekül, jeder Stoßkomplex und jeder Cluster darin temporär in einen (oft quasi-) stationären Hamilton-Zustand und einen transienten Lagrange-Zustand unterteilen. Der mikroskopische Lagrange-Zustand beschreibt über eine Bewegungskordinate, in der Chemie Reaktionskoordinate, Energetik und Kinetik aller reaktiven und nicht reaktiven zeitlichen Übergänge, der Hamilton-Zustand beschreibt für die stabilen Zustände die innere Struktur der Energiespeicherung.

Die Lagrange-Funktion $L(t) = E_{\text{kin}}(t) - E_{\text{pot}}(t)$ beschreibt für Übergänge die freie kinetische Energie im Verhältnis zur Barrierenhöhe, dieses Verhältnis wird beim Eintritt in den transienten Kanal durch die dem Massenschwerpunkt übergebene kinetische Energie bestimmt. Die Bedingung für einen erfolgreichen Übergang ist $(L(t_0) - L(t))_{\text{max}} \geq 2 E_{\text{Barriere}}$, dass also die Wertespanne in der transienten Koordinate die doppelte Barrierenhöhe umfasst. In bestimmten Fällen lassen sich Übergangszustände zeitlich stabilisieren.

Die Besonderheit der Legendre-Transformation von L nach H ist die differentielle und multiplikative Kopplung der mechanischen Zustandsvariablen Impuls p und Geschwindigkeit v . Sie lassen sich (bis auf den Faktor 2 aus der Ableitung) multiplikativ und differentiell ineinander überführen. Das führt zu 4 Erhaltungsgrößen: Kraft $F = m \cdot a$ und kinetische Energie $m/2v^2$ als zeitliche Ableitung und zeitliches Integral des Impulses, sowie schwere Masse m und die Energie mv^2 als Quotient und Produkt von v und p . Die symmetrische Struktur legt nahe, dass unter relativistischen Bedingungen die multiplikative Erhaltungsgröße mv^2 und die differentielle $m/2v^2$ im Limit in $E=mc^2$ zusammenkommen. Dies sieht man bei der Legendre-Transformation eines harmonisch zwischen klassischer und relativistischer Bewegung oszillierenden Lagrange-Oszillators, der unter Aufbau von Feldenergie in einen stationären harmonischen Hamilton-Oszillator übergeht.

Quantenmechanisch führt das zur vollständigen Orthogonalisierung der Zustands- bzw. Bewegungsräume:

Im stationären Hilbertraum mit imaginärer Phase/Zeit und realer Amplitude gilt die Heisenbergsche Unschärferelation (Limitierung der gekoppelten Impuls-Ortsauflösung) und die Schrödinger-Gleichung liefert die Feinstruktur der Energiespeicherung (allerdings nur unter Berücksichtigung relativistischer Effekte wie Spin, Stichwort Dirac-Gleichung, coupled cluster Verfahren).

Der quantenmechanische Übergang gehört zum transient-dynamischen Lagrange-Bewegungsraum mit imaginärer Amplitude und realer Phase. Er hat zwei separable Komponenten der Dynamik:

Eine Legendre-Projektion von Start- und Zielzustand in den Übergangszustand (ÜZ) liefert über geeignete (Skalar)Produkte ein geometrisches Mittel, das die Übergangswahrscheinlichkeit beschreibt. Dies sind kinetisch-statistisch-mechanisch als Näherung die Zustandssummen von Edukt und der ÜZ selbst (Stichworte „no return“ Annahme, variational TST) und der Boltzmannfaktor (Einpreisung der Nullpunktsenergiedifferenz Edukt-ÜZ), die die Vergleichgewichtskonstante des aktivierten Komplexes K^* beschreiben. Spektroskopisch sind das die Überlappungsintegrale der Wellenfunktionen von Start- und Zielzustand. Die Produkte stellen in beiden Fällen einen Symmetrieabgleich zwischen Start- und Zielzustand her, je ähnlicher oder energetisch näher die Geometrie/Symmetrie, desto wahrscheinlicher bzw. widerstandsärmer der Übergang.

Diese eher statische Komponente gehört zum zur Bewegungskordinate orthogonalen Zustandsraum des mikroskopischen Systems und kann als freie potentielle Energie im ÜZ (Schwierig: Anteil der Rotation, Stichwort RRKM-Theorie) oder freier Phasenraumvolumenanteil des ÜZ aufgefasst werden. Sie beschreibt eine Anregungswahrscheinlichkeit oder reziprok den dynamischen Widerstand und ist im mikroskopischen Limit eine Legendre-Projektion mit imaginärer Amplitude, die räumlich nicht in einem Schritt gemessen werden kann.

Die dynamische Phasenkomponente von $L(t)$ liefert für mechanische Übergänge mit E/h die Eyring-Theorie und für spektroskopische Übergänge mit $\nu = E/h$ die Planck-Einstein-Beziehung. Die Phasengeschwindigkeit ist eine reale und messbare Größe, und koppelt damit an die relativistische Zeitdilatation.

Die thermodynamische Legendre-Transformation von U nach G ergibt die mittlere Bahnbreite und Steigung, die mechanische von H nach L die mittlere Bahngeschwindigkeit und zusammen ergeben alle drei den effektiven Fluss im Übergang. Die Legendre-Symmetrie erlaubt seine multiplikative Berechnung aus den passenden, charakteristischen und (quasi-)stationären Hamilton-Zuständen am Start, im ÜZ und am Ziel.

Die Möglichkeit einer Reaktion oder eines Übergangs in einem vorgegebenen Zeitfenster führt quantenmechanisch zu einer nur noch quasi-stationären Amplitude eines nun instabilen Hamilton-Zustands. Seine nun reale Phase $(E=k_B T)/h$ ist wie die mittlere Energie pro Normalmode $E_{av} = k_B T$ eine observable Eigenschaft der Gesamtwellenfunktion des Systems.

Das Geschwindigkeitsgesetz der Theorie des aktivierten Komplexes

$$dE/dt = \Delta_{R,element} E \cdot d[Edukt]/dt = -[Edukt] \cdot E/h \cdot K^* (=p(\text{Aktivierung pro Phasenzklus}))$$

gilt allgemein und liefert über seine Integration die Exponentialfunktion als universelle, vollständig symmetrische zeitliche Bahn des Übergangs mit der Halbwertszeit $\ln 2 / (E/h) \cdot K^*$ als charakteristischer differentieller Erhaltungsgröße:

$$\Psi(t)(\text{System}) = [Edukt] \cdot \Psi(t)(\text{Element}) = \Psi(t=0)(\text{System, normiert}) \cdot \exp(-t \cdot (E/h) \cdot K^*)$$

Die differentielle Formulierung gehört zum Grenzwert großer Teilchenzahlen.

Postuliert man für die zeitliche Synchronisation im chemisch-mechanischen System ein Austauschteilchen (Graviton), analog zu den Austauschteilchen Photon für die elektromagnetische und Gluon für die starke Wechselwirkung, so werden die exponentiellen Zeitverläufe bei unimolekularen Reaktionen, der Lichtemission über Fluoreszenz/Phosphoreszenz und bei radioaktiven Zerfällen durch einen universellen Mechanismus erklärbar. Auch die zeitliche Synchronisation bei einer quantenverschränkten Bewegung und bei ihrer Auflösung ist kompatibel mit und verständlich in diesem Mechanismus. Als maximale Phasengeschwindigkeit ergibt sich aus der Planckzeit:

$$\sqrt{\frac{c^5}{G\hbar}}$$

Wenn gültig für die Quantenverschränkung, dann bedeutet das instantane Relaxation auch für kosmische Entfernungen. Im Kleinen scheinen in diesem Bild bei der Photosynthese Photon und Graviton optimal zusammenzuwirken.

Beobachtung: Der energetische Lagrange-Phasenzyklus geht im harmonischen Oszillator während einer Periode für $L (=E_{\text{kin}} - E_{\text{pot}})$ viermal von E_{ges} nach $-E_{\text{ges}}$ während E_{kin} viermal zwischen 0 und E_{kin} oszilliert, in jede Richtung zweimal auf dem Hin- und Rückweg, also jeweils mit vertauschten Vorzeichen.

Mikroskopisch kann das die hälftige Aufteilung der gewonnenen Feldenergie in kinetische Energie beim H-Atom aus dem Übergang instationär/Lagrange zu stationär/Hamilton heraus erklären. Ähnlich zur differentiellen Wegsymmetrie in der Thermodynamik bei Entropie, Arbeit und Wärme: Wenn jeder einzelne Lagrange-Teil-Zyklus die Hälfte der gewonnenen potentiellen Energie in kinetische umwandelt, dann muss auch der stationäre Gleichgewichtszustand diese Aufspaltung zeigen. Nur die hälftige Aufteilung zeigt konstruktive Interferenz (ähnlich: Pfadintegrale Feynman).

Die Auswahlregeln für Rotations- und Schwingungsanregungen scheinen auf Phasenauslöschung der mechanischen Wellenfunktionen während des Übergangs zurückführbar sein. Für höhere Anregungen sind mehrfache Lagrange-Teil-Zyklen auf dem Weg erforderlich, die dann destruktiv interferieren. Im anharmonischen Oszillator ist diese Auslöschung unvollständig. Für elektronische Übergänge ist die radiale Anregung von der räumlich-sphärischen entkoppelt und erlaubt $\Delta l=1$ Kaskaden, die sich inzwischen in der räumlichen Symmetrie/Geometrie (p oder f) ausgehender Elektronen-Wellen sogar experimentell nachweisen lassen.

Die maximale mikroskopische Orthogonalität und Parallelität von Hilbert-Hamilton-Bewegung und Lagrange-Bewegung zeigt sich in charakteristischen Experimenten, die den statistischen Charakter von räumlicher Impuls- und zeitlicher Energieflussunschärfe/-limitierung herausarbeiten.

Im Spaltexperiment mit perfekt präparierten Elektronenimpulsen hat man unendlich viel Zeit, das Beugungsmuster auf dem Schirm zu präparieren. Individuelle Messzeitpunkte spielen keine Rolle. Der Landeplatz ist für einzelne Elektronen nicht vorhersagbar. Die Schärfe des Beugungsmusters ist eine Funktion der Ensemblegröße, der Anzahl gelandeter Elektronen.

Im kinetischen Experiment muss mit Lasertechnik der Startzeitpunkt möglichst scharf präpariert werden. Die Zeitauflösung des Experiments muss gut genug sein, um den charakteristischen zeitlichen Verlauf zu zeigen. Es wird also zeitgleich ein Ensemble chemisch aktivierter Moleküle präpariert. Der Reaktionszeitpunkt ist für einzelne Moleküle nicht vorhersagbar. Die Schärfe des gemessenen exponentiellen Konzentrationsprofils ist eine Funktion der Ensemblegröße, der Anzahl synchron aktivierter Moleküle.

Im gekoppelten Hilbert/Hamilton-Lagrange-Bild ist die Superposition des Elektrons beim Spaltversuch ein langlebiger Lagrange-Übergangszustand mit imaginärer Amplitude und damit nicht in einem Einzelschritt messbar. Im Messvorgang relaxiert die Lagrange-Welle in einen Hamilton-Eigenzustand. Der ist messbar/sichtbar. In der Chemie wäre das Analogon die Relaxation des in einem Einzelschritt nicht messbaren Übergangszustandes einer Multikanalreaktion in eins der möglichen Produktmuster. In diesem Bild wäre es paradox, alle möglichen Einzelprodukte auf einmal bei einer Einzelmessung zu erwarten. Im Hamilton-Lagrange-Bild ist das Elektron ein Teilchen, das sich zwischen Spalt und Photoplatte in einer durch die Rauminhomogenität am Spalt aufgezwungenen, sich verbreiternden (reale Phase) Wellenbewegung fortbewegt.

Zum Schluss bleibt noch die Feststellung, dass im Vortrag am 11.02.2021 eine frappierende Analogie von mechanischer Zeitschritt- und elektrodynamischer Maxwell-Einstein-Bewegung herausgearbeitet wurde. Die dabei auch festgestellte Erhaltung der Kopplungsfreiheitsgrade von E- und B-Feld in den Maxwell-Gleichungen legt mehr Freiheitsgrade für die Schwerkraftbewegung nahe, wie z.B. stehende Gravitationswellen und damit verbunden eventuell auch rotative G-Feld-Komponenten, die wiederum im Zusammenhang mit dunkler Energie und Materie stehen könnten.

Schlussbemerkungen:

Der Autor hat in dieser kompakten Ausarbeitung versucht, ein konsistentes axiomatisches Modell für die zeitliche und räumliche Bewegung in Thermodynamik, Mechanik und Quantenmechanik zu entwickeln. Es basiert auf der Synthese des Standpunktes Reaktionskinetik/Thermodynamik mit dem Standpunkt Lagrange-Hamilton-Mechanik/Wellenmechanik-Schrödingergleichung und spiegelt den Spannungsbogen der Methoden wider, die in der Forschung unserer Gruppe und unserer Kooperationspartner zur Anwendung kommen [1-5]. Es ist das Kondensat mehrerer Jahrzehnte Auseinandersetzung mit den Modell- und Begriffsbildungen in diesen Feldern in Lehre und Forschung. Zunächst ist es nur eine Mindmap, eine formal-logische Vernetzung, ohne Ausarbeitung aller Details. Eine ausführlichere Darstellung ist aber angestrebt.

Schlüssel für das hier postulierte und abgeleitete Modell ist die Beobachtung in Experiment und Simulation, dass mikroskopisch 2 nm große Eiskristalle/-tröpfchen im Phasengleichgewicht zwischen flüssig und fest schwingen können, während im makroskopischen Phasengleichgewicht Eis und Wasser räumlich und zeitlich zu ruhen scheinen [3]. Raum und Zeit tauschen also mikroskopisch ihre Rollen in der Phasendiskriminierung. Wenn man nun davon ausgehend, und hier kommt die Verbindung zu Emmy Noethers Theorem, die Heisenbergsche Unschärferelation als mikroskopische Realisierung der Impulserhaltung bei Raumhomogenität identifiziert, landet man sofort bei der Frage nach dem mikroskopischen Pendant für die Zeit-Energiekopplung. Als gelernter Reaktionskinetiker landet man dann wieder sofort bei der Eyring-Theorie zur Dynamik des chemischen Übergangs und der Energieflusslimitierung, die sich, mathematisch vorgebildet, wiederum als fehlendes orthogonales Symmetrieelement identifizieren lässt. Die Theorie von R. Steven Berry zu den mikroskopischen Flüssig-Fest-Oszillationen in Clustern basiert nach meinem Verständnis auf der Wegsymmetrie beim Schrittweisen Zerschneiden/Halbieren eines Volumens im Phasengleichgewicht, darauf also, dass in jedem Schritt bzw. Schnitt die Symmetrie des Phasenübergangs erhalten bleiben muss, weil die Boltzmann-Statistik es erzwingt. Am unteren Ende gelingt das nur noch im Lagrange-Bewegungsraum mit impliziter energetischer Struktur und zeitlicher Dynamik. Die Berry-Theorie hat aus meiner Sicht das hier ausgearbeitete im wesentlichen vorweggenommen. Das zeigt sich auch in der Präsentation der Physikalischen Chemie im Lehrbuch von Berry, Rice und Ross, das für den Autor meist Ausgangspunkt seiner eigenen Lehre ist.

Ein zweiter Strang, der erst am Ende mit eingeflochten werden konnte, startet mit der Beobachtung, dass sich für die Brachistochrone, die schnellste Verbindung zweier Punkte im Schwerfeld der Erde über eine reibungsfreie Postrutsche, die Euler-Lagrange-Gleichung in ein Laufzeitminimierungsproblem umwandelt. „Kann das nicht allgemein erreicht werden, z.B. über geeignete Zeitschrittverfahren?“, war hier meine Frage. Wie das geht, sieht man, wenn man die Gleichgewichtsbedingung für Extrema unter Nebenbedingungen im Verfahren der Lagrange-Multiplikatoren geometrisch, bahnbezogen deutet. Es ist genau dann die notwendige Bedingung für ein Extremum unter Nebenbedingungen erfüllt, wenn der Gradient der Funktion im orthogonalen „Orientierungsraum“ zur Bahn liegt, der über die „Pseudogradienten“ der implizit gegebenen Nebenbedingungen für jeden Punkt der Bahn direkt beschrieben werden kann. Für alle anderen Punkte der Bahn bekommt man so die effektiven Beschleunigungen in die erlaubten Richtungen, also in den generalisierten Koordinaten und damit die Bahn unter Nebenbedingungen/Zwangskräften. Dies führt zu einer Bewegungsgleichung, die im $v(t) + a(t) \cdot \Delta t/2$ Term für die Längsbeschleunigung, die Dynamik von Stromfluss (masseartige Bewegung) und Verschiebungsstrom (feldartige Bewegung) widerspiegelt, was für relativistische Bedingungen die Entstehung von Gravitationswellen in Analogie zur elektromagnetischen Strahlung plausibel macht (bereits etwas detaillierter ausgeführt im Vortrag in der Mathematische Gesellschaft vom 11.02.2021).

In der Zusammenschau dieser Befunde ergab sich dann die Identifizierung des Noethertheorems als „Integralsatz“ über globale Erhaltungsgrößen und die Verbindung der Legendre-Transformation mit lokalen, differentiellen Erhaltungsgrößen, über die ideale, ausgezeichnete Wege beschrieben werden können. Diese wiederum sind bereits länger als Strukturelemente im Visier unserer Forschung [2]. Ausgehend von diesem Ergebnis wurde die hier vorgelegte Verdichtung der Befunde in Angriff genommen.

Aus Sicht des Autors ergibt sich in der Summe eine sehr sparsame Verbindung von Standard-Modell und relativistischer Gravitation. Die mikroskopische Energie-Zeit-Kopplung gehört zu den Austauschteilchen der Wechselwirkungen, die um das „Graviton“ für die „mechanische oder thermische Uhr“ ergänzt werden. Das Higgs-Feld gehört zur Gravitation als „Urkraft“, die über räumliche Anregungen Masse und zeitliche Anregungen eine Synchronisierung mikroskopischer Energie- und Informationsaustauschprozesse bewirkt. Die Quantenmechanik funktioniert so hervorragend, weil über „Legendre-Projektionen“ die Übergangswahrscheinlichkeiten aus stationären Hamilton-Zuständen (Skalar)multiplikativ berechnet werden können. Die statistische Natur von Reaktionskinetik und die Wassercluster-Oszillationen stehen aber im Widerspruch zur Annahme einer klassischen, symmetrischen Zeit, welcher durch den Zeitlichkeit-verleihenden Charakter der Austauschteilchen als reale Phase des Übergangs aufgelöst wird.

Ich stelle hier keine Ansprüche auf irgendeine Deutungshoheit, die Formulierung der Axiomatik und Hypothesen entspricht meinem wissenschaftlichen Anspruch, die Ergebnisse unserer Forschung und Lehre über den Tellerrand hinaus weiterzudenken.

Letztlich muss ich eingestehen, Emmy Noethers genialen Ansatz, systematisch nach den Invarianten zu suchen, zwar immer wieder unbewusst verfolgt, aber lange eben nicht systematisch verstanden und angewandt habe. Damit bin ich aber scheinbar nicht allein. Dies habe ich nun in dieser Ausarbeitung versucht nachzuholen.

Vielleicht ist es insgesamt an der Zeit, bei allem Ausdifferenzieren im globalen Wissenschaftsbetrieb sich auf Emmy Noether zu besinnen und viel stärker zu versuchen, die verbindenden Strukturelemente, bei aller faszinierenden Vielfalt eben die Invarianten nicht aus dem Auge zu verlieren. Jedes neue irreduzible Strukturelement kann es schaffen, eine Vielzahl von Phänomenen über Disziplinen hinweg als Variation ein und desselben Musters zu verstehen. Das schafft Orientierung und bringt die Erkenntnistheorie als übergeordnete philosophische Disziplin aller Wissenschaft wieder mehr ins Spiel.

[1] N. Gielmshein, S. Gielmshein, C. C. Pradzysnki, T. Zeuch, U. Buck: “The temperature and size distribution of large water clusters from a non-equilibrium model”, *J. Chem. Phys.* **132** (2015) 244305.

[2] K. Hoyer mann, F. Mauß, M. Olzmann, O. Welz, T. Zeuch: “Exploring the chemical kinetics of partially oxidized intermediates by combining experiments, theory, and kinetic modeling “, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** (2017) 18128-18146.

[3] D. Moberg, D. Becker, C. W. Dierking, F. Zurheide, B. Bandow, U. Buck, A. Hudait, V. Molinero, F. Paesani, T. Zeuch: “The end of ice I “, *Proc. National Academy Sci. USA.* **116** (2019) 24413-24419.

[4] P. T. M. Carlsson, S. Celik, D. Becker, T. Olenius, J. Elm, T. Zeuch: “Neutral Sulfuric Acid–Water Clustering Rates: Bridging the Gap between Molecular Simulation and Experiment“, *J. Phys. Chem. Lett.* **19** (2020) 4239-4244.

[5] D. Becker, C. W. Dierking, J. Suchan, F. Zurheide, J. Lengyel, M. Fárník, P. Slaviček, U. Buck, T. Zeuch: “Temperature evolution in IR action spectroscopy experiments with sodium doped water clusters“, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** (2021) DOI: 10.1039/d0cp05390b.